Bevezetés az elméleti fizikába 2

Gombás Pál
Kisdi Dávid

AKADÉMIAI KIADÓ · BUDAPEST

Gombás Pál — Kisdi Dávid

BEVEZETÉS AZ ELMÉLETI FIZIKÁBA

Két kötetben

A könyv célkitűzése a modern elméleti fizika egész tárgykörének bemutatása. Az első kötet a klasszikus fizika fejezeteit, tehát a mechanikát, elektrodinamikát a hullámoptikával, a termodinamikát és a relativitáselméletet tartalmazza. E fejezetekben a könyv nagymértékben támaszkodik a magyar felsőoktatás kialakult módszertanára, és az egyetemeken tanított anyag mélyebb megértését és több oldalról való megvilágítását kívánja elérni.

A második kötet az anyag korpuszkuláris elméletével, a statisztikus mechanikával és a kvantumfizikával foglalkozik. E terület igen nagy kiterjedésű és állandóan újabb eredményekkel gazdagodik. A könyv anyaga úgy van kiválasztva, hogy a legfontosabb területek alapjait tárgyalja anélkül, hogy túlságosan a részletekbe hatolna.

A könyv szerzője, a kétszeres Kossuth-díjas Gombás Pál professzor, úttörő szerepet játszott a hazai elméleti fizikai kutatások megindításában. Munkássága az elméleti atomfizika, szilárdtestfizika és a magfizika területén nagy nemzetközi elismeréssel kísért eredményekkel gazdagította a tudományt. A könyv anyagának magvát a szerző egyetemi előadásai alkotják.

AKADÉMIAI KIADÓ
BUDAPEST

BEVEZETÉS AZ ELMÉLETI FIZIKÁBA

2

BEVEZETÉS AZ ELMÉLETI FIZIKÁBA

2. KÖTET

ÍRTA

DR. GOMBÁS PÁL
AKADÉMIKUS

DR. KISDI DÁVID
KANDIDÁTUS
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

AKADÉMIAI KIADÓ, BUDAPEST 1971

© *Akadémiai Kiadó, Budapest 1971*

AK k 7174

PRINTED IN HUNGARY

II. kötet

NEGYEDIK RÉSZ: AZ ANYAG KORPUSZKULÁRIS ELMÉLETE. STATISZTIKUS MECHANIKA

Előszó és bevezetés 11

Tizenkilencedik Fejezet

Az anyag korpuszkuláris elmélete

1. Bevezetés 13
2. §. A korpuszkulák létezésének kimutatása. Kémiai alaptörvények 14
3. §. Az elektrolízis Faraday-féle törvényei 16
4. §. A Brown-féle mozgás 16
5. §. Töltéssel bíró sugarak részeinek megszámlálása. Wilson kísérlete, szcintilláció, tűszámláló, héliumrészek megszámlálása 17
6. §. Szilárd testek korpuszkuláris szerkezete 19
7. §. A korpuszkulák elemi sajátságai 21
8. §. Az elemi töltés meghatározása Millikan szerint 21
9. §. A töltés és a tömeg viszonyának meghatározása korpuszkulák esetében 23
10. §. Elektron, proton 27
11. §. Az α-részek szóródása 28
12. §. Izotópia 33
13. §. A Franck—Hertz kísérlet. Gerjesztett atomok energianívói 36
14. §. Az atomok mágneses momentuma 39
15. §. Atomok és molekulák elektromos momentuma 44
16. §. A fotoelektromos effektus. A foton 44
17. §. A Compton-effektus 46
18. §. Anyaghullámok 48
19. §. Néhány megjegyzés az elemek periodusos rendszeréhez 49
20. §. Atommagok 50
21. §. A radioaktivitás 62
22. §. Magreakciók 70
23. §. A szilárd testek korpuszkuláris elméletének alapjai 73
24. §. A rácsenergia 76
25 §. Rácsrezgések 83
26. §. A rácsfrekvenciák meghatározása 89
27. §. A háromdimenziós rácsok rezgései 103
28. §. Longitudinális és tranzverzális rácsrezgések 110
29. §. Gázok diffúziója 119
30. §. Töltött részek áramlása külső erőtér hatására gázban 129

Huszadik Fejezet

Statisztikus mechanika

1. §. Bevezetés 132
2. §. A gázok korpuszkuláris szerkezete 132
3. §. Entrópia és valószínűség 133
4. §. Ideális gáz sűrűségeloszlásának meghatározása. A klasszikus vagy Boltzmann-féle statisztika 136
5. §. Liouville tétele. A fázistér 140
6. §. A Maxwell—Boltzmann-féle energiaeloszlás 141
7. §. Sebességeloszlás ideális gázban 144
8. §. Ideális gáz állapotegyenlete. A Boltzmann-állandó és gázállandó közti összefüggés 148
9. §. Az ekvipartició tétele és alkalmazása a fajhőre 149
10. §. A kvantumstatisztika alapjai 152
11. §. A Bose—Einstein statisztika 153
12. §. Az egyatomos Bose-gáz 157
13. §. Az ideális gáz elfajulása alacsony hőmérsékleten 162
14. §. A plazma 166
15. §. A hőmérsékleti sugárzás 170
16. §. Anyag és sugárzás hőmérsékleti egyensúlya 176
17. §. A Fermi—Dirac-statisztika 178
18. §. Az elektrongáz 182
19. §. Az elektrongáz viselkedése extrém körülmények között 185
20. §. Az elektrongáz fajhője 193
21. §. A relativisztikusan elfajult elektrongáz 194
22. §. A szilárd testek fajhője 198

ÖTÖDIK RÉSZ: KVANTUMMECHANIKA

Huszonegyedik Fejezet

A Bohr-féle atomelmélet

1. §. A hidrogénatom Bohr-féle elmélete 205
2. §. A Moseley-törvény 211
3. §. Alkáli- és hasonló atomok spektrumai 212
4. §. A korrespondencia-elv 214
5. §. A Stark- és Zeeman-effektus 215
6. §. Spinkvantumszám, belső kvantumszám 216
7. §. A hiperfinom struktúra 217
8. §. A többelektronkonfigurációk energiatermjei és azok szimbólumai 218
9. §. Pauli elv. A periódusos rendszer felépítése a Pauli-elv alapján 219
10. §. Az elemek kémiai viselkedésének értelmezése az atomszerkezet alapján. Néhány megjegyzés a kémiai kötésre vonatkozóan 222
11. §. A sávos spektrumok elemeinek rövid összefoglalása 223

Huszonkettedik Fejezet

A hullámmechanika alapjai

1. §. Általános áttekintés 226
2. §. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció 227
3. §. A kauzalitás elve a kvantummechanikában 231
4. §. Hullámok fázis- és csoportsebessége 232
5. §. Anyaghullámok 234
6. §. A Schrödinger-egyenlet 238
7. §. A Schrödinger-egyenlet származtatása a variációs elvből 242
8. §. Sajátfüggvények, sajátértékek 243
9. §. A klasszikus mechanika mennyiségeinek kvantummechanikai értelmezése. Operátorok 247
10. §. Az elektronspin kvantumelmélete 252
11. §. A korrespondencia elv. Átmeneti valószínűségek 258

Huszonharmadik Fejezet

Egyszerű példák a Schrödinger-egyenlet megoldására

1. §. Szabad tömegpont 263
2. §. A síkbeli rotátor 264
3. §. A harmonikus lineáris oszcillátor 266
4. §. A derékszögű potenciálvölgy 270
5. §. Részecskék áthaladása derékszögű potenciálvölgyön 273
6. §. Részecskék áthaladása a potenciálfalon. Alagúteffektus 276
7. §. Periodikus potenciál 278
8. §. Mozgás centrális erőtérben 282
9. §. Az impulzusmomentum 285
10. §. A mágneses momentum 291
11. §. A háromdimenziós potenciálvölgy 295
12. §. Merev falú gömbbe zárt részecske 296
13. §. A térbeli oszcillátor 297
14. §. A hidrogénatom 302
15. §. A Kratzer-féle potenciál 309
16. §. A térbeli rotátor 313
17. §. A kéttest-probléma 314

Huszonnegyedik Fejezet

A legegyszerűbb közelítő módszerek és alkalmazásaik

1. §. Perturbációszámítás 318
2. §. Az anharmonikus lineáris oszcillátor 322
3. §. Síkbeli rotátor elektromos erőtérben 323

4. §. A mag véges kiterjedésének hatása az atom energianívóira 324
5. §. A spin-pálya kölcsönhatás 326
6. §. A Zeeman-effektus kvantumelmélete 328
7. §. A hidrogénatom Stark-effektusa 332
8. §. A kételektron-probléma 333
9. §. Variációs módszer 340
10. §. A héliumatom alapállapota 343
11. §. A H_2^+ molekula-ion 345

Huszonötödik Fejezet

Szórásszámítás

1. §. A szóródás elméletének alapjai. A hatáskeresztmetszet 350
2. §. A parciális hullámok módszere 352
3. §. Szóródás háromdimenziós potenciálvölgyön 356
4. §. A szórási és kötött állapotok egységes elmélete. Szórási rezonanciák 359
5. §. A radioaktív α-bomlás 367
6. §. Az integrálegyenlet-módszer 370
7. §. Szóródás merev falú gömbön 373
8. §. A Coulomb-szórás 375
9. §. Kis energiájú részecskék szóródása 380
10. §. Példák a zérus energiájú hullámfüggvény meghatározására 385
11. §. A Born-közelítés 390
12. §. Elektronok szóródása atomokon 395

Huszonhatodik Fejezet

Relativisztikus kvantummechanika

1. §. $\frac{1}{2}$-es spinű részecskék. A Dirac-egyenlet 398
2. §. A Dirac-egyenlet szimmetrikus alakja 402
3. §. Mozgás elektromágneses térben 405
4. §. A Dirac- egyenlet szimmetriatranszformációi 410
5. §. A szabad mozgás. Síkhullámok 419
6. §. A Dirac-egyenlet megoldása centrális erőtér esetén 423

Huszonhetedik Fejezet

Lineáris vektorterek a kvantumelméletben. Mátrixmechanika

1. §. Bevezetés 432
2. §. Az állapotvektorok és az operátorok matematikai tulajdonságai 433
3. §. A kvantummechanika törvényeinek általános megfogalmazása 444

4. §. A mátrixmechanika alapjai 459
5. §. A lineáris harmonikus oszcillátor 470
6. §. A hullámmechanika és a mátrixmechanika kapcsolata 474
7. §. A Dirac-féle bra és ket vektorok 484

Huszonnyolcadik Fejezet

Lippmann—Schwinger szóráselmélet

1. §. Bevezetés 490
2. §. Kölcsönhatási reprezentáció 490
3. §. Az S operátor 492
4. §. Az átmeneti valószínűség meghatározása 495
5. §. A Lippmann—Schwinger egyenlet 498
6. §. Potenciálszórás 499
7. §. Centrális erőtér 502
8. §. Centrális szórás koordinátareprezentációban 506

Huszonkilencedik Fejezet

A kvantummechanikai többtestprobléma

1. §. A többtestprobléma Schrödinger-egyenlete 508
2. §. Az impulzusmegmaradási törvény. A súlypont mozgása 510
3. §. Az impulzusmomentum megmaradási törvénye 515
4. §. Azonos részecskék. Pauli-elv 519
5. §. Spintől független kölcsönhatás 526
6. §. Betöltési szám-reprezentáció. Emissziós és abszorpciós operátorok 529
7. §. A kölcsönhatás figyelembevétele perturbációszámítással azonos Fermi-részecskék esetén 539
8. §. A Hartree—Fock-módszer 545
9. §. A Hartree—Fock-módszer alkalmazása kételektron-problémára 553
10. §. A Hartree—Fock-módszer alkalmazása nemesgáz konfigurációjú atomokra 560
11. §. Az atomok statisztikus elmélete 568
12. §. A pszeudopotenciálok módszere 572

Harmincadik Fejezet

Térelméleti módszerek alkalmazása a kvantummechanikai többtest problémában

1. §. Bevezetés 576
2. §. A Green-függvényes eljárás 578
3. §. Gráftechnika 580

4. §. A széteső gráfok 587
5. §. Az alapállapot-gráfok és a linked-cluster formula 591
6. §. Az alapállapot energiája és sajátfüggvénye 592
7. §. Kvázirészecske gerjesztések 595
8. §. Diagonális gráfok és a független kvázirészecske közelítés 597
9. §. Perturbációszámítás 599
10. §. A Bethe—Goldstone-féle módszer 602
11. §. A Brueckner-módszer 606
12. §. Fermi-gázok és folyadékok 611
13. §. Fermi-folyadékok alapállapota 614
14. §. Kvázirészecske gerjesztés Fermi-folyadékban 617
15. §. Az egyes közelítő módszerek alkalmazási köre, kis és nagy sűrűségű határeset 621
Ajánlott irodalom 623
Név- és tárgymutató 625

ELŐSZÓ ÉS BEVEZETÉS

Jóllehet a „Bevezetés az elméleti fizikába" c. mű első kötetéhez írt Előszó és Bevezetés mindkét kötetre vonatkozik, mégis célszerűnek látszik azon olvasók számára, akik csak a második kötetet kapják kézhez, a második kötethez egy rövid kiegészítő előszót és bevezetést adni.

E második kötet, mint alcíme is mutatja, a kvantumfizikát és az anyagszerkezetet foglalja magában. E kötet az egész műnek negyedik és ötödik részét, az anyag korpuszkuláris elméletét és a statisztikus mechanikát, valamint a kvantummechanikát tárgyalja a tizenkilencediktől a harmincadik fejezetig. A könnyebb kezelhetőség kedvéért ebben a kötetben is megadjuk a teljes tartalomjegyzéket.

E második kötetben tárgyalt anyag teljes megértéséhez mindenképpen ajánlatos az első kötet áttanulmányozása, mert az első kötetben tárgyalt klasszikus fizika nélkül e második kötetben tárgyalt kvantumfizika csak bizonyos mértékig, mondhatnám, csak felületesen érthető. A fizika szerves egészében a klasszikus fizika alapvető szerepet játszik.

Budapest, 1971. május

Gombás Pál

NEGYEDIK RÉSZ

AZ ANYAG KORPUSZKULÁRIS ELMÉLETE STATISZTIKUS MECHANIKA

19. FEJEZET

AZ ANYAG KORPUSZKULÁRIS ELMÉLETE

1. §. Bevezetés

A tágabb értelemben vett atomelmélet a görögöktől ered, de nem támaszkodott kísérleti megfigyelésekre és eredményekre, így bizonyos spekulatív karaktert öltött, úgyhogy ma már csak történeti jelentősége van.

Csak az újkorban, a XVII-ik század végén, a természettudományok nagy fellendülésének idején kezdett kialakulni a szűkebb értelemben vett atomelmélet, melynek segítségével egyes természeti törvényszerűségeket sikerült megmagyarázni. Ennek az elméletnek első nagyobb eredménye a gáztörvények értelmezése volt a korpuszkuláris felfogás alapján. Fontos eredmény volt az is, hogy a hőjelenségeket a korpuszkulák mozgásával sikerült értelmezni. Ekkor alakult ki a gázok kinetikus és a hő mechanikai elmélete. A korpuszkuláris felfogást más térre is átvitték, így pl. CAUCHY a rugalmas testek tulajdonságait próbálta így magyarázni. E szép fejlődésnek induló elmélet egyik legnagyobb támaszát ekkor DALTON törvénye szolgáltatta, mely szerint az elemek csak meghatározott tömegarányokban alkothatnak vegyületeket.

Nagy impulzust kapott az elmélet a múlt század végén az elektron felfedezésével és A. H. LORENTZ elektronelméletével, amely a testek elektromágneses szempontból való viselkedését a bennük mozgó töltésekre vezeti vissza és amelylyel többek között értelmezni lehetett a ritkított gázokban végbemenő kisülésekkor fellépő sugárzásokat.

A legutóbbi évtizedek alatt az elmélet rendkívül gyors fejlődésnek indult. Egymást követték a felfedezések, egyrészt kísérleti eredmények, másrészt termékeny elméletek. Így 1905-ben sikerült a már régebben ismert *Brown*-féle mozgás értelmezése, aminek segítségével meg lehetett határozni a molekulák számát megadott anyagmennyiségben. A radioaktív sugárzás felfedezése pedig lehetővé tette az elemi töltött részek megszámlálását és pályájuk láthatóvá tételét. Sikerült továbbá egyetlen elemi töltés nagyságának külön megmérése is. Elméleti téren is hatalmas fejlődés történt. 1900-ban PLANCK a fekete test sugárzásának vizsgálataival megalapozta a kvantumelméletet, mely kiinduló pontja lett a modern atomelméletnek. A fejlődés új korszaka nyílt meg, midőn BOHR 1913-ban megalkotta atomelméletét. BOHR elmélete rendkívül termékenynek bizonyult és kiindulópontja lett az atom- és molekulaspektrumok nagyszabású elméletének, mely spektrumok az atom, ill. molekula tulajdonságainak megismerésére rendkívül gazdag tapasztalati anyagot szolgáltattak. 1926-ban a kvantummechanika felfedezésével igen lényeges és alapvető fejlődésen ment át az elmélet, mely ma átfogó

erő tekintetében vetekszik a régi klasszikus elméletekkel és több tekintetben átalakította fizikai világfelfogásunkat.

A következőkben elsősorban azokat a kísérleteket írjuk le, ill. értelmezzük eredményeiket, melyek az anyag korpuszkuláris felfogását igazolják, majd rátérünk az elemi részek sajátságainak tárgyalására. A későbbiekben több korpuszkulából álló rendszerekkel fogunk foglalkozni.

2. §. A korpuszkulák létezésének kimutatása. Kémiai alaptörvények

Azokat az egynemű (homogén) anyagokat, melyeket a szokásos fizikai és kémiai módszerekkel nem tudunk átalakítani két vagy több különböző anyaggá, elemeknek nevezzük. A felbontható testeket két csoportra oszthatjuk. Előfordulhat, hogy egy látszólag homogén testben az alkotó elemek tetszés szerinti arányban fordulnak elő és ennek megfelelően az eredő test észlelhető tulajdonságait folytonosan változtatja. Ezeket az anyagokat elegyeknek nevezzük. Pl. a hidrogén és oxigén gáz minden lehetséges arányban képezhet elegyet. Ezektől lényegesen meg kell különböztetni a felbontható testeknek másik csoportját, a vegyületeket. Ezek meghatározott sajátságokkal bíró testek, melyekben az elemek csak meghatározott tömegarányokban fordulnak elő. Ilyen pl. a víz, mely 2 térfogat hidrogénnek 1 térfogat oxigénnel való reakciója alkalmával keletkezik.

Két elem többféle tömegarányban képezhet egymással vegyületet. Így pl. 2 súlyrész H 16 súlyrész O-nel vizet, 32 súlyrész O-nel hidrogénperoxidot képez. Ha valamely *A* elem bizonyos meghatározott tömegével egy másik, *B* elem többféle tömegarányban képez vegyületet, akkor a *B* elem vegyülő tömegei úgy aránylanak egymáshoz, mint a kis egész számok. Fentebbi példánkban az O vegyülő tömegei 1 : 2 arányban voltak. Ezt a törvényt a *sokszoros súlyviszonyok törvényének* nevezzük.

Megállapíthatjuk az egyes elemek azon tömegeit, amelyek egy kiválasztott anyag meghatározott mennyiségével, pl. 16 g O-nel vegyülnek. Ily módon minden elemre megállapíthatunk egy vagy több vegyülő súlyt, amelyek egy elem esetében kis egész számú viszonyban vannak egymással. Fontos tapasztalati tény, hogy a többi elem egymással vegyülő súlyaik arányában képez vegyületet.

Ha gázok vegyülését vizsgáljuk, azt találjuk, hogy megegyező hőmérsékleten és nyomáson azon gázok térfogatai, melyek egymással vegyületet képeznek, valamint a vegyületek térfogatai közt kis egész számú arányok állnak fenn. Így pl. 1 térfogat H 1 térfogat Cl-gázzal 2 térfogat sósavgázt képez, 2 térfogat H 1 térfogat O-nel pedig 2 térfogat vízgőzt képez.

Az elemek vagy vegyületek molekulasúlyarányának az ugyanazon térfogatú (ugyanazon hőmérsékletű és nyomású) gázok tömegeinek arányát nevezzük, ha az O molekulasúlyának 32-t választjuk. Ezzel az elemek és vegyületek molekulasúlya meg van határozva. A vegyülő súlyok közül pedig a legkisebbeket, amelyek egész számú sokszorosaival a molekulasúlyok előállíthatók, *atomsúly*oknak nevezzük.

Tehát valamely elem atomsúlyának meghatározásánál a következőképpen járunk el. Először meghatározzuk számos vegyület százalékos összetételét, melyben az elem előfordul. Másodszor meghatározzuk ezeknek a vegyületeknek és magának az elemnek is a molekulasúlyát. Azt a legkisebb súlyt, amely az illető elemből ezekben a molekulasúlyokban előfordul, nevezzük az elem atomsúlyának. Így pl. az O atomsúlyának meghatározása a következő adatokból történhet:

O-vegyület	Molekulasúly	O-mennyiség
Oxigéngáz	32	32
Víz	18	16
Szénmonoxid	28	16
Széndioxid	44	32
Salétromsav	63	48
Arzéntrioxid	396	96
Foszforoxiklorid	156	16

Ezekben a legkisebb előforduló O-mennyiség 16. Elvileg persze sohasem zárható ki, hogy nem találunk egy vegyületet, melynél a molekulasúlyban 16-nál kisebb mennyiségű O fordul elő.

Az atomsúly az elemekre jellemző alapvető fontosságú állandó. Ha az O molekulasúlyát 32-nek választjuk, akkor az O atomsúlya 16. Ekkor az összes elem atomsúlya 1-nél nagyobb, legkisebb a H-é: 1,008.

Az atomsúly és molekulasúly a korpuszkuláris elmélet alapján igen egyszerű értelmet nyer, ha feltesszük, hogy

1. Az elemek és vegyületek azonos részecskékből állnak. Ezek az atomok, ill. a molekulák. A molekulák tömegeinek aránya megegyezik a molekulasúlyok arányával.

2. Egyenlő térfogatú, hőmérsékletű és nyomású gázokban a molekulák száma egyenlő.

3. A molekulák egy vagy több atomból vannak felépítve, melyek tömegeinek aránya egyenlő az atomsúlyok arányával.

Ezeknek a feltevéseknek alapján érthető, hogy a vegyületek molekulasúlyaiban az alkotó elemek atomsúlyainak sokszorosai fordulnak elő, ugyanis a molekulák csak egész számú atomokból épülhetnek fel. Egyes kémiai reakciókat is egyszerűen értelmezhetünk. Tudjuk, hogy pl. 1 térfogat H 1 térfogat Cl-gázzal 2 térfogat sósavgázt képez. A molekulasúlyok aránya kereken 2 : 70 : 36. Mivel a H és Cl atomsúlyai kereken 1, ill. 35, következik, hogy a H, a Cl és a sósavgáz 2 atomos molekulákból áll, amit a következő jelölések juttatnak kifejezésre: H_2, Cl_2, HCl. A reakció a következő egyenlet szerint megy végbe $H_2 + Cl_2 = 2HCl$. A vegyülés által a molekulák száma nem változott meg, tehát az össztérfogat sem változott meg.

Az itt tárgyalt törvényszerűségek az atomok és molekulák tömegeinek csak relatív meghatározását tették lehetővé. Egy atom vagy molekula abszolút tömegét ezek alapján nem lehet megadni.

3. §. Az elektrolízis Faraday-féle törvényei

FARADAY első törvénye szerint egy elektrolitben az alkatrészeknek az elektródákon időegységben kiváló mennyisége arányos az áram intenzitásával.

A második törvény szerint ugyanazon áram által, ugyanazon idő alatt, ugyanabból vagy különböző elektrolitekből kiválasztott alkatrészek (ionok) mennyisége úgy aránylik egymáshoz, mint atomsúlyuk (ill. több atomból álló ion esetén az alkotó atomok atomsúlyainak összege), osztva az ion kémiai vegyértékével. Valamely egyvegyértékű ion grammatomjának (móljának) leválasztásához szükséges, hogy az áram 96 490 Coulomb-töltést vigyen át.

A korpuszkuláris elmélet alapján ezt úgy értelmezhetjük, hogy létezik elemi elektromos töltés és az egyvegyértékű ion egy elemi töltéssel bír.

Ha ismerjük az atomok számát a grammatomban, vagy ami ugyanaz, a molekulák számát a mólban (az ún. *Loschmidt-* (vagy *Avogadro-) féle számot*, *L*-et), akkor meghatározhatjuk az elemi töltést, vagy megfordítva, az elemi töltés, *e* ismeretével meghatározhatjuk *L*-et. Ugyanis fennáll, hogy

$$Le = 96490 \text{ Coulomb.}$$

4. §. A Brown-féle mozgás

A kémiai alaptörvények, valamint az elektrolízis alaptörvényei nem adnak felvilágosítást az atomok, ill. molekulák abszolút tömegéről és azok számáról a grammatomban, ill. mólban, a *Loschmidt*-féle számról.

Erről felvilágosítást kaphatunk a *Brown*-féle mozgás és hasonló jelenségek alapján, bár nem olyan elemi meggondolások útján, hogy azokat már most közölhetnénk. Itt most csak a jelenség kvalitatív tulajdonságait vázoljuk.

BROWN angol botanikus már 1827-ben észrevette, hogy a folyadékokban lebegő apró részek állandó mozgásban vannak, akárhogy is igyekszünk minden zavaró körülményt kiküszöbölni. Ez a teljesen szabálytalan ide-oda mozgás annál élénkebb, minél magasabb a hőmérséklet és minél kisebb a részecske. Az a körülmény, hogy a mozgás élénksége a részecskék abszolút nagyságától függ, közelfekvővé teszi a gondolatot, hogy a mozgás akkor válik észrevehetővé, ha a részecskék méretei nem túl nagyok az egyes molekulák méreteihez képest. A molekulák ide-oda mozognak a folyadékban és közben beleütköznek a lebegő részecskékbe is. Ha annak tömege igen nagy egy molekula tömegéhez képest, akkor egy lökés igen kevéssé fogja kimozdítani helyéből, továbbá a molekulák különböző irányból eredő lökéseinek hatása lerontja egymást. Ha ellenben a részecskék mérete kicsi és megközelíti a molekuláris méreteket, a részecskék mozgása nagyobb lesz. A hőmérséklettől való függés pedig arra utal, hogy a hőmérséklettel a molekulák mozgásának élénksége nő. E felfogás alapján sikerült EINSTEINnek és SCHMOLUCHOWSKInak egy formulát felállítani, mely összefüggést ad egy részecske átlagos elmozdulása, a hőmérséklet, a részecske sugara, valamint a *Loschmidt-féle szám* között.

A *Brown*-féle mozgáshoz hasonló ingadozás-jelenségekkel más téren is találkozunk, melyekből szintén következtethetünk a *Loschmidt*-féle számra. A következtetések keresztülvitele azonban az elmélet kiépítése nélkül lehetetlen. De szerencsére vannak olyan jelenségek, melyek közvetlenül elvezetnek a *Loschmidt*-féle szám ismeretéhez. Ezekkel fogunk most foglalkozni.

5. §. Töltéssel bíró sugarak részeinek megszámlálása. Wilson kísérlete, szcintilláció, tűszámláló, héliumrészek megszámlálása

Igen nagy lépéssel vitte előre a korpuszkuláris felfogás megalapozását azoknak a sugaraknak tanulmányozása, melyek radioaktív anyagokból indulnak ki. Radioaktív anyagokból háromféle sugárzás indul ki. Ezek közül kettő töltéssel bír, amint arról meg lehet győződni, ha pl. a sugarak eltérítését vizsgáljuk elektromos vagy mágneses térben. A negatív töltésű sugarakat β-, a pozitív töltésűeket α-sugaraknak nevezzük. A harmadik fajta sugárzásnak nincs töltése és ennek megfelelően nem is téríthető el elektromos és mágneses térrel. Ezeket a sugarakat γ-sugaraknak nevezzük.

Itt most e radioaktív sugarak ama sajátságaival foglalkozunk, melyekből azok korpuszkuláris szerkezetére és az emittált részek számára vonhatunk le következtetést.

Ha α-vagy β-sugarak olyan térbe hatolnak be, mely vízgőzzel van telítve, akkor ebben a térben a vízgőz cseppek alakjában kiválik, vagyis ködképződés indul meg. Abban az esetben, ha a radioaktív anyag kis mennyiségű, a köd nem nagyon sűrű, jó megvilágítással lefényképezhető és igen jellegzetes szerkezetet mutat. A kísérlet technikai kivitele abban áll, hogy a radioaktív anyagot vízgőzzel telített burába helyezzük, melyet egyik oldalon egy dugattyú zár le. A dugattyút erős rugóval úgy mozdítjuk el, hogy a gőztér adiabatikusan expandálódik, miáltal a gőz lehűl és túltelített lesz. Ugyanekkor a képződő ködről pillanatfelvételt készítünk. A felvételeken egyrészt a radioaktív anyagból kiinduló egyenes, éles vonalakat látunk, melyek néha, főképp a végük felé megtörnek, másrészt gyengébb vonalakat is látunk, melyek sokkal inkább görbültek. Ha a preparátumot vékony (0,06 mm vastag) alumíniumlemezzel borítjuk, akkor abból α-sugarak nem tudnak kilépni. Ez mutatja, hogy a vastagabb, egyenes ködvonalak az α sugaraktól, a vékony, görbültek pedig a β-sugaraktól származnak. Ha mágneses térbe helyezzük a készüléket, a vonalak ennek megfelelően térnek el irányukból, a β-részek igen erősen, az α-részek kevésbé és ellenkező irányban.

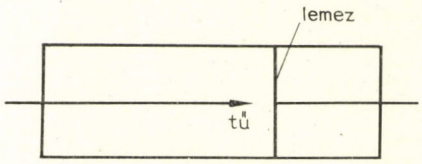
Wilsonnak ez a kísérlete mutatja, hogy mind az α-sugarak, mind a β-sugarak, vagyis a bennük haladó részek a tér kis részét foglalják el. A sugarak eltérése a levegő részecskéivel való ütközéstől eredhet. Az α-részek egyenesebb pályája azok nagyobb tömegétől származik, amit más kísérletek bizonyítanak. A *Wilson*-féle kisérlet a sugarak korpuszkuláris szerkezetét meggyőző erővel bizonyítja és arra is módot ad, hogy az ütközés, stb. finomabb részleteit tanulmányozhassuk.

A részek megszámlálására közvetlenül nem alkalmas, erre más módszerek szolgálnak.

Ha az α-részek cinkszulfid ernyőre vagy gyémántlemezre esnek, ott fluoreszcenciát idéznek elő. Ha a sugárzás elég gyenge, akkor csupa egyes felvillanások figyelhetők meg, ha a lemezre eső sugarak hatását nagyítóval nézzük. A részek megszámlálására csak azt kell tudnunk, hogy a radioaktív preparatum mennyi radioaktív anyagot tartalmaz és a sugárzás hányadrésze éri a lemezt. Ha a preparatum kis kiterjedésű, akkor a sugárzásnak a lemezre eső mennyisége úgy aránylik az egész sugárzáshoz, mint az a térszög, melyből a preparatum helyéről a lemez látszik, a teljes térszöghöz, vagyis 4π-hez.

Ily módon meg tudjuk határozni megadott radioaktív anyagból az időegység alatt kilépő α-részek számát. Így meghatározták, hogy 1g rádium, ha az átalakulási termékek sugárzásától eltekintünk, $3{,}72 \cdot 10^{10}$ α-részt sugároz ki másodpercenként. Ha a rádiummal egyensúlyban levő bomlási termékek sugárzását is figyelembe vesszük, ennek négyszeresét kapjuk.

A sugarak megszámlálására azok más hatását is felhasználhatjuk. Ilyen pl. az ionizáló hatás. Ha az α-, β-, γ-sugarak gázba jutnak, azt vezetővé teszik, vagyis ionizálják. Ez a hatás alkalmas berendezéssel egyetlen α-, ill. β-részt is kimutatható. Ilyen berendezés a *Geiger-féle tűszámláló*. Ez olyan edény, melyben egy fémlemez egy tűvel áll szemben. Ezek között olyan nagy potenciálkülönbséget létesítünk, mely közel van ahhoz, melynél a rendszer kisül. A tű hegyénél erős tér van. Ha egy töltött rész jut az edénybe, akkor az a tű közelébe jutva olyan nagy sebességet kap, hogy ionizálja a gáz atomjait és így rövid áramlökés halad át a vezetőkörön. Ezt az áramlökést alkalmas (elektroncsöves) erősítő berendezéssel észlelhetővé



1. ábra. A *Geiger*-féle tűszámláló vázlata

tesszük és így az egyes korpuszkulák áramát akár fotografikusan is regisztrálhatjuk.

Az α-részek megszámlálása közvetlenül elvezet a *Loschmidt*-féle szám meghatározásához. Ugyanis radioaktív anyagokból ott, ahova α-részek jutnak, héliumgáz fejlődik. Így pl. ha rádiumemanációt üvegcsőbe teszünk és ezt higanyba helyezzük, akkor bizonyos idő múlva a higanyban héliumot foghatunk fel. Ugyanis az α-sugarak vékony üveglemezen áthaladnak. Ha ismerjük a kilépő α-részek számát és a keletkezett hélium mennyiségét, akkor azzal a feltevéssel, hogy az α-részek a He töltött atomjaival azonosak, könnyen megállapíthatjuk egy grammatomnyi He atomjai számát, vagyis a *Loschmidt*-féle számot. 1 g rádium egy év alatt 0,167 cm^3 He-ot fejleszt 0 °C hőmérsékleten és normális nyomáson. Ennek tömege 0,0000298g. A He atomsúlya 4, tehát egy atomsúlynyi mennyiséget $1{,}33 \cdot 10^5$ év alatt fej-

lesztene 1 g rádium. Mint említettük, 1 g rádium 1 s alatt a melléktermékeivel együtt $4.3{,}72 \cdot 10^{10}$ α-részt bocsát ki. Tehát 4 g He-ban az atomok száma

$$L = 86400 \cdot 365 \cdot 1{,}33 \cdot 10^5 \cdot 4 \cdot 3{,}72 \cdot 10^{10} = 6{,}2 \cdot 10^{23}.$$

Ez L-nek legközvetlenebb, de nem legpontosabb meghatározása. L-et más módon sokkal pontosabban lehetett meghatározni, így ma a legpontosabb érték

$$L = 6{,}02_3 \cdot 10^{23}.$$

Ez nagyon jó egyezést mutat más módszerek eredményeivel.

6. §. Szilárd testek korpuszkuláris szerkezete

Szilárd testek korpuszkuláris szerkezetéről röntgensugaraknak kristályokon való áthaladásakor fellépő jelenségek adnak felvilágosítást.

Mivel a szilárd testek alakjukat megtartják, fel kell tételezni, hogy ha korpuszkuláris szerkezettel bírnak, a korpuszkulák adott egyensúlyi helyzetük körül végezhetnek csak mozgást. A kristályok szabályos alakjából pedig arra kell következtetnünk, hogy kristályos testekben a részecskék szabályosan vannak elrendezve, amint azt BRAVAIS és mások már régen feltették. A kristályokban az atomok vagy molekulák térbeli rácsot alkotnak.

Ennek megfelelően elvárható, hogy tipikus elhajlásjelenséget kapunk, ha rajta olyan hullámok haladnak át, melyek hullámhossza a rácspontok távolságával egyenlő nagyságrendű. Ezek a meggondolások vezették LAUEt, midőn 1912-ben röntgensugaraknak kristályokon való áthaladásakor a sugarak elhajlását felfedezte és így egyszerre igazolta a kristályrácsok létezését és a röntgensugarak hullámtermészetét.

Ennek a meggondolásnak bizonyító erejét még növeli az, hogy THIBAUDnak is sikerült a röntgensugarak hullámtermészetét megállapítani és hullámhosszát megmérni, közönséges üvegrácsok segítségével.

Régebben ráccsal nem sikerült röntgensugarakkal elhajlást előidézni, mert hullámhosszuk igen kicsi a legfinomabb optikai rács vonalainak egymástól való távolságához képest. THIBAUD azzal ért célt, hogy a sugarakat majdnem tangenciálisan ejtette a kristályra. Így a rácstávolságok nagyon megrövidülnek, úgyhogy a rácsállandó ebben az esetben nagyon kicsi lesz, úgyhogy már röntgensugaraknál is fellép az elhajlás. Matematikailag is nagyon egyszerűen tárgyalható ez a speciális elhajlás. Ily módon sikerült a röntgensugarak hullámhosszát megmérni, melyekre $10^{-8} - 10^{-9}$ cm nagyságrendű értékek adódtak.

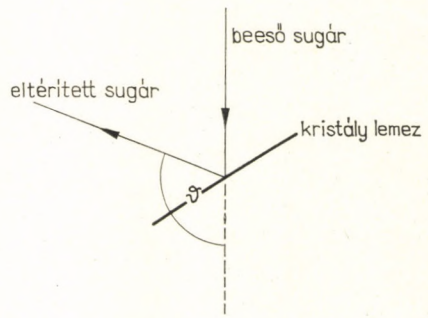
Ha a röntgensugár kristálylemezen halad át, akkor több sugárra bomlik fel. Erről meggyőződhetünk, ha a kristálylemez mögé a sugár irányában fotográfiai lemezt helyezünk el, melyen a sugarak nyomot hagynak. A lemezen nyert pontok fekvéséről számot tudunk adni, ha feltesszük, hogy a kristályban az atomok, ill. molekulák rácsot alkotnak és a beeső sugár minden részt másodlagos sugárzás kibocsátására indít, melyek interferenciája idézi elő a képet. A térbeli rácsokon

történő elhajlásjelenségek elméletét az elektrodinamikában részletesen tárgyaltuk, itt csak az eredményeket említjük meg. Ha ismerjük a rácspontok távolságát és a kristály szerkezetét, akkor az elhajlási képből a röntgensugarak hullámhosszát határozhatjuk meg. Megfordítva pedig, ha ismerjük a röntgensugarak hullámhosszát, akkor a rácsállandót és a kristály szerkezetét határozhatjuk meg.

Az elméletből következik a következő fontos összefüggés

$$2d \sin \frac{\vartheta}{2} = m\lambda,$$

ahol d két szomszédos hálózati sík egymástól való távolsága, λ a hullámhossz, m egy egész szám, ϑ pedig az eltérítés szöge. A spektrumot ϑ változtatásával nyerhetjük, amit azáltal érhetünk el, hogy a kristályt forgatjuk a beeső és a reflektált sugár síkjára merőleges tengely körül. Ezt a módszert a spektrum előállítására a forgó kristály módszerének szokás nevezni. (Lásd 13. fejezet 13. §)



2. ábra. Röntgensugarak elhajlása kristálylemezen

Ha röntgensugarat kristályporra bocsátunk, érdekes elhajlási képet kapunk. (A kristályporban minden lehetséges irányban fekszenek ún. hálózati síkok, vagyis síkok, melyek végtelen kristály esetén végtelen sok atommal vannak borítva és a rajtuk történő reflexió gyanánt fogható fel az elhajlás. Tehát minden hálózati síkhoz tartozó lehetséges eltérítés elő fog fordulni.) Mivel a kristályporban a kis kristályok minden lehetséges orientációban előfordulnak, a nyert elhajlási képben az összes orientációknak megfelelő eltérített sugarak fellépnek, vagyis a nyert elhajlási kép a beeső sugár körül szimmetrikus lesz. Ebből következik, hogy az eltérített sugarak kúpfelületeken fekszenek, melyeket egy hengerszerűen meghajlított filmen szokás észlelni. Ez a módszer DEBYE és SCHERRERTŐL származik és nagyon fontos a kristálystruktúra meghatározásánál. (Lásd 13. fejezet 13. §)

Ismert szerkezetű és rácsállandójú kristályt felhasználhatunk a sugarak hullámhosszának meghatározására. A röntgenspektroszkópiában kristálylemezt használunk rácsnak és segítségével különböző elemekben gerjesztett röntgensugarakban előforduló hullámhosszakat állapítjuk meg, vagyis a spektrumot vesszük fel. Ennek főképpen az atomok struktúrájának meghatározásánál van nagy jelentősége.

7. §. A korpuszkulák elemi sajátságai

Ha a korpuszkulák tulajdonságait akarjuk tanulmányozni, akkor a legcélszerűbb egyetlen korpuszkulát, vagy olyan rendszert vizsgálni, melyben a korpuszkulák kölcsönhatásától többé-kevésbé eltekinthetünk és melyben a korpuszkulák azonos állapotban vannak.

A kísérleti technika fejlődése lehetővé tette, hogy egyes esetekben egyetlen individuális korpuszkula hatását észleljük, pl. a *Wilson*-féle kísérletnél. Látni fogjuk azt is, hogy az elemi töltés külön is lemérhető. Bár a részek individuális vizsgálata mind nagyobb tért hódít, mégis sok esetben sok, hasonló állapotban levő korpuszkulából következtethetünk a korpuszkulák tulajdonságaira. Ilyen rendszert alkotnak pl. egyenlő nagyságú és irányú sebességgel haladó korpuszkulák, melyek olyan távol vannak egymástól, hogy kölcsönhatásuktól a kísérlet szempontjából eltekinthetünk. Ilyen rendszert korpuszkuláris sugárnak nevezünk. Az elemi részek természete, vagy a sugár keletkezésének módja szerint beszélünk katód-, β-, cső-, α-sugárról vagy neutrális atomokból, ill. molekulákból álló atom- vagy molekulasugarakról. Ezeket a sugarakat különböző hatásoknak vetjük alá, vagy pedig más anyagi rendszerre való hatásukat vizsgáljuk. Ezekből a vizsgálatokból rendkívül fontos felvilágosítást kapunk egyrészt a sugarakat alkotó korpuszkulákra, másrészt az anyagi rendszerekre is. Ide lehet sorolni az elektromágneses sugarakat is, ugyanis mai tudásunk szerint nincs olyan mélyreható különbség a korpuszkuláris sugarak és az elektromágneses sugarak között, mint azt régebben gondolták.

8. §. Az elemi töltés meghatározása Millikan szerint

Ennek a módszernek, melynek segítségével lehetséges az elemi töltés megmérése, igen nagy elvi jelentősége van. A módszer, melyet 1909-ben egymástól függetlenül fedeztek fel MILLIKAN és EHRENHAFT, a következő. Két vízszintes fémlemezből álló kondenzátor lapjai közt függőleges irányú homogén elektromos teret létesítünk. A lemezek közé kis részeket, porlasztott olaj- vagy higanycseppeket, fémrészecskéket juttatunk. Ezek vagy már a készítés módjánál fogva bírnak töltéssel, vagy alkalmas módon töltéssel láthatók el, pl. fotoelektromos hatást létesítünk rajtuk, vagy a levegőt ionizáljuk, midőn a levegőből ionokat vehetnek fel. Egy ilyen részecskére tömege folytán a nehézségi erő hat, töltése folytán pedig hat rá a kondenzátor elektromos tere. Ha a rész mozog, hat rá még a levegő súrlódása is. Kis részek súrlódó közegben állandó sebességgel mozognak. A súrlódási erő STOKES törvénye szerint a következő

$$K = 6\pi\eta a v,$$

ahol η a súrlódó közeg (jelenleg levegő) viszkozitási együtthatója, a a gömb alakú részecske sugara, v pedig a részecske sebessége. A *Stokes*-féle formula csak olyan részekre érvényes, melyek mérete nagy a gáz szabad úthosszához képest. Ez az

olajcseppeknél, melyekkel MILLIKAN dolgozott és melyek átmérője kb. 10^{-4} cm, fennáll. Az olajcseppek megfigyelése mikroszkóppal történik.

Először is megmérjük valamelyik olajcsepp állandó esési sebességét, v_0-t, ha nincs elektromos tér a kondenzátor lapjai között. Ekkor a nehézségi erő és a súrlódási erő egymással egyensúlyban vannak, vagyis fennáll a következő egyenlet

$$\frac{4\pi a^3}{3}(\rho - \sigma)g = 6\pi\eta a v_0 ,$$

ahol ρ a csepp, σ a levegő sűrűsége, g a nehézségi gyorsulás. Ha v_0-t lemérjük, akkor ebből az egyenletből a-t kiszámíthatjuk.

Ezek után lemérjük a csepp sebességét, amidőn a kondenzátor lapjai között elektromos tér van jelen. Legyen ekkor a csepp sebessége v_1. Ha a csepp töltése e_i (ahol az i indexszel azt juttatjuk kifejezésre, hogy tetszőleges csepp töltéséről van szó), akkor a nehézségi erőhöz még az elektromos erő járul és a következő egyenletet nyerjük

$$\frac{4\pi a^3}{3}(\rho - \sigma)g + \mathfrak{E}e_i = 6\pi\eta a v_1 ,$$

ahol $\mathfrak{E}$ az elektromos térerősség abszolút értéke.

Figyelembe véve az előbbi egyenletet, következik, hogy

$$6\pi\eta a v_0 + \mathfrak{E}e_i = 6\pi\eta a v_1 ,$$

$$e_i = \frac{6\pi\eta a(v_1 - v_0)}{\mathfrak{E}} .$$

A *Millikan*-féle kísérletek eredménye az, hogy az egyes cseppecskék töltése, e_i, egy bizonyos meghatározott töltésnek, e-nek kis egész számú sokszorosa. Ez a töltésegység a következő

$$e = 4{,}80_2 \cdot 10^{-10} \text{ el. sztat. egység.}$$

Lényeges, hogy az e_i-k e kis egész számú sokszorosai, mert csak így következtethetünk arra, hogy létezik egy e elemi töltés. Nagy egész számú sokszorosok a mérési hibák miatt bizonyító erővel nem bírnak.

Megemlítjük még, hogy az elemi töltésre régebben $4{,}77 \cdot 10^{-10}$ el. sztat. egységet adtak meg. Ez az érték azonban hibás volt. A hibára G. KELLSTRÖM jött rá, aki szerint MILLIKAN e kiszámításánál az akkor ismert η-t használta, mely nem volt pontos. KELLSTRÖM η-ra pontosabb értéket tudott megadni nagyon gondos mérések alapján. Ezzel az η értékkel találták azután a fenti e-értéket.

Igen kis cseppekre a *Stokes*-féle formula nem áll fenn, ekkor a formulán még egy gázkinetikai korrekciót kell alkalmazni, amely onnan származik, hogy a csepp méreteit ebben az esetben már nem lehet végtelen nagynak tekinteni a gáz molekuláinak szabad úthosszához képest. Ezt a korrigált formulát véve alapul, igen kis cseppek esetében is a fenti értékhez jutunk.

Egyes esetekben, főképp szilárd részeknél, eltéréseket kaptak a fenti e-értéktől. Ezt azonban azzal lehet magyarázni, hogy a részek sűrűsége nem ismeretes, mert szivacsos szerkezetűek.

A *Millikan*-féle kísérlet nemcsak az elemi töltés létezését bizonyítja, hanem egyúttal e legpontosabb értékét is szolgáltatja. e ismeretével a *Faraday*-féle ekvivalens töltésből meg lehet határozni L-et is, ugyanis $Le = 96490$ Coulomb, ahonnan adódik, hogy

$$L = 6{,}02_3 \cdot 10^{23}.$$

9. §. A töltés és a tömeg viszonyának meghatározása korpuszkulák esetében

Egyetlen elemi töltés elegendő arra, hogy egy kis cseppen erős elektrosztatikus térben észrevehető elmozdulást létesítsen, de egyetlen atom tömege ily módon már nem mutatható ki. Meg lehet azonban határozni töltéssel bíró sugarakban, úgymint katód-, β-, cső- és α-sugarakban haladó részecskék töltésének és tömegének viszonyát.

A módszerek mind azon alapulnak, hogy a sugarakat, vagyis a bennük mozgó töltéssel bíró részeket elektromos és mágneses erőtereknek vetjük alá, az eltérítésekből azután a töltés és tömeg viszonya, az ún. specifikus töltés és a récsecskék sebessége meghatározható.

Elektromosan töltött részekre ható elektromos és mágneses erőt a *Lorentz*-féle erőtörvény adja meg, mely a következő

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = e\mathfrak{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathfrak{H}]. \tag{19.9.1}$$

m a részecske tömege, e a töltése, $\mathbf{v}$ a sebessége, $\mathfrak{E}$ az elektromos, $\mathfrak{H}$ a mágneses térintenzitás, c a fénysebesség.

Az elektromos tér által előidézett gyorsulásra nyerjük tehát

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{e}{m}\mathfrak{E}, \tag{19.9.2}$$

a mágneses tér által előidézett gyorsulás pedig

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{e}{mc}[\mathbf{v}, \mathfrak{H}]. \tag{19.9.3}$$

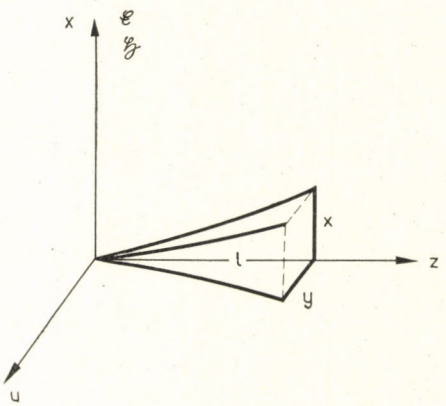
Először is megemlítjük, hogy $\mathbf{v}$ és $\frac{e}{m}$ között fontos összefüggés áll fenn. Ha a részek kezdeti sebességétől eltekintünk és ha azok U potenciálkülönbségen áthaladva $\mathbf{v}$ sebességre tesznek szert, akkor a következő egyenlet áll fenn

$$\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 = eU,$$

vagyis

$$\mathbf{v}^2 = 2\frac{e}{m}U. \tag{19.9.4}$$

Ezek után foglalkozzunk az elektromos és mágneses terek által előidézett eltérítésekkel, melyek alapján $\mathbf{v}$ és $\frac{e}{m}$ meghatározható. Alkamazzunk a sugár irányára merőleges elektromos és mágneses teret. Legyen a két tér iránya egymással párhuzamos, a nyert kitérések egymásra tehát merőlegesek. Vegyünk fel egy koordinátarendszert és helyezzük a z-tengelyt a sugár haladási irányába. Az elektromos és a mágneses tér iránya legyen az x-tengely. Ennek megfelelően az elektromos tér x irányú, a mágneses tér y irányú kitérést idéz elő.



3. ábra. Elektronsugár eltérítése elektromágneses térrel

Ha az elektromos tér által előidézett kitérést x-szel jelöljük, a fentiek alapján nyerjük, hogy

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{e}{m}|\mathfrak{E}| = \frac{e}{m}\mathfrak{E},$$

$$x = \frac{1}{2}\frac{e}{m}\mathfrak{E}t^2,$$

ahol t az l távolság befutásához szükséges idő, tehát $t = \frac{l}{v}$. Ezzel nyerjük, hogy

$$x = \frac{1}{2}\frac{e}{m}\mathfrak{E}\frac{l^2}{v^2} = \frac{l^2}{2}\frac{e}{m}\frac{\mathfrak{E}}{v^2}. \tag{19.9.5}$$

Összehasonlítva ezt az összefüggést (9.4)-gyel, látjuk, hogy ezekből $\frac{e}{m}$ és v nem határozható meg.

A mágneses tér által létesített gyorsulás, mint láttuk,

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{e}{mc}[\mathbf{v}, \mathfrak{H}],$$

tehát

$$\left|\frac{d\mathbf{v}}{dt}\right| = \frac{e}{mc}|[\mathbf{v}, \mathfrak{H}]| = \frac{e}{mc} v\mathfrak{H},$$

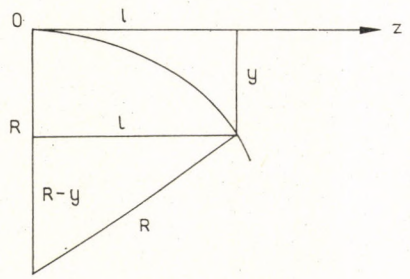
ugyanis $\mathbf{v}$ merőleges $\mathfrak{H}$-ra.

A sebességnek tehát csak az iránya változik, a nagysága nem, vagyis $|dv/dt| =$ $=$ konst., tehát a sugár körpályát ír le. Tudjuk, hogy ebben az esetben a gyorsulás $\frac{v^2}{R}$, ahol R a görbületi sugár, tehát nyerjük, hogy

$$\frac{v^2}{R} = \frac{e}{m}\frac{1}{c} v\mathfrak{H},$$

$$\frac{1}{R} = \frac{e}{m}\frac{1}{c}\frac{\mathfrak{H}}{v}.$$

R többféleképpen határozható meg, pl. l távolságban lemérjük a sugárnak a z-tengelytől való távolságát, y-t, melynek segítségével, mint a 4. ábrából látható, R



4. ábra. Az elektronpálya görbületi sugarának meghatározása

könnyen kiszámítható:

$$R^2 = l^2 + (R - y)^2,$$

$$R^2 = l^2 + R^2 + y^2 - 2Ry,$$

$$R = \frac{l^2 + y^2}{2y}.$$

Ha y l-hez képest kicsi, ami többnyire fennáll, akkor l^2 mellett y^2 elhagyható és nyerjük, hogy $R = l^2/2y$, vagyis

$$\frac{1}{R} = y\frac{2}{l^2}.$$

Tehát

$$y = \frac{l^2}{2c} \frac{e}{m} \frac{\mathfrak{H}}{v}. \tag{19.9.6}$$

Ezzel tehát előállítottuk az elektromos és a mágneses tér által előidézett eltérítéseket.

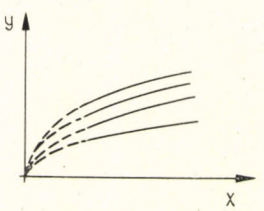
A (9.5–6) formulák alapján nyerjük, hogy

$$\frac{y}{x} = \frac{1}{c} \frac{\mathfrak{H}}{\mathfrak{E}} v = av$$

és

$$\frac{y^2}{x} = \frac{l^2}{2c^2} \frac{\mathfrak{H}^2}{\mathfrak{E}} \frac{e}{m} = b \frac{e}{m},$$

ahol a és b csak l, $\mathfrak{E}$ és $\mathfrak{H}$-tól függő arányossági faktorok. Ebből következik, hogy ha a z-tengelyre merőleges, vagyis az xy síkkal párhuzamos, fotografiai lemezen 0-tól pl. l-távolságra felfogjuk a sugarat, akkor az ugyanezen $\frac{e}{m}$-hez tartozó, de különböző sebességű részek egy parabolán fekszenek, $\frac{y}{x}$ a sebesség mértéke. Ezt észleljük, ha inhomogén, vagyis különböző sebességű részeket tartalmazó sugár nyomait egy fotográfiai lemezen vizsgáljuk. Ha a sugárban levő összes részre $\frac{e}{m}$ azonos, akkor egy, ha különböző, akkor több parabolát kapunk. Csősugaraknál, ahol különböző ionok mozognak, így módszert kapunk a különböző $\frac{e}{m}$ viszonyok, vagyis specifikus töltések összehasonlítására. J. J. THOMSONnak ezt a módszerét tovább finomította ASTON és DEMPSTER, akiknek vizsgálatairól az izotópia tárgyalásánál lesz még szó.



5. ábra. Különböző fajlagos töltésű részekből álló sugár nyomai a detektáló lemezen

A specifikus töltés vizsgálata katód és radioaktív sugaraknál arra az eredményre vezetett, hogy ez mindkét fajta sugárzásnál azonos és sokkal nagyobb, mint bár-

mely ionnál. Mégpedig azt találták, hogy

$$\frac{e}{m} = 5{,}273 \cdot 10^{17} \quad \text{el. sztat. egység.}$$

Mivel (mint azt több körülmény bizonyítja) a katód- és β-sugarakban haladó részecskék egy negatív elemi töltéssel bírnak, a fenti eredményből meghatározhatjuk a részecskék tömegét, ha e helyébe az elemi töltést helyettesítjük. Így nyerjük, hogy a részecskék tömege

$$m = 9{,}11 \cdot 10^{-28} \text{ g}.$$

A hidrogénion specifikus töltésére azt találták, hogy

$$\frac{e}{M} = 2{,}893 \cdot 10^{14} \quad \text{el. sztat. egység.}$$

Minthogy a H-ion 1 pozitív elemi töltéssel bír, a H-ion tömegére nyerjük, hogy

$$M = 1{,}65 \cdot 10^{-24} \text{g}.$$

A specifikus töltés katód- és β-részeknél a sebességgel változik. Erről a relativitás elmélete ad számot. A relativitás elmélete szerint az impulzus nem $m\mathbf{v}$, hanem $\frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \mathbf{v}^2/c^2}}$, tehát a mozgásegyenlet így írandó

$$\frac{d}{dt} \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{\mathbf{v}^2}{c^2}}} = e\mathfrak{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathfrak{H}]. \tag{19.9.7}$$

A részecske tehát úgy viselkedik, mintha tömege a sebességgel növekedne és a fénysebességnél végtelenné válna. Ez az oka annak, hogy a specifikus töltés a sebességtől függ. Igen gyors részeknél, melyek elérik a fénysebesség 98%-át, a tömeg a nyugalmi tömeg ötszöröse. Ezeken pontos méréseket végeztek, melyek igazolják a relativitáselméletet.

10. §. Elektron, proton

Az újabb kutatások egyik legfontosabb eredménye, hogy a katódsugarakban, a β-sugarakban, továbbá a fotoelektromos effektusnál (mellyel még foglalkozni fogunk) és az izzó testekből kilépő sugarakban olyan negatív töltésű részek mozognak, melyek teljesen azonos tulajdonságokkal bírnak, függetlenül a testtől, melyből kiindulnak és függetlenül keletkezésük módjától. A részecskék töltése és tömege a különböző esetekben ugyanaz. Ezek a részecskék az *elektronok*. Töltésük negatív, mégpedig 1 elemi töltés, tömegük pedig, mint már láttuk, $m = 9{,}11 \cdot 10^{-28}$g.

Egy másik fontos elemi rész a *proton*, mely a pozitív töltésű H-atommal azonos. A proton a legkisebb töltésű és a legkisebb tömegű stabilis pozitív rész (a pozitron-

tól itt eltekintünk), mely pozitív sugarakban előfordul. Töltése +1 elemi töltés, tömege pedig, mint szintén már láttuk, $M = 1{,}65 \cdot 10^{-24}$g.

Sokáig úgy vélték, hogy a proton és az elektron az egyedüli elemi részek, de a fizika rohamos fejlődése folyamán több részecskét fedeztek fel, melyeket szintén elemi részeknek kell tekinteni.

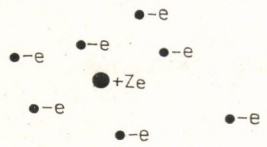
11. §. Az α-részek szóródása

A különböző korpuszkuláris és hullámtermészetű sugárzásoknak különböző anyagokon való áthaladásakor fellépő jelenségekből a legfontosabb felvilágosításokat kapjuk az anyag felépítéséről. Így a röntgensugarak elhajlása elvezetett a kristályos anyagok rácsszerű felépítésének ismeretéhez. Az α-részek egyes anyagokon való áthaladásakor fellépő szóródásának vizsgálata pedig az atomra vonatkozó egészen alapvető megismeréshez vezet el. Az α-részek 2 pozitív elemi töltéssel bíró He-atomok, melyek tömege az elektron tömegéhez viszonyítva nagy, kb. 7400-szorosa az elektron tömegének. Egy ilyen nagy sebességgel mozgó rész csak nagy hatásra téríthető ki pályájából, ezt mutatják a *Wilson*-féle kamrával készített felvételek is, melyek szerint pályájuk egyenes vonal, szemben az elektronoknak sokszorosan görbült pályájával. Az α-részek elektronokkal való találkozása az α-rész pályájára teljesen hatástalan lesz. Az α-részek eltérítéséhez nagy tömegű töltött rész szükséges. Ez rendkívül kedvező, mert így felvilágosítást remélhetünk arról, hogy az atom mely része a tömeg hordozója.

Amint a *Wilson*-féle ködkamrakísérletből látható, az α-részek közül némelyik hirtelen nagyobb szögű eltérítést szenved irányától. A lényeges itt az, hogy az eltérítés hirtelen történik és nem tevődik össze sok kis eltérítésből. Ez a szórás elméletét lényegesen egyszerűsíti, mert a többszörös eltérítéseket, mivel ritkák, elhanyagolhatjuk, vagyis egy α-rész eltérítését úgy tekinthetjük, hogy azt 1 atom idézi elő.

A szórásra vonatkozó úttörő munkát RUTHERFORD, MARSDEN, GEIGER, CHADWICK végezték. Egy radioaktív anyagból, pl. rádium C-ből egy keskeny α-sugárnyalábot vékony lemezre ejtettek. A sugár a lemezen áthalad és a benne mozgó α-részek irány- és sebességváltozást szenvednek. Mi a következőkben csak az irányváltozással fogunk foglalkozni, vagyis meg fogjuk határozni, hogy hány rész jut az eltérítés folytán a ϑ és $\vartheta + \Delta\vartheta$ szögek közti térrészbe, ahol a ϑ szöget az el nem térített sugár irányától mérjük. Az említett kutatók ezenkívül megvizsgálták a szórás függését a lemez vastagságától, a lemez anyagi minőségétől és a beeső részek sebességétől. A vizsgálatra a szcintillációk módszerét alkalmazták, vagyis megszámlálták egy kis lemezre eső részek számát. Ismerni kellett persze azt a térszöget, amely alatt a lemez a radioaktív preparátumból látszik és azt a szöget, melyet a preparátumtól, vagyis a sugárzás forrásától a lemezhez vont irány az el nem térített α-sugár irányával bezár. Igen fáradságos vizsgálataik folyamán, melyeknél kb. 200 000 szcintillációt számláltak meg, igen részletesen megállapították a szórás törvényszerűségeit.

A nyert eredményekről igen egyszerű elméleti feltevések alapján adhatunk számot. Az atomról feltételezzük, hogy az egy pozitív töltéssel bíró súlyos magból és az azt körülvevő elektronok rendszeréből áll. Az atom tömege, leszámítva az elektronok elhanyagolható kicsi tömegét, a magban van egyesítve. A mag töltése az elemi töltésnek egészszámú többszöröse, $+ Ze$, ahol Z egész szám, mely az atom egyik legfontosabb jellemzőjének fog bizonyulni. A magot körülvevő elektro-



6. ábra. Az atom szerkezetének vázlatos képe

nok képtelenek jelentékenyebb befolyást gyakorolni az α-részre az előbb említett okoknál fogva, úgyhogy csak a mag és az α-rész kölcsönhatását kell figyelembe venni. Úgy tekinthetjük, hogy a mag nyugszik, ha tömege az α-rész tömegéhez képest nagy. A mag és az α-rész között a *Coulomb*-féle erőt tételezzük fel, mely jelen esetben taszítás és mivel az α-rész töltése $+ 2e$, a következő

$$\mathbf{K} = + \frac{2Ze^2}{r^3}\mathbf{r}, \tag{19.11.1}$$

ahol $\mathbf{r}$ a magból mint origóból a rádiuszvektor irányába mutató egységvektor, r a magtól való távolság. Az erő tehát a *Kepler*-probléma (1.11.2) erőkifejezésének felel meg, esetünkben

$$B = 2Ze^2$$

esz. Az α-rész mozgása tehát a *Kepler*-törvényeket fogja követni, és mivel most B pozitív, vagyis az erő taszító, ezért a pálya hiperbóla lesz. Az α-rész irányváltozását a hiperbóla aszimptótái által bezárt Θ szög szabja meg; az irányváltozás, mint az ábra mutatja, $\vartheta = \pi - \Theta$-val egyenlő. Az aszimptóták által bezárt szöget az (1.11.6) képlet adja meg, ennek alapján írhatjuk, hogy

$$\operatorname{tg}\frac{\vartheta}{2} = \frac{1}{\operatorname{tg}\dfrac{\Theta}{2}} = \sqrt{\frac{2mZ^2e^4}{EN^2}}. \tag{19.11.2}$$

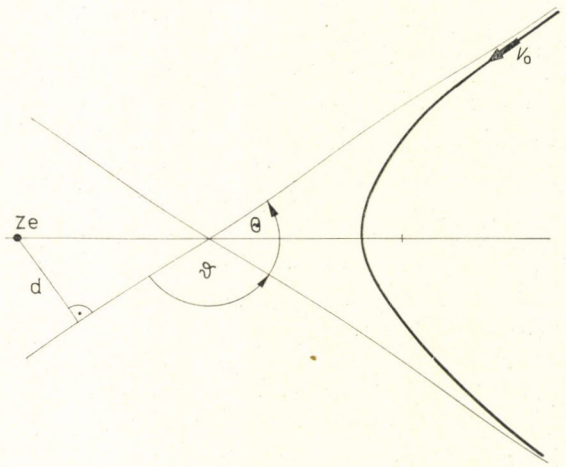
Itt E a bombázó α-rész energiája, N pedig a Ze töltésű magra vonatkoztatott impulzusmomentumának abszolút értéke. Ha az α-rész kezdeti sebessége v_0 és a pálya kezdeti szakaszának megfelelő aszimptóta távolsága a magtól d, akkor

$$E = \frac{1}{2}mv_0^2 \quad \text{és} \quad N = mv_0 d.$$

E formulák felhasználásával kapjuk, hogy

$$\operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2} = \frac{2Ze^2}{mv_0^2 d}. \tag{19.11.3}$$

Ezzel az egyszerű formulával ϑ meg van adva, mint d függvénye. Ezt a formulát azonban közvetlenül kísérletileg nem kontrollálhatjuk, mivel nem tudjuk megmondani egy meghatározott α-részről, hogy a kezdeti iránytól a mag milyen távolságra van. Azonban valószínűségi meggondolásokkal, statisztikai módszerek segítségé-



7. ábra. Az α-rész irányváltozása a Ze töltésű mag hatására

vel ereményünket kontrollálni tudjuk. Ez a nehézség különben végig megtalálható a modellszerű atomelméletben, ugyanis nem tudjuk pontosan meghatározni egyetlen korpuszkula mozgását vagy általában egyetlen elemi folyamat lefolyását determináló kezdeti adatokat. Mégpedig, mint később látni fogjuk, a nehézségek, eltekintve a mérőműszerek pontatlanságától, elvi természetűek. Azáltal, hogy az itt adott elemi meggondolásnál áttérünk statisztikai eloszlásra, a d paramétert, melyet nem lehet megmérni, kiküszöböljük. Az elemi folyamat igy csak szemléletes segédkép. Tehát már eleve a következőképpen kellene megfogalmazni kérdésünket: ha az α sugárnyaláb belekerül egy mag terébe, milyen lesz a sugárnyaláb eloszlása a mag elektromos terén való áthaladás után? Ez az az út, melyet a kvantummechanika követ. Mi itt egyelőre a szemléletes képeket vesszük alapul.

Legyen annak a lemeznek a vastagsága, melyen az α sugarak áthatolnak s és legyen az 1 cm^3-ben levő atomok (vagyis egyúttal a szórásra mérvadó atommagok) száma N. Ekkor egy d és egy $d + \Delta d$ sugarú hengerpalástokkal határolt és a beeső sugár körül szimmetrikusan elhelyezkedő térfogatrészben levő szóró centrumok, vagyis magok száma

$$\Delta N = 2\pi d s N \Delta d.$$

ΔN természetesen átlagérték, melynek bevezetése azért jogos, mert a beeső α sugárnyaláb véges keresztmetszetű, úgyhogy a lemez különböző helyén hatol át, ami persze ekvivalens azzal, hogy egy végtelen vékony α sugárnyaláb előtt a lemezt bizonyos határokon belül ide-oda mozgatjuk, úgyhogy a sugár a lemez különböző részein hatol át.

Ha feltételezzük, hogy minden eltérített rész csak egyszer szenved szóródást, vagyis egyszer lesz eltérítve, nyerjük hogy n beeső rész közül

$$\Delta n = n 2\pi d s N \Delta d \tag{19.11.4}$$

lesz eltérítve irányától a d és $d+\Delta d$ sugarú palástokkal határolt térrészben levő magok által. A (11.3) egyenlet alapján, mely a ϑ és d közti összefüggést adja meg, nyerjük, hogy

$$d = \frac{2Ze^2}{mv_0^2} \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2}. \tag{19.11.5}$$

Innen következik, hogy

$$\Delta d = \frac{Ze^2}{mv_0^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \Delta\vartheta. \tag{19.11.6}$$

A mínusz előjeltől eltekinthetünk, mert itt csak az abszolút értékek érdekelnek bennünket. Ezzel a két formulával nyerjük a Δn számára levezetett formulából, hogy

$$\Delta n = n \frac{4\pi s N Z^2 e^4 \cos \frac{\vartheta}{2}}{m^2 v_0^4 \sin^3 \frac{\vartheta}{2}} \Delta\vartheta. \tag{19.11.7}$$

Ez a formula adja azoknak az α részeknek számát, melyek a ϑ és $\vartheta + \Delta\vartheta$ közé eső irányokban lettek eltérítve.

$\vartheta = 0$-ra a formula nem használható, ugyanis ekkor $\Delta n = \infty$, ami azt jelentené, hogy gyakorlatilag az összes α–rész szórás nélkül halad át a lemezen. Ez a helytelen eredmény onnan származik, hogy mi d felső határának ∞-t vettünk, mint (11.5)-ben. Pontosabban: d felső határa gyanánt egy a lemez atomjainak közepes távolsága által meghatározott véges értéket kellene venni.

A szórási formula kísérletileg nehéz elemek esetében beigazolódott. Tehát alapfeltevéseink, melyekből ezt a formulát levezettük (a mag és az α rész közti elektrosztatikus erők működése és az egyszerű szórás feltételezése), helyeseknek bizonyultak. Amint látható, Δn erősen függ ϑ-tól. A következőkben néhány

kísérleti értéket adunk meg, melyek mutatják a szögtől való erős függést

ϑ	ezüst	arany
150°	22	33,1
120°	33	52
75°	136	211
30°	5260	7800
15°	105400	132000

Tehát nagyobb szögek (nagyobb eltérítések) felé a részek száma igen erősen csökken. A részek megszámlálása a szcintillációk módszerével történt.

Különböző anyagok szórását összehasonlítva az a nagyon fontos eredmény adódott, hogy Z, vagyis a mag töltéseinek száma megegyezett az illető elem rendszámával, vagyis azzal a számmal, mely megadja, hogy az elemek periodikus rendszerében az illető elem hányadik helyet foglalja el. Régebben a periodikus rendszerben az elemeket atomsúlyuk szerint rendezték, de a rendezettség csak akkor volt teljes, ha egyes helyeken felcserélték az elemek sorrendjét. Így kobalt-nikkelnél, argon-káliumnál és tellur-jódnál az atomsúlyok fel vannak cserélve. Nagyon lényeges volt az a felismerés, hogy a periodikus rendszerben az elemek rendezésére nem az atomsúly, hanem a magtöltések száma a mérvadó. Ez mérvadó az elem fizikai és kémiai viselkedésére. A magtöltések száma a periodikus rendszerben tovább haladva folytonosan nő és nem mutatja azokat az anomáliákat mint az atomsúly, melyeket előbb említettünk. Egy semleges atomnak töltése nem lévén, a magot éppen annyi elektron veszi körül, hogy azok töltése semlegesítse a mag pozitív töltését. Tehát fennáll a következő fontos összefüggés: *a magtöltések száma egyenlő a rendszámmal és tovább egyenlő a magot körülvevő elektronok számával.* Az olyan atomot, mely töltéssel bír, mint ismeretes, ionnak nevezzük, ezek tehát olyan atomok, melyek egy vagy több elektront vesztettek és így az elektronok a mag pozitív töltését nem tudják teljesen kompenzálni.

A periodikus rendszer első eleme a H, rendszáma tehát 1, ennek megfelelően magtöltéseinek száma 1. A semleges H-atomban a magot körülvevő elektronok száma szintén 1. A He rendszáma 2, a magtöltéseinek száma és a magot körülvevő elektronok száma tehát szintén 2. Az α-rész, mint említettük, 2 elemi töltéssel bíró He-atom, vagyis egy He-mag. Hasonlóan mehetünk tovább a periodikus rendszerben.

Megemlítjük még, hogy az atomsúly általában nő a rendszámmal (eltekintve az említett esetektől), de sokkal gyorsabban, mint a rendszám.

A rendszám igen pontos meghatározása a *Moseley*-törvény alapján lehetséges, mellyel a kvantummechanikában fogunk foglalkozni.

Az α-részek szóródása módot nyújt arra, hogy megvizsgáljuk a *Coulomb*-féle erők érvényességét a mag közvetlen közelében. A szórási formulát a *Coulomb*-erők érvényességének feltevésével vezettük le, ha tehát a *Coulomb*-erők érvényesek, akkor formulánk szerint $\Delta n v_0^4$ egy meghatározott elemre vonatkozóan egy meghatározott irányban állandó. v_0-t változtatva megvizsgálhatjuk ennek az összefüggésnek érvényességét. Így megállapították, hogy az a távolság, amelyig a *Coulomb*-

féle erők érvényesek, 10^{-12} cm nagyságrendű. Ekkorának kell tehát egyúttal tekintenünk a mag dimenzióinak nagyságrendjét. Az atomok dimenzióinak nagyságrendje 10^{-8} cm, tehát 10000-szer nagyobb. Ebben a nagyságrendű, mag körüli, térrészben foglalnak helyet az elektronok.

12. §. Izotópia

Ha a pozitív töltésű sugarak, tehát a cső-, anód- és α-sugarak részecskéi, vagyis a sugarakban nagy sebességgel haladó ionok specifikus töltését az eltérítési módszerrel meghatározzuk, akkor az ionok töltéseinek ismeretével meghatározhatjuk a részek tömegét. Csősugaraknál a sugarakban haladó elemi részek a kisülési csőben jelenlevő ritkított gáz ionjaival, vagy töltött, vagyis ionizált molekuláival azonosak. Így tehát meg lehet határozni egyes ionok, ill. a hiányzó elektronok tömegének hozzászámításával (ami csak igen nagy pontosság esetén szükséges) a megfelelő atomok, ill. molekulák tömegét.

PROUT már 1815-ben azt a felfogást fejtette ki, hogy minden atom H-atomokból van felépítve, amit támogat az a tény, hogy sok atom atomsúlya közel a H-atomsúly egészszámú sokszorosa. De miután az atomsúlyok pontosabb meghatározásánál több esetben elég nagy eltérést kaptak az atomsúlyok egészszámúságától és egy atomot semmiképp sem sikerült felbontani, vagy átalakítani más elem atomjává, PROUT hipotézise feledésbe merült.

A kérdés a radioaktív anyagok felfedezésével új stádiumba jutott. A radioaktív anyagoknál azt tapasztaljuk, hogy azok sugárzások kibocsátásával átalakulnak más anyagokká, melyek kémiailag éppen úgy viselkednek, mint az elemek.

Az átalakulások tanulmányozásával igen érdekes eredményre jutottak. Ugyanis találtak elemeket, pl. a rádium D, melynek összes fizikai és kémiai tulajdonsága annyira megegyezik az ólommal, hogy ha egyszer összekeveredett vele, közönséges fizikai vagy kémiai módszerekkel nem voltak többé szétválaszthatók. Ugyanazokat a vegyületeket alkotják, oldhatóságuk, halmazállapotuk és több más tulajdonságuk megegyezik, de atomsúlyaik különböznek egymástól. Az ilyen elemeket *izotóp elemeknek* nevezzük, mert a periodikus rendszerben nyilván ugyanarra a helyre kell helyezni őket.

Az izotópia megoldotta az egész számú atomsúlyoktól való eltérés kérdését. Ha az egyes elemek atomjainak tömegét a csősugarak eltérítésének módszerével meghatározzuk, akkor azt találjuk, hogy az egyes elemek általában többféle tömegű atomból vannak összetéve, melyek atomsúlya már igen nagy megközelítéssel egész szám.

A nem radioaktív elemek izotóp elemekből való összetételét J. J. THOMSON fedezte fel a párhuzamos elektromos és mágneses térrel való eltérítés módszerével. A módszert rendkívül kifinomította ASTON, aki szintén elektromos és mágneses eltérítést alkalmazott ún. tömegspektrográfjában. Nála azonban az elektromos és mágneses tér merőleges egymásra és úgy van megválasztva, hogy különböző sebességű, de ugyanazzal az $\frac{e}{m}$-mel bíró sugarak egy fényérzékeny lemez ugyan-

azon pontjában egyesüljenek, miáltal a sugarak erős intenzitással lépnek fel. Végül megemlítjük még DEMPSTERT-t, aki az egyes izotóp elemek számarányát határozta meg azáltal, hogy nem fotográfiai módszert használt, hanem a sugárzást ionizációs kamrában fogta fel.

Ezekkel a módszerekkel számos elemet alkotó izotóp elemet sikerült felfedezni. Így pl. megállapították, hogy a H három, a He legalább kettő, a Li kettő, a X kilenc, a Cl kettő, a Hg kilenc izotóp elemből áll. A maximális atomsúlykülönbség az egyes izotópok között xenonnál tizenkettő.

Később megfigyelték, hogy az izotóp elemek spektruma, főképpen a molekulaspektrum, kis eltéréseket mutat. Ennek a jelenségnek tanulmányozása újabb izotóp elemek felfedezéséhez vezetett, így pl. oxigénnél 3 izotópot fedeztek fel, melyek atomsúlya 16, 17, 18. Ezeket a következőképpen jelöljük ^{16}O, ^{17}O, ^{18}O.

Az izotóp elemek fizikai és kémiai sajátságai olyan nagy mértékben megegyeznek, hogy ha egyszer összekeveredtek, a szokásos fizikai vagy kémiai módszerekkel nem választhatók szét, sőt számarányukat sem tudjuk megváltoztatni. Innen érthető az izotópokból összetett elemek atomsúlyainak nagyfokú állandósága. Az elemek izotópjai összekeveredtek a Föld kialakulásának idején és nem tudtak ismét szétválni.

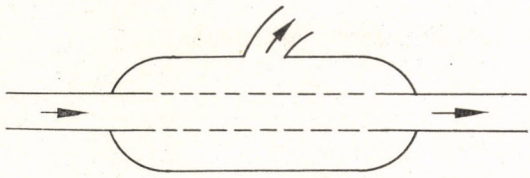
Azonban egy elem izotópjai nem teljesen azonosak. Így pl. atomsúlyaik különböznek egymástól és így a szétválasztásukra megvan az elvi lehetőség. Már a töltött sugarak eltérítése is ilyen módszer. Ha a sugarakat nagyobb intenzitással állítjuk elő, akkor külön felfogva őket, szét lehet választani az izotópokat. Minden más jelenség, melyre az atomsúly mérvadó, szintén alkalmas erre. Így a diffúziósebesség vagy a párolgási sebesség felhasználásával igen sok elem izotópjainak részleges elkülönítése sikerrel járt.

Egyes izotópok teljes elválasztása is sikerült. Így pl. G. HERTZ a diffúziót használta fel az elválasztásra, mivel a diffúzió sebessége az atomsúllyal csökken. HERTZ egy üvegcsőben áramoltatta az izotópokat tartalmazó gázt, melynek egy részét porózus agyaghengerrel helyettesítette. Ezt tágabb üvegcső vette körül, melybe a könnyebb izotópban gazdagabb gázkeverék jut, míg a belső csőben a nehezebb izotóp halmozódik fel. A diffúzió az agyaghengeren át történik. Így csak az izotópok számarányát tudta a keverékben megváltoztatni. HERTZ ezt a folyamatot 48-szor megismételte, úgyhogy a hidrogén- és neon-izotópok oly teljes elkülönítését érte el, hogy a másik izotóp spektroszkópiai módon sem volt kimutatható. A Li-izotópok elkülönítése oly módon sikerült, hogy csősugarakat állítottak elő lehetőleg nagy intenzitással és az izotópokat az elektromos és mágneses térrel való eltérítés módszerével választották szét.

Az izotópia felfedezése megmagyarázta az egész számú atomsúlyoktól való durvább eltéréseket és nagymértékben alátámasztotta a *Prout*-féle hipotézist.

De az egészszámú aránytól az ún. tiszta elemeknél is adódtak eltérések, melyek a kísérleti hibákat határozottan felülmúlták. Így pl. ha az ^{16}O izotóp magjának tömegét 16-nak vesszük, akkor a legfinomabb tömegspektroszkópiai mérések szerint a ^{4}He magjának tömege 4,0041, a ^{1}H magjának tömege 1,0081 és a ^{12}C magjának tömege 12,0048. Semleges atomoknál ezekhez hozzáadandó még az

elektronok tömege, amely ilyen pontosságnál észrevehető, ugyanis egy elektron tömege a fenti egységekben 0,00054. Eszerint a ^{4}He-mag tömege nem egyenlő 4 proton tömegével, hanem annál kisebb. 4 proton tömege 4,0324, míg a ^{4}He tömege 4,0041. A ^{4}He tömege tehát 0,0283 egységgel kisebb, mint 4 proton tömege. Egész általánosságban is fennáll ez. Az atommag tömege mindig kisebb, mint az alkatrészek tömegeinek összege, melyből azt felépítve gondoljuk, ezért beszélünk tömeghiányról, vagy tömegdefektusról.



8. ábra. Izotópok szétválasztása diffúziós módszerrel

A tömeghiány meglepő értelmezést talált EINSTEIN relativitáselméletének egyik tétele alapján. Eszerint minden tömeg ekvivalens bizonyos energiamennyiséggel és viszont minden energiamennyiséghez tömeg tartozik. Az összefüggés a következő

$$E = mc^2$$

és viszont

$$m = \frac{E}{c^2},$$

ahol c a fénysebesség, E és m pedig az egymásnak megfelelő energia, ill. tömeg. Mivel c igen nagy szám, igen kis tömeghez már nagy energia tartozik és fordítva. Így pl. 0,01 atomsúlyegység, vagyis $\frac{0{,}01}{L}$ g tömeg a következő energiával ekvivalens

$$\frac{0{,}01}{L} c^2 = \frac{0{,}01}{6.02 \cdot 10^{23}} \cdot 3^2 \cdot 10^{20} = 1{,}5 \cdot 10^{-5} \text{ erg},$$

vagyis egy 10^{-26} g nagyságrendű tömegnek már egy 10^{-5} erg nagyságrendű energia felel meg. A közönségesen előforduló energiákhoz mérhetetlen kis tömeg tartozik.

Az atomfizikában használatos energiaegység az elektronvolt, melyet eV-vel szokás jelölni. Ez az a munka, melyet 1 elektron végez, ha 1 volt potenciálkülönbségen halad át. Innen nyerjük, hogy

$$1 \text{ eV} = 4{,}80 \cdot 10^{-10} \frac{1}{300} \text{ erg} = 1{,}6 \cdot 10^{-12} \text{ erg}.$$

Tehát 0,01 atomsúly egységnek, vagyis $\frac{0{,}01}{L}$ g tömegnek $9{,}4 \cdot 10^6$ eV felel meg (tehát kereken 10 000 000 eV).

A ^{4}He tömegdefektusának kb. $27 \cdot 10^6$ eV és 1 elektron tömegének durván $\frac{1}{2} \cdot 10^6$ eV felel meg.

A tömeghiányt úgy értelmezzük, hogy az atommagnak elemi részekből való létrejötténél egy exoterm folyamat játszódik le, melynél hő, ill. energia szabadul fel, ill. távozik el. Az ehhez tartozó tömeg a tömeghiány, mely mértékéül szolgál a mag stabilitásának. Kémiai reakcióknál felszabaduló hő molekulánként néhány eV nagyságrendű, így pl. a H_2 molekulánál 4,38 eV, tehát láthatjuk, hogy az atommagok kötésének erőssége több milliószorosa a molekulák kötésének.

Ez megnyilvánul a radioaktív jelenségeknél felszabaduló energiamennyiségeknél, továbbá abban is, hogy az atom közönséges fizikai és kémiai behatásokkal szemben stabilisnak mutatkozik és az atombontás csak akkor sikerül, ha igen nagy sebességű töltött részek hatásának, pl. α-sugárzásnak tesszük ki az atomokat, amint ezt későbbi tárgyalásaink folyamán még látni fogjuk. Itt csak azt akarjuk kiemelni, hogy a tömeghiány magyarázatot talált és nem szól az ellen, hogy az atommagok protonokból és neutronokból vannak felépítve.

Az atommaggal a későbbiek során még részletesen fogunk foglalkozni, a következőkben az atomok és molekulák fontos, általános tulajdonságaival ismerkedünk meg.

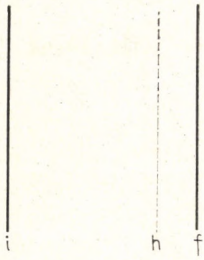
13. §. A Franck–Hertz kísérlet. Gerjesztett atomok energianívói

Az atomok szerkezetéről alapvető ismeretekhez jutunk, ha elektronoknak atomokkal való ütközését vizsgáljuk, amint azt J. FRANCK és G. HERTZ alapvető kísérletükben tették.

Első alapvető tapasztalatunk az volt, hogy ha az elektronok sebessége, melyek egy gáz atomjaival ütköznek, egy bizonyos, a gázra jellemző kritikus értéken alul marad, akkor az elektronoknak a gáz atomjaival való ütközése rugalmasnak tekinthető. Ennek megállapítására a következő berendezés alkalmas. Egy i izzószálból kilépő elektronokat az i és h háló közti potenciálkülönbséggel felgyorsítjuk, és ekkor a potenciálkülönbségtől függő átlagsebességre tesznek szert. Az elektronok az i és h közti térben ütköznek a gáz atomjaival és áthaladnak a h hálón. A h hálóhoz közel elhelyezünk egy f fémlemezt. A h háló és az f lemez között ellenteret létesítünk (mely kisebb, mint a gyorsító tér), melyet változtatva megállapíthatjuk az f-hez érkező elektronok sebességeloszlását. Ugyanis az i és f közt folyó áramból meghatározhatjuk az f-re érkező elektronok számát, az f és h közti ellentér nagyságából pedig megállapíthatjuk, hogy milyen nagy az f-re jutó elektronok sebessége, mert az f lemezre csak azok az elektronok juthatnak, melyek sebessége elegendő nagy ahhoz, hogy az f és h közti ellenteret leküzdjék. Az elektronok i és h között számtalan ütközést szenvednek az atomokkal, az ütközések száma változik az i és h közti távolsággal. Ha a végsebesség az ütközések számától független, akkor az elektronoknak a gázatomokkal való ütközése rugalmas. Ily módon megállapították, hogy, eltekintve azoktól a gázoktól, melyek megkötik az elektronokat, vagyis az elektronaffin gázoktól, mindig találunk olyan sebesség-

intervallumot, melyben az ütközés rugalmas. Kis sebességű elektronok ütközése gázatomokkal mindig rugalmas.

Végezzük most a következő kísérletet. Az *f* és *h* közti potenciálkülönbséget, mellyel az ellenteret létesítjük, tartsuk állandóan, az *i* és *h* közti potenciálkülönbséget, *U*-t, pedig kezdjük növelni. Azt fogjuk tapasztalni, hogy kis *U*-knál az ütközés rugalmas, majd *U* növelésével elérkezünk egy olyan *U* értékhez, melynél



9. ábra. A *Franck—Hertz*-cső vázlata

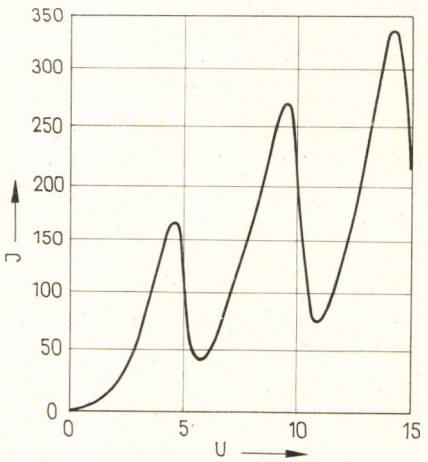
az ütközés megszűnik rugalmas lenni. Mi az *i* és *f* közti áramintenzitást mérjük, mely addig, míg az ütközések rugalmasak, *U*-val növekszik, mert az elektronok sebessége nő és így az időegységben *f*-re jutó elektronok száma, vagyis az áramintenzitás is növekszik. Amidőn elérjük azt az *U*-t, melynél az ütközés rugalmatlanná válik, akkor az elektronok elvesztik sebességüket, tehát az áramintenzitás hirtelen csökken. Ha *U*-t tovább növeljük, akkor az a hely, melynél az elektronok a rugalmatlan ütközésnek megfelelő kritikus sebességet felveszik, nem közvetlenül *h* előtt lesz, hanem *i*-hez közelebb jut, úgyhogy onnan *h*-ig ismét sebességre tesznek szert a gyorsító tér hatása alatt. Ha *U*-t tovább növeljük, akkor az elektronok *h* előtt ismét elérik a kritikus sebességet és ismét rugalmatlan ütközés következik be. *U*-t tovább növelve a folyamat ismétlődik. Tehát az áramintenzitás, *I* mint *U* függvénye, ekvidisztáns maximumokkal és minimumokkal rendelkezik. Ily módon meghatározhatjuk az ún. első kritikus potenciált, amelynek megfelelő sebességű elektronok rugalmatlanul ütköznek a gázatomokkal.

Ezzel a módszerrel azonban nem lehetett elérni azt, hogy az elektronok az első kritikus potenciálnak megfelelő sebességnél nagyobb értéket vegyenek fel. Egy kis módosítással viszont ez elérhető. *i* és *f* között két hálót alkalmazunk, h_1-et és h_2-t. h_1-et egészen közel hozzuk *i*-hez, úgyhogy a ritkított gáztérben *i* és h_1 között az elektronok nem ütköznek még atomokkal. Az *i* és h_1 között potenciálkülönbséget létesítünk, mely felgyorsítja az elektronokat. Azután az elektronok a h_1 és h_2 közti térbe jutnak, ahol ütközéseket szenvednek, de melyben elektromos erőtér nincs. *f* és h_2 között ismét ellenteret létesítünk. Ezzel a módszerrel elérhetjük, hogy a h_1 és h_2 közti térbe, ahol az ütközések történnek, tetszés szerinti sebességű elektronok jutnak. A kísérletnél ismét az *i* és *f* közti áramot vizsgáljuk, melynek intenzitása éppen úgy, mint előbb, minden egyes rugalmatlan ütközés esetében minimummal bír. Így a kritikus potenciálok egész sorát sikerült megállapítani. Ha a

gyorsító potenciált, vagyis az elektronok sebességét folyton növeljük, akkor egy bizonyos határnál ionizáció áll be, vagyis az atomból leválik egy elektron, így az atom egy pozitív ionra és egy elektronra bomlik fel.

Higanygőzben pl. az első kritikus potenciál 4,9 volt, a második 6,7 volt, ionizáció pedig 10,2 voltnál lép fel.

Mi itt a *Franck*- és *Hertz*-féle kísérleti berendezéseknek csak a lényegét tüntettük fel vázlatosan, a technikai kivitelre nem voltunk tekintettel.



10. ábra. Áramintenzitás a *Franck—Hertz*-csőben a gyorsító potenciál függvényeként

A kritikus potenciálok, ill. az ezeknek megfelelő energiaértékek az atomok, ill. molekulák legfontosabb jellemző állandóihoz tartoznak. Ugyanis az első rugalmatlan ütközés alkalmával a gáz fényt kezd kibocsátani, mégpedig egy meghatározott hullámhosszúságú spektrumvonal kezd fellépni. Magasabb kritikus potenciáloknál mind több és több vonal lép fel. A vonalak frekvenciái és a kritikus potenciáloknak megfelelő elektronenergiák között egészen alapvető összefüggés áll fenn. Így ha $E_1, E_2, \ldots, E_i, \ldots$ jelentik sorban a kritikus potenciáloknak megfelelő elektronenergiákat (tehát azokat az energiákat, melyeket az elektron a kritikus potenciáloknak megfelelő potenciálküszöb átfutása után felvesz, vagyis pl. Hg-nál 4,9 eV, 6,7 eV) és ν_{ik} a fellépő frekvenciákat, akkor a következő összefüggés áll fenn

$$h\nu_{ik} = E_i - E_k, \qquad \nu_{ik} = \frac{E_i - E_k}{h}, \tag{19.13.1}$$

ahol h nagyon fontos univerzális atomi állandó, az ún. *Planck*-féle állandó, melynek számértéke

$$h = 6{,}626 \cdot 10^{-27} \text{ erg sec.}$$

Tehát a fellépő vonalak frekvenciái a megfelelő kritikus elektronenergiák és h hányadosaiként fejezhetők ki. Ez a nevezetes összefüggés az ún. *Bohr*-féle frekvenciafeltétel. Ezt úgy értelmezzük, hogy az elektronok a kritikus potenciáloknak megfelelő energiaértékeket átadják a gáz atomjainak, ami által ezek olyan állapotba jutnak, melyben energiájuk a normális értéknél éppen a kritikus energiaértékek valamelyikével nagyobb. Ha az atom visszatér eredeti állapotába, akkor a megfelelő energiát sugárzás alakjában adja le. A sugárzás frekvenciáját a *Bohr*-féle frekvenciafeltétel határozza meg.

Az atomot az eddigiek alapján úgy gondoljuk felépítve, hogy a pozitív töltésű atommag körül keringenek a negatív töltésű elektronok. Az atom energiája nem vehet fel tetszőleges értékeket, hanem csak bizonyos meghatározott értékeket, aminek megfelelően BOHR feltételezte, hogy az elektronok csak meghatározott pályákon keringhetnek. Ha az atom egy magasabb energiájú állapotból átmegy egy alacsonyabb energiájú állapotba, az energiakülönbséget fény (esetleg infravörös, ultraibolya vagy röntgensugárzás) alakjában kisugározza. A fordított folyamatnál az atom fényt nyel el. Az emittált vagy abszorbeált fény frekvenciáját (13.1) határozza meg, amiből következik, hogy *az atom csak meghatározott frekvenciájú sugarakat képes emittálni vagy abszorbeálni.* E kérdéssel a kvantummechanikában bőven fogunk foglalkozni.

A továbbiakban még néhány alapvető ténnyel és az atomok és molekulák néhány fontos tulajdonságával kell megismerkednünk, így elsősorban az atomok mágneses momentumával.

14. §. Az atomok mágneses momentuma

Atomok mágneses momentumát először 1921-ben O. STERN és W. GERLACH mutatták ki. Módszerük alapgondolata, mellyel ezüstatomok mágneses momentumát határozták meg, a következő. Mágneses momentummal bíró atomra homogén mágneses tér csak irányító hatást fejt ki, transzlációs erőt nem. Ilyen transzlációs erő változó erősségű, vagyis inhomogén térben lép fel. Ezt könnyen beláthatjuk, ha a momentumot egy dipólussal állítjuk elő, tekintet nélkül arra, hogy ez esetleg egy áramrendszertől származik. Ezt megtehetjük, mert egy áramrendszer egy dipólusnak felel meg.

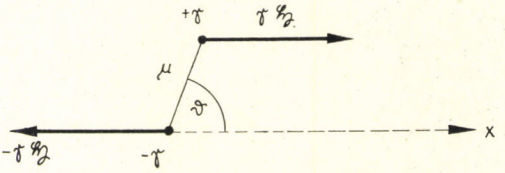
Legyen adva egy l hosszúságú kis mágnes, melynek pólusaiban a mágneses mennyiség $+\gamma$, ill. $-\gamma$, momentumának abszolút értéke tehát

$$\mu = l\gamma.$$

Mint az elektrodinamikában láttuk, erre a mágnesre egy $\mathfrak{H}$ erősségű homogén mágneses tér egy

$$M = -\mu\mathfrak{H}\sin\vartheta \qquad (19.14.1)$$

abszolút értékű forgatómomentumot gyakorol, ahol ϑ a μ és $\mathfrak{H}$ közti szög. A mínusz előjel azt jelenti, hogy a tér ϑ-t kisebbíteni akarja (lásd a 11. ábrát). Transzlációs erő ebben az esetben nem lép fel.



11. ábra. Mágneses dipólus homogén mágneses térben

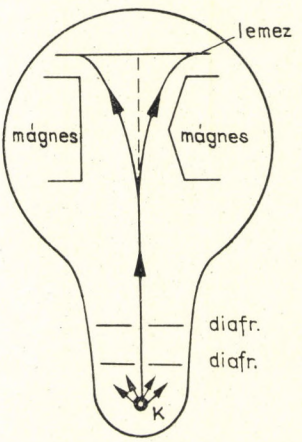
Ha a tér inhomogén, akkor a dipólus két végén fellépő mágneses erő nem ugyanakkora. Legyen a $+\gamma$ erősségű pólusnál a mágneses térerősség $\mathfrak{H}'$, a $-\gamma$ erősségű pólusnál a mágneses térerősség pedig $\mathfrak{H}$, akkor a fellépő transzlációs erő, ha az egyszerűség kedvéért csak az x-tengely irányában (lásd a 11. ábrát) tételezünk fel inhomogenitást, a következő

$$\Delta \mathbf{K} = \gamma \mathfrak{H}' - \gamma \mathfrak{H} = \gamma \left(\mathfrak{H} + \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial x} \Delta x \right) - \gamma \mathfrak{H} = \gamma \left(\mathfrak{H} + \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial x} l \cos \vartheta \right) - \gamma \mathfrak{H},$$

$$\Delta \mathbf{K} = \mu \cos \vartheta \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial x}. \qquad (19.14.2)$$

Tehát az erő az x-irányban egyenlő a momentum vetületének és a tér x-irányban vett gradiensének szorzatával.

STERN és GERLACH kísérleti berendezése a következő volt. Evakuált üvegcsőben a megvizsgálandó anyagot, fémet (K) izzították, miáltal az minden irányban atomsugarakat bocsátott ki, vagyis az illető anyag gőze eláramlott. A részecskék sebességét a hőmérséklet határozta meg. Két diafragma közbeiktatásával sikerült egy meghatározott irányú atomsugarat létesíteniük, melyet inhomogén mágneses téren hagytak áthaladni. Ezt a teret úgy állították elő, hogy a mágnes egyik pólusát sík lapnak, a másikat ékalakúnak választották. Végül pedig az atomsugarat egy lemezen felfogták, melyen az atomsugár lecsapódása nyomot hagyott.



12. ábra. A *Stern—Gerlach*-kísérlet vázlata

STERN és GERLACH ezüstatomsugárral végeztek először kísérletet, mely igen fontos eredményhez vezetett. Ha az ezüstatomok mágneses momentummal bírnak, akkor inhomogén térben a sugár részecskéi, tehát maga a sugár is eltérítést szenved. Ha az atomok meghatározott nagyságú, de tetszés szerinti irányítású mágneses momentummal bírnak, akkor a sugár elszélesedése várható, melynek két határát azok az atomok alkotják, melyek momentuma a tér irányába és a térrel ellentétes irányba mutat. Ezzel szemben viszont a kísérlet eredménye az volt, hogy a felfogólemezen két nyomot kaptak (kettős vonalat), vagyis a sugár kettéoszlott megfelelően annak, hogy az atomok mágneses momentumai a mágneses térben irányítottak és vagy a tér irányába, vagy azzal ellentétes irányba mutatnak.

A momentum nagyságát is meg lehetett határozni, erre adódott, hogy

$$\mu = 9{,}2 \cdot 10^{-21} \text{ gauss cm}^3. \tag{19.14.3}$$

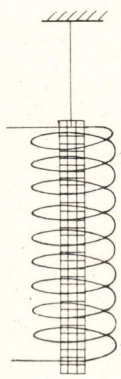
Ez számértékre nézve a kísérleti hibák határán belül megegyezik egy *Bohr-féle magneton*nal, melyet az atomelmélet alapján lehet értelmezni, ahol mint a mágneses momentum elemi egysége szerepel. Az atomelmélet alapján nyerjük, hogy

$$\mu_B = \frac{eh}{4\pi mc} = 9{,}28_3 \cdot 10^{-21} \text{ gauss cm}^3, \tag{19.14.4}$$

ahol h a *Planck*-féle állandó.

A fenti kísérleti eredmény meglepő és igen fontos atomi sajátságot állapít meg, mégpedig azt, hogy először is létezik elemi mágneses momentum, másodszor a mágneses momentum csak egészen meghatározott irányokban áll be a mágneses térhez képest.

Más tapasztalatok arra utalnak, hogy az atomok mágneses momentumai mindig az elemi mágneses momentum egész számú sokszorosai. Ezen atomok mágnesződését úgy foghatjuk fel, hogy a mágnesződésnél az atomburkot felépítő elektronok mágneses momentumai egy irányba állnak be. A mágnesződés ebből ered.



13. ábra. Az *Einstein—de Haas*-kísérlet vázlata

A mágneses momentummal impulzusmomentum is jár együtt, amint azt EINSTEIN és DE HAAS következő kísérlete mutatja. Függesszünk egy hosszú, henger alakú lágyvasdarabot rugalmas fonálra úgy, hogy a hossztengelye körül forog-hasson és helyezzük ezt egy koaxiális szolenoid belsejébe. Ha a szolenoidba áramot bocsátunk, a lágyvas mágneseződik, ha az áram irányát megfordítjuk, a lágyvas átmágneseződik és egyúttal tengelye körül elfordul, vagyis forgatómomentum lép fel. Vagyis midőn a vas mágneses momentuma ellenkező irányúvá válik, az impulzusmomentuma megváltozik. Ez tehát azt mutatja, hogy egy mágneses momentumhoz impulzusmomentum tartozik. Lemérve a forgatómomentumot, megállapíthatjuk egy meghatározott mágneses momentumhoz tartozó impulzusmomentumot. Azt találták, hogy egyes anyagoknál, így vasnál, nikkelnél, kobaltnál, egy *Bohr*-féle magnetonhoz tartozó impulzusmomentum

$$\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi},$$

ahol h ismét a *Planck*-féle állandó.

Ez az eredmény igen meglepő. Ugyanis, ha a mágneses momentum az atomban keringő elektronoktól származik, akkor a mechanikai és mágneses momentumok viszonya $\frac{2mc}{e}$ és nem $\frac{mc}{e}$, mint itt találták.

Ezt egyszerűen beláthatjuk. Egy zárt áramkör mágneses momentumának abszolút értéke az áramintenzitás és a körülzárt terület szorzata osztva c-vel, ha elektrosztatikai egységeket használunk

$$|\mu| = \frac{IF}{c}.$$

Ha az áramot a mag körül keringő elektronok alkotják, akkor I helyébe $-\frac{e}{\tau}$ kerül, ha τ egy körülfutás ideje, tehát μ abszolút értéke

$$|\mu| = \frac{1}{c}\frac{e}{\tau}F = \frac{1}{c}e\frac{F}{\tau},$$

ahol $\frac{F}{\tau}$ a magtól vont rádiuszvektor által az időegység alatt súrolt terület.

A formulát általánosítva és vektorjeleket használva, több elektron esetére nyerjük, hogy

$$\mu = -\frac{1}{c}\sum_i e\frac{1}{2}[\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i] = -\frac{e}{2c}\sum_i [\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i],$$

ahol $\mathbf{r}_i$ az i-edik elektronhoz vont rádiuszvektor, $\mathbf{v}_i$ pedig az i-edik elektron sebessége. (A formula a momentum irányát is helyesen adja meg.)

A megfelelő mechanikai impulzusmomentum pedig

$$\mathbf{N} = \sum_i m[\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i] = m \sum_i [\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i] ,$$

ahol m az elektron tömege. Tehát $\mu = -\frac{e}{2mc}\mathbf{N}$.

Tehát a mechanikai és mágneses momentumok abszolút értékeinek viszonya elektrosztatikus egységekben

$$\frac{|\mathbf{N}|}{|\mu|} = \frac{2mc}{e} . \tag{19.14.5}$$

Amint már említettük, vas, nikkel, kobaltnál ennek a viszonynak a felét találták. Ezt úgy értelmezzük, hogy ezeknél az anyagoknál nem az elektronok mag körüli keringésétől származik a momentum, hanem minden elektronnak van saját mechanikai és mágneses momentuma és a vas-, nikkel-, kobaltnál észlelt mechanikai és mágneses momentumok ezek eredője. Mégpedig az elektron mechanikai momentuma $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$, mágneses momentuma pedig $\frac{eh}{4\pi mc}$, vagyis éppen 1 *Bohr*-féle magneton. Ezt a mechanikai és mágneses momentumot nevezik *spin*-nek. Régebben úgy értelmezték, hogy az elektron saját tengelye körül forgó mozgást végez, de ez a magyarázat nehézségekbe ütközött, mert az elektron kerületi sebessége nagyobb lenne, mint a fénysebesség. Mi az elektronspint és a hozzátartozó mágneses momentumot az elektron új jellemző tulajdonságának fogjuk tekinteni, mely éppoly fontos jellemző állandója az elektronnak, mint a töltése vagy tömege. A spin mélyebb értelmezését DIRAC nyújtotta a relativisztikus kvantummechanikában.

Azoknál az anyagoknál, melyeknél az $\frac{|\mathbf{N}|}{|\mu|} = \frac{2mc}{e}$, a momentumok az elektronok mag körüli keringéséből származnak, az elektronok spinjei és mágneses momentumai pedig kompenzálódnak és nem járulnak hozzá N-hez, ill. μ-höz. Vannak egyes anyagok, úgymint egyes sók és a ritka földfémek, amelyeknél $\frac{|\mathbf{N}|}{|\mu|}$-re $\frac{mc}{e}$ és $\frac{2mc}{e}$ közti viszonyt találtak, amit úgy értelmezünk, hogy itt a momentum az elektronok mag körüli keringéseinek momentumaiból és a spineknek megfelelő mágneses momentumokból tevődik össze.

Az a hipotézis, hogy az elektron spinnel és saját mágneses momentummal bír, GOUDSMIT-től és UHLENBECK-től származik és rendkívül termékenynek bizonyult. Nemcsak a magnetomechanikai anomália értelmezése vált lehetségessé ezzel a hipotézissel, hanem a spektrumok elméletében is nélkülözhetetlennek bizonyult, úgyhogy a tapasztalat teljes mértékben igazolta GOUDSMIT és UHLENBECK hipotézisét.

15. §. Atomok és molekulák elektromos momentuma

Mivel az atom vagy molekula pozitív és negatív töltések rendszere, ha elektromos térbe jutnak, a tér a pozitív töltésű magot, vagy magokat az egyik irányba, a negatív töltésű elektronokat a másik irányba fogja elmozdítani, minek következtében elektromos momentum lép fel. Ez a momentum, mely csak a külső tér hatására jön létre, a polarizációs momentum.

Ezen kívül nem szimmetrikus molekulák esetében a külső elektromos tértől független elektromos momentum is felléphet (pl. a HCl molekula elektromos dipólmomentummal bír).

Az állandó elektromos dipólmomentumok nagyságrendje 10^{-18} cgs., ami megfelel annak, hogy a dipólt alkotó töltések nagyságrendje 10^{-10} el. sztat. egység, az atomok egymástól való távolsága a molekulákban pedig 10^{-8} cm nagyságrendű.

Kísérleti kimutatásuk hasonlóan történhet, mint az atom mágneses momentumának kimutatása, csak az inhomogén mágneses teret kell inhomogén elektromos térrel helyettesíteni. De ezek a kísérletek csak a momentum nagyságrendjéről nyújtanak tájékoztatást, pontosabb ismereteinket a dielektromos állandóból merítjük, mellyel az elektromos dipólusok szoros összefüggésben vannak.

16. §. A fotoelektromos effektus. A foton

Ha fény, ultraibolya sugárzás, röntgensugár vagy γ-sugár egy fémlemezre esik, akkor abból elektronok távoznak, miáltal a fém pozitív töltést vesz fel. Az elektronok sebességét megmérhetjük és azt találjuk, hogy a maximális sebességgel bíró elektronok sebessége, v, és a fény frekvenciája, ν, között a következő fontos összefüggés van

$$h\nu = \frac{1}{2} mv^2 + A, \tag{19.16.1}$$

ahol h a *Planck*-féle állandó, m az elektron tömege, A pedig egy állandó, mely jellemző a fémre és független a frekvenciától. A az a munka, amit az elektronoknak végezni kell, midőn a fémből kilépnek. A-t az elektronok *kilépési munkájának* nevezzük. (16.1) a fotoelektromos effektus alaptörvénye, mely EINSTEINtől származik.

Magas frekvenciáknál, röntgen- és γ-sugaraknál A-tól eltekinthetünk, mert ott ν, ill. v oly nagy, hogy A az $\frac{1}{2} mv^2$ mellett elhanyagolható és ott az egyenlet így alakul

$$h\nu = \frac{1}{2} mv^2. \tag{19.16.2}$$

A fémből kilépő elektronok sebessége nem függ a beeső fény intenzitásától, hanem csak ν-től. Az intenzitástól csak az elektronok száma függ.

A fotoelektromos effektus nemcsak fémeken lép fel, hanem szigetelőkön is, csak kimutatása körülményesebb.

A fotoelektromos effektus elméleti értelmezése nagy nehézségekbe ütközött és lényegesen új belátásra vezetett. A nehézség a következő volt. Az elektron kinetikus energiáját és a kilépéshez szükséges energiáját a fényhullámból meríti. Így tehát gyenge fényintenzitás mellett, ha a fényenergia a fényhullámban egyenletesen oszlik el, igen sok időre, igen gyenge intenzitásnál napokra volna szükség, míg a kilépéshez szükséges elegendő energia összegyűlik egy atom területén, vagyis egy kb. 10^{-8} cm átmérőjű korongon. Ezzel szemben a tapasztalat azt mutatja, hogy gyenge fényintenzitásnál azonnal bekövetkezik az effektus.

EINSTEIN ezért azt az alapvető fontosságú feltevést tette, hogy a fényhullámban (és általában mindenfajta elektromágneses sugárzásban) az energia nem folytonosan oszlik el, hanem „csomókban" ún. fotonokban van koncentrálva. Ha a foton egy atommal ütközik, akkor átadhatja energiáját az atom egyik elektronjának és ezzel a foton megszűnik létezni.

A foton energiájára, E-re, a (16.1) egyenlet szerint fel kell tételezni, hogy

$$E = h\nu. \tag{19.16.3}$$

A relativitás elmélete szerint az E energiához tartozó tömeg

$$m = \frac{E}{c^2},$$

tehát a mi esetünkben

$$m = \frac{h\nu}{c^2}. \tag{19.16.4}$$

Innen nyerjük, hogy a foton impulzusának abszolút értéke

$$p = mc = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}, \qquad \left(\frac{c}{\nu} = \lambda\right). \tag{19.16.5}$$

Ebből az összefüggésből nyerjük, hogy a fény hullámhossza a foton impulzusával a következőképpen fejezhető ki

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{19.16.6}$$

A fotonok alapsajátságai az energiájuk és impulzusuk (16.3) és (16.5) által adott értékei.

A fotonokkal értelmezni lehet a fotoelektromos effektust, mert kis intenzitású fény esetében is azonnal bekövetkezik az effektus, ha feltételezzük, hogy az energia fotonokban van koncentrálva.

Másrészt azonban nem nélkülözhetjük a fény hullámtermészetét sem, mert az interferenciajelenségekből következik, hogy a fénysugár mentén az elektromos és mágneses térerősség periodikusan változik. Azt is fel kell tételeznünk, hogy egy állandó intenzitású fényhullámban a hullám amplitúdója konstans, mert az ismert elhajlásjelenségekről csak így tudunk számot adni. Tehát a fénynek kettős, hullám- és korpuszkuláris természete van. Hogy számunkra melyik jelentkezik, az

attól függ, hogy milyen kísérletet hajtunk végre. A fotonok és a fényhullám között a következő kapcsolat van. Annak a valószínűsége, hogy a foton valahol megtalálható, arányos a hullám intenzitásával, vagyis a hullám amplitúdójának négyzetével. Tehát pl. egy elhajlásjelenségnél oda, ahol az intenzitás nagy, több foton jut, mint oda, ahol az intenzitás kicsi, ahol pedig az intenzitás zérus, oda nem jut foton. A hullám határozza meg tehát a fotonok eloszlását. Ez a dualitás, mely először idegenszerűnek látszik, mai felfogásunk szerint fundamentális törvény, mellyel elektronoknál is találkozni fogunk.

A fotonok létezésének feltevése igen termékenynek bizonyult. Így pl. a hullámelmélettől függetlenül lehetett értelmezni a *Doppler*-effektust. Ugyancsak értelmezni lehetett azt, hogy nagy tömegű csillagokról hozzánk jutó fény a vörös felé tolódik el. A következőkben a *Compton*-effektussal fogunk foglalkozni, melynek értelmezése a fotonelmélet alapján a fotonelmélet nagy sikere volt.

17. §. A Compton-effektus

A *Compton*-effektus abban áll, hogy ha elektromágneses sugárzás valamely anyagon szóródik, akkor a szórt fény hullámhossza megváltozik, mégpedig nagyobb lesz. A megváltozás csak az eltérés szögétől függ, de nem függ sem az anyagtól, sem a hullámhossztól. A hullámhossznagyobbodás

$$\Delta\lambda = 2\lambda_0 \sin^2 \frac{\vartheta}{2},$$

ahol ϑ az eltérítés szöge, λ_0 pedig egy univerzális állandó

$$\lambda_0 = 2{,}4 \cdot 10^{-10} \text{ cm} = 0{,}024 \text{ Å}.$$

Tehát a hullámhossz relatív megváltozása nagyobb kis hullámhosszak e etében. Fénynél, melynek hullámhossza 7600–3800 Å, a relatív hullámhosszváltozás kicsi. Ellenben röntgensugaraknál, melyek hullámhossza $\sim$ 1 Å – 0,1 Å, a relatív hullámhosszváltozás jelentékeny és kimutatható.

A jelenségről a fotonelmélet alapján nagyon egyszerűen számot adhatunk, ha feltételezzük, hogy a foton szóródása úgy történik, hogy a foton egy elektronnal ütközik és eltérül irányából. Az ütközésnél energiájának egy részét átadja az elektronnak, tehát energiája, vagyis a frekvencia csökken, ezáltal a hullámhossz nagyobb lesz. Mivel a jelenséget csak igen rövid hullámhosszú sugárzásnál észleljük, melyekben a fotonok energiája igen nagy, az elektron kötésétől eltekinthetünk és szabadnak vehetjük. A számításoknál az energiatételből és az impulzustételből indulunk ki. A számításnál relativisztikus korrekciókat nem veszünk figyelembe, ugyanis az elhanyagolások ellenére ugyanahhoz a végeredményhez jutunk, mint amit a relativisztikus számítás ad.

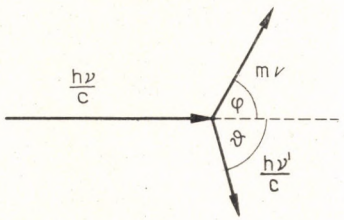
Legyen a beeső fény frekvenciája ν, a ϑ irányban szórt fényé ν', vagyis a beérkező foton energiája $h\nu$, a ϑ irányban szórt fotoné $h\nu'$. Az elektron sebessége az ütközés

előtt legyen elhanyagolható, az ütközés után legyen **v**. Ekkor az energia egyenlete

$$h\nu = h\nu' + \frac{1}{2} mv^2 . \tag{19.17.2}$$

Ezenkívül még fennáll az impulzusegyenlet

$$\frac{\overrightarrow{h\nu}}{c} = \frac{\overrightarrow{h\nu'}}{c} + m\mathbf{v} . \tag{19.17.3}$$



14. ábra. A *Compton*-effektus

Az impulzusegyenlet a beeső fény irányába eső és arra merőleges komponensekre

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos\vartheta + mv \cos\phi ,$$

$$0 = \frac{h\nu'}{c} \sin\vartheta + mv \sin\phi .$$

A jobboldalon álló első tagokat a baloldalra visszük, az így nyert egyenleteket négyzetre emeljük és összeadjuk, miáltal ϕ-t eliminálták és nyerjük, hogy

$$m^2v^2 = \frac{h^2}{c^2} (\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos\vartheta) . \tag{19.17.4}$$

Rövid hullámhosszak, de nem túl rövid hullámhosszak esetében

$$\nu - \nu' \ll \nu$$

(igen rövid hullámhosszú sugarakra, pl. γ-sugarakra, ez már nem áll fenn). Ha tehát (17.2)-ben az $\frac{1}{2} mv^2$ tagot (17.4)-ből kifejezzük és ν'-t ν-vel helyettesítjük, nyerjük, hogy

$$h\nu = h\nu' + \frac{h^2\nu^2}{mc^2} (1 - \cos\vartheta),$$

$$\Delta\nu = \nu' - \nu = -\frac{2h\nu^2}{mc^2} \sin^2\frac{\vartheta}{2} .$$

Ez a formula a $\lambda = \frac{c}{\nu}$ összefüggéssel még átalakítható, melyből nyerjük, hogy

$$\Delta\lambda = -\frac{c}{\nu^2}\Delta\nu .$$

Innen $\Delta\nu$-t kifejezve és az előbbi formulába helyettesítve következik, hogy

$$\Delta\lambda = 2\frac{h}{mc}\sin^2\frac{\vartheta}{2} . \qquad (19.17.5)$$

Tehát

$$\lambda_0 = \frac{h}{mc} = 0{,}024 \text{ Å}, \qquad (19.17.6)$$

megegyezésben a kísérleti eredménnyel.

Hogy hány foton térül el egy bizonyos irányban, arra statisztikai törvények vannak, amelyekkel itt nem foglalkozhatunk.

18. §. Anyaghullámok

DAVISSON és GERMER 1927-ben azt az egészen alapvető fontosságú jelenséget fedezték fel, hogy elektronokból álló sugarak, vagyis röviden elektronsugarak, hasonlóan, mint az elektromágneses természetű röntgensugarak, elhajlásjelenségeket mutatnak. Erről a következő kísérlettel győződhetünk meg.

Ejtsünk egy elektronsugarat egy fémrácsra, mégpedig úgy, mint azt THIBAUD tette a röntgensugaraknál. Ejtsük a sugarat majdnem tangenciálisan a rácsra, ekkor a röntgensugarakhoz hasonló elhajlásjelenségeket kapunk. Üvegrácsot azért nem célszerű használni, mert az töltést vesz fel és eltéríti az elektronokat. Így kitűnik, hogy az elektronsugár hullámtermészetet is mutat. Az elhajlási képekből meg lehetett határozni a hullámhosszt, melyre azt találták, hogy

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}, \qquad (19.18.1)$$

ahol h a *Planck*-féle állandó, m az elektron tömege, v a sebességének, p pedig az impulzusának abszolút értéke. Az összefüggés teljesen hasonló ahhoz, amit fotonoknál már láttunk. λ-t a sugárhoz tartozó *de Broglie*-hullámhossznak nevezzük.

Amint tehát a fénynek hullámtermészetén kívül korpuszkuláris szerkezetet kell tulajdonítani, éppen úgy kell a korpuszkuláris természetű elektronsugaraknak a korpuszkuláris természetükön kívül hullámtermészetet tulajdonítani. Ha az elektronsugár útjába egy vékony kristálylemezt teszünk, melyen az át tud hatolni, akkor éppen úgy előállíthatók elhajlásjelenségek, mint röntgensugarakkal, tehát előállíthatók a *Laue*-féle elhajlási képek analogonjai. Ha pedig vékony mikrokristallin (vagyis sok elemi kristályból álló) fémlemezen halad át az elektronsugár, a *Debye–Scherrer*-féle gyűrűk állnak elő.

Hogy itt tényleg elektronokról és nem egy esetleg velejáró elektromágneses sugárzásról van szó, az egy mágnessel mutatható ki, melynek hatására az egész elhajlási kép eltolódik.

Nagy sebességű elektronok esetében, melyek kb. 30 000 volt potenciálkülönbségen haladtak át, pontos egyezést kaptak a (18.1) formulával. Lassúbb, néhány száz voltnak megfelelő elektronok esetében azonban eltérést kaptak ettől a formulától, amit azzal a feltevéssel lehetett értelmezni, hogy a törésmutató a kristály belsejében más, mint a levegőben, vagyis a hullámhossz más a kristály belsejében, mint a levegőben.

O. STERN kimutatta, hogy egy He-atomokból álló atomsugár is hullámtermészettel bír. A *de Broglie*-hullámhossz és a He-atomok impulzusa közti összefüggés ugyanaz, mint elektronok esetében. A He-atomok 7400-szor nagyobb tömegét a sokkal kisebb sebesség kompenzálja, úgyhogy λ megint olyan nagyságrendű, hogy az elhajlás kristályrácsokon fellép.

Ezzel bizonyosnak tekinthető, hogy korpuszkuláris sugarak általában, tehát nemcsak az itt említett esetekben, hullámtermészettel is bírnak. Ennek a dualitásnak felismerése egyik legalapvetőbb felismerése az újabb fizikának, s egyben a kvantummechanika egyik legfontosabb kísérleti alapja.

19. §. Néhány megjegyzés az elemek periodusos rendszeréhez

A következőkben az elemek ismert periodusos rendszerével foglalkozunk egészen röviden és kiemeljük ennek a továbbiakra nézve fontos, főbb jellegzetességeit.

Ismeretes, hogy ha az elemeket a rendszámuk szerint rendezzük, akkor az atomok bizonyos tulajdonságai a rendszámmal monoton változnak. Így például monoton növekedést mutatnak a rendszámmal a röntgenspektrum egyes vonalainak, pl. az ún. K_α-vonalak frekvenciái. Monoton növekedést mutat a rendszámmal az atomsúly is, eltekintve a már említett 3 esettől: argon–kálium, tellur–jód, nikkel–kobalt, ahol az atomsúlyok sorrendje eltér a rendszámok sorrendjétől. A fizikai és kémiai jellegre a rendszám mérvadó, ezt mutatják a felfedezett nagyszámú izotóp elemek és a különböző viselkedésű egyenlő atomsúlyú, ún. izobár elemek.

Míg az atomok egyes tulajdonságai a rendszámmal monoton változnak, addig sok más fontos atomi tulajdonság, mint pl. az atomtérfogat, – az elemeket a rendszám szerint rendezve – periodikus változást mutat és éppen ennek alapján lehetett az elemeket periodusos rendszerbe foglalni.

Az ismeretes periodusos rendszerben 8 osztályt és 7 periódust különböztetünk meg. Az I. periódusban 2, a II.-ban és III.-ban 8, a IV.-ben és V.-ben 18, a VI.-ban 32, a csonka VII.-ben pedig 6 elem van. Az egyes osztályokban még két alosztályt szoktunk megkülönböztetni. A IV., V., és VI. periódusok mindegyike pedig két rövidebbre bomlik fel.

Jól jellemzett osztályok a következők. Az első osztály első csoportjában vannak az alkáliák, melyek egyvegyértékű fémek, könnyen veszítenek 1 elektront, tehát hajlamosak pozitív ionok képzésére. Spektrumuk dublettekből, vagyis kettős

vonalakból áll. A második osztály első csoportjában a földalkáliák foglalnak helyet, melyek kétvegyértékű fémek, kevésbé elektropozitívek. Spektrumuk szingulett- és triplettekből, vagyis egyszeres és háromszoros vonalakból áll. A harmadik osztály az alkáli földfémek osztálya. Vegyértékük 3, még kevésbé elektropozitívek, spektrumuk dublettek- és kvartettekből (négyszeres vonalakból) áll. Így tovább haladva a hetedik osztály második csoportjában állnak a halogének, melyek maximális vegyértéke 7, könnyen vesznek fel egy elektront, tehát elektronegatívok, bonyolult spektrummal bírnak. A nyolcadik osztály második csoportjában foglalnak helyet a nemesgázok, melyek kémiailag igen közömbösek, spektrumuk komplikált.

A Cu, Ag, Au az első osztályba, a Zn, Cd, Hg pedig a második osztályba illeszthető második csoport gyanánt. A ritka földfémek a harmadikba, a Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt pedig a nyolcadikba illeszthetők be.

20. §. Atommagok

Az atommag az atomnak gyakorlatilag egész tömegét magában foglaló igen kis kiterjedésű pozitív elektromos töltésű része. A magok legfontosabb jellemző adata a töltésük és a tömegük. Mint az α-részek szóródásával kapcsolatos kísérletek ismertetésénél láttuk (11. §), az atommag töltése a pozitív elemi töltés Z-szerese, ahol Z jelenti az atom rendszámát. Ez a szám egyenlő a semleges atom elektronburkában levő elektronok számával, tehát egy Ze töltésű mag körül az atomban Z elektron foglal helyet. Mivel pedig az elemek kémiai viselkedését az atomjaik elektronburkának struktúrája, elsősorban pedig a jelenlevő elektronok száma szabja meg, következik, hogy közvetve az atommag töltése mérvadó egy elem kémiai viselkedésére.

Az atommagok belső szerkezetének kutatásához a kiinduló pontot HEISENBERG és IVANYENKO azon felismerése szolgáltatta, hogy az atommagok neutronokból és protonokból épülnek fel. A magfizikában elfogadott szokás szerint a neutronok jele n, a protonoké pedig p. A neutronokat és protonokat sokszor egységesen nukleonoknak nevezzük. Adataikat az alábbi táblázatban foglaltuk össze.

	Neutron	Proton
Tömeg grammban	$1{,}67476 \cdot 10^{-24}$	$1{,}67245 \cdot 10^{-24}$
Nyugalmi energia MeV-ban	939,55	938,26
Töltés elemi töltésegységben	0	1
Mágneses dipólmomentum $eh/4\pi$ MpC egységben	—1,91314	2,79274
Spin $\frac{h}{2\pi}$ egységekben	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

Mivel a proton töltése megegyezik a pozitív elemi töltéssel, a neutron pedig elektromosan semleges, ezért a Z rendszám megadja a magban levő protonok számát.

A mag neutronjainak számát N-nel jelöljük. A magot alkotó összes nukleon száma

$$A = N + Z. \tag{19.20.1}$$

Ezt a számot a mag tömegszámának nevezzük. Ha a magok tömegét olyan tömegskálán mérjük, melyen a szén leggyakrabban előforduló izotópjának tömege 12-vel egyenlő, úgy minden mag tömege közel az A tömegszámmal egyezik meg.

A 12. §-ban megbeszéltük az izotópiával kapcsolatos alapvető kísérleti tényeket. Az izotóp elemek kémiai tulajdonságai gyakorlatilag megegyeznek, atomsúlyuk azonban különböző, tehát az izotópok magjai esetében Z egyező, A azonban különböző. *Izotóp* magokban tehát egyenlő számú proton, de különböző számú neutron foglal helyet. Az olyan magokat, melyek azonos számú nukleonból épülnek fel, tehát melyeknek az A tömegszámuk közös, *izobárok*nak nevezzük. Végül az olyan magokat, amelyeknek az N neutronszámuk közös, de a Z rendszámuk különböző, *izotónok*nak mondják.

Egy atommag jelölésére a következő szimbólumot használjuk: ${}^{A}\mathrm{X}$, ahol X az elem kémiai jele, ez megadja a rendszámot. Néha a rendszámot, mint alsó indexet, explicite is feltüntetjük: ${}^{A}_{Z}\mathrm{X}$.

A tapasztalat szerint a neutronok és a protonok a mag szerkezetének kialakításában közelítőleg egyforma szerepet játszanak. Az egyedüli eltérés az, hogy a protonok, elektromos töltésük révén *Coulomb*-kölcsönhatásban is állnak egymással, de ezek az elektrosztatikus hatások a magszerkezetet csak kismértékben befolyásolják. Ennek következtében az izobár magok igen sok egyező tulajdonságot mutatnak és így az izobárok a magfizikában – bizonyos fokig – az izotópoknak az atomfizikában betöltött szerepéhez hasonlóan viselkednek. Az adott A-hoz tartozó izobárok egymástól való megkülönböztetésére igen gyakran a relatív neutrontöbbletet adjuk meg:

$$n = \frac{N - Z}{A}. \tag{19.20.2}$$

Nyilvánvaló, hogy A, Z, N és n közül csak kettő független adat, és bármely kettő felhasználható egy adott mag összetételének leírására.

Az alábbiakban a magok néhány alapvetően fontos tulajdonságát beszéljük meg.

1. *A magok belső energiája és tömege.* Azt az energiát, amely ahhoz szükséges, hogy a magot felépítsük az őt alkotó nukleonokból, a mag E (belső) energiájának nevezzük. Stabilis magokra E mindig negatív érték, tehát a mag felépülése energiafelszabadulással jár. Megemlítjük, hogy E negatívját sokszor kötési energiának nevezik.

Mint már említettük, a mag E energiájával ekvivalens tömeg a mag tömegdefektusával egyenlő. EINSTEIN tétele szerint az N számú neutronból és Z számú pro-

tonból felépülő, E energiájú mag teljes tömege

$$M = M_n N + M_p Z + \frac{E}{c^2}. \tag{19.20.3}$$

Mivel E negatív, ezért a mag M tömege kisebb, mint az N neutron és Z proton össztömege. A

$$\Delta M = |E|/c^2 \tag{19.20.4}$$

mennyiség a mag tömegdefektusa. A (20.3) tömegformulát ASTON tömegspektrográfiai vizsgálatai igen nagy pontossággal igazolták.

A mag E energiája helyett legtöbbször az egy nukleonra eső energiát adjuk meg

$$\varepsilon = E/A.$$

ε értékét néhány magra az alábbi táblázatban mutatjuk be

Mag	ε
^{2}H	—1,11 MeV
^{3}H	—2,83 MeV
^{4}He	—7,07 MeV
^{6}Li	—5,32 MeV
^{7}Li	—5,59 MeV
^{9}Be	—6,44 MeV
^{10}B	—6,44 MeV
^{56}Fe	—8,77 MeV
^{238}U	—7,41 MeV

A táblázatból látjuk, hogy a legkönnyebb magokra az egy nukleonra eső ε kötési energia gyorsan csökken, majd $A = 6$ után ez a csökkenés sokkal lassúbb lesz. A legmélyebb ε érték az ^{56}Fe magnál fordul elő, innét kezdve értéke lassan növekedni kezd egészen a periodikus rendszer végéig. Az $A > 16$ tömegszámú magokra ε durván ugyanaz az érték:

$$\varepsilon \approx -8\ MeV. \tag{19.20.5}$$

2. *Az atommagok sugara.* A 11. §-ban már említettük, hogy az α-részek szóródása módot nyújt a mag kiterjedésének meghatározására. Azok az α-részek, amelyek a mag centrumát egy meghatározott R távolságnál jobban megközelítik, már elhagyják a *Coulomb*-erő hatására kialakuló hiperbólapályát, és ezekre már nem teljesül a *Rutherford*-féle szórásformula. Ezt az ún. anomális α-szórást valóban sikerült megfigyelni, és ebből a magsugár értékére következtetni. Az így nyert magsugár értékeket egy egyszerű képletben foglalhatjuk össze:

$$R = r_0 A^{1/3}; \qquad r_0 = 1{,}4 \cdot 10^{-13}\ \text{cm} = 1{,}4\ \text{fm}. \tag{19.20.6}$$

A magsugár tehát arányos a tömegszám köbgyökével.

Az r_0 arányossági tényező megadásánál bevezettünk egy új távolságegységet, a *fermi*t (fm). 1 fm $= 10^{-13}$ cm; a magfizikában általában minden hosszat ebben az egységben adunk meg.

A magsugár meghatározásának sok egyéb módszere is ismeretes. Itt csak két lehetőséget említünk meg. Az egyik a gyors elektronoknak a magokon való szóródása. Ez a módszer azért igen alkalmas a mag szerkezetének tanulmányozására, mert az elektron a mag protonjaival az elektrosztatikából jól ismert *Coulomb*-erővel van kölcsönhatásban és ezért az elektronszóródási kísérletek kiértékelése sokkal könnyebb és megbízhatóbb, mint pl. az α-részek anomális szórásának analízise. A gyors elektronok szóródásából a protonoknak a magcentrumtól való távolságának négyzetes átlagát, az $\overline{r^2}$ mennyiséget állapíthatjuk meg. Ha a protoneloszlást egy R sugarú gömbön belül homogénnak tekintjük, úgy

$$\overline{r^2} = \frac{3}{4\pi R^3} \int_0^R r^2 4\pi r^2 dr = \frac{3}{5} R^2. \tag{19.20.7}$$

$\overline{r^2}$ méréséből tehát az R magsugárra következtethetünk. Az ilyen vizsgálatok szerint a magsugár értéke követi a (20.6) alatti $R = r_0 A^{1/3}$ törvényt, de az r_0 arányossági tényezőre valamivel kisebb érték adódik:

$$r_0 = 1{,}2 \text{ fm}.$$

Hogy a két módszer különböző r_0 értékre vezet, azt úgy magyarázzuk, hogy az elektronszórási kísérletek a mag anyagának kiterjedését mérik, az α-részek anomális szórásából pedig annak az erőnek a hatósugarára következtethetünk, amellyel a mag – a *Coulomb*-taszításon kívül – a bombázó α-részre hat.

A mag sugarára a mag elektrosztatikus energiájából is következtethetünk. Tekintsük ismét a magon belüli protoneloszlást egyenletesnek. A mag Z protonjából egyet kiszemelünk és megvizsgáljuk, hogy a többi $Z-1$ protonnal való elektrosztatikus kölcsönhatásából mekkora energiára tesz szert. A $Z-1$ protontól származó elektromos töltéssűrűség:

$$\rho_{el} = \begin{cases} \dfrac{3e(Z-1)}{4\pi R^3}, & \text{ha} \quad r < R, \\ 0, & \text{ha} \quad r > R. \end{cases} \tag{19.20.8}$$

Ezen töltéssűrűségnek megfelelő elektrosztatikus potenciál (8.8.3) szerint

$$U(r) = \int \frac{\rho_{el}(r')}{|r - r'|} dv' = \int_0^R \int_0^\pi \frac{\rho_{el}(r')}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos\vartheta}} 2\pi r'^2 \sin\vartheta \, dr' d\vartheta .$$

A ϑ szögváltozó szerinti integrálás könnyen elvégezhető:

$$U(r) = 2\pi \int_0^R \rho_{el}(r') \frac{r + r' - |r - r'|}{rr'} r'^2 dr' .$$

Most írjuk be ρ_{el} (20.8) kifejezését és végezzük el az r' szerinti integrálást

$$U(r) = \frac{3e(Z-1)}{2R^3} \int_0^R \frac{r + r' - |r - r'|}{rr'} r'^2 dr'$$

$$= \frac{3e(Z-1)}{R^3} \left\{ \frac{1}{r} \int_0^r r'^2 dr' + \int_r^R r' dr' \right\}$$

$$= \frac{3e(Z-1)}{2R} \left\{ 1 - \frac{1}{3} \frac{r^2}{R^2} \right\} . \qquad (19.20.9)$$

A mag elektrosztatikus energiáját a (8.12.9) formula alapján számíthatjuk; természetesen esetünkben a második tag, amely a felületi töltéseknek felel meg, nem lép fel. A sűrűség helyébe a teljes, tehát a Z számú protontól származó elektromos töltéssűrűséget kell írnunk:

$$E_c = \frac{1}{2} \int_0^R \frac{3eZ}{4\pi R^3} U(r) 4\pi r^2 dr$$

$$= \frac{9e^2 Z(Z-1)}{4R^4} \int_0^R \left(1 - \frac{1}{3} \frac{r^2}{R^2} \right) r^2 dr$$

$$= \frac{3}{5} \frac{Z(Z-1)e^2}{R} . \qquad (19.20.10)$$

Ez a formula adja meg egy Z rendszámú és R sugarú mag elektrosztatikus energiáját. Tekintsünk most két, ún. tükörmagot. Tükörmagoknak az olyan izobárokat nevezzük, amelyek körül az egyik magban ugyanannyi proton van, mint amennyi neutron a másikban és fordítva. Az első mag tömegszáma legyen A, rendszáma Z, akkor a tükörmagjának adatai A és $A-Z$. A tükörmagok E energiája, mivel a nukleonok a mag felépítésében egyforma szerepet játszanak, csak az E_c elektrosztatikus energiákban különböznek. Egy tükörmag-pár energiakülönbsége a (20.10) formula alapján

$$\Delta E = \frac{3}{5} \frac{Z(Z-1)e^2}{R} - \frac{3}{5} \frac{(A-Z)(A-Z-1)e^2}{R} = \frac{3e^2(A-1)}{5R} (2Z - A) . \qquad (19.20.11)$$

Ha megmérjük két tükörmag pontos tömegét, úgy energiáikat a (20.3) képlet alapján meghatározhatjuk. A ΔE energiakülönbséget összevetve a (20.11) formulával, a magsugár értékére következtethetünk. Az ilyen vizsgálatok szintén az $R = r_0 A^{1/3}$ törvényre vezetnek, ahol most r_0-ra az

$$r_0 = 1{,}3 \text{ fm}$$

érték adódik.

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a mag sugara a mérések szerint az A tömegszám köbgyökével arányos, az r_0 arányossági tényező pedig 1,2 fm és 1,4 fm közé esik.

A mag anyagának sűrűségén az A tömegszám és a magtérfogat viszonyát értjük

$$\rho = \frac{3A}{4\pi R^3}. \tag{19.20.12}$$

A ρ sűrűség tehát az egységnyi térfogatra jutó nukleonok számával egyenlő. Ha a sűrűség fenti kifejezésébe az $R = r_0 A^{1/3}$ összefüggést behelyettesítjük, akkor a

$$\rho = \frac{3}{4\pi r_0^3} \tag{19.20.13}$$

kifejezést kapjuk. A nukleonsűrűség tehát, függetlenül az A tömegszámtól, minden magra azonos. r_0 értékét beírva, a nukleonsűrűség számértékére a következőt kapjuk

$$\rho = 0{,}138 \text{ nukleon/fm}^3. \tag{19.20.14}$$

Ez az érték tekinthető a magok átlagos anyagsűrűségének. A fentebb említett elektronszórási kísérletek azt is megmutatták, hogy a mag szélén a nukleonsűrűség egy viszonylag keskeny határrétegben zérusra csökken, a határrétegen belül pedig nagyjából konstansnak tekinthető. Ez a centrális magsűrűség valamivel nagyobb, mint a (20.14) átlagérték, számértéke 0.170 nukleon/fm^3 körül van.

Érdemes megnéznünk, hogy a (20.14) nukleonsűrűségből mekkora tömegsűrűség adódik. ρ értékét megszorozva az átlagos nukleontömeggel, azaz

$$M = \frac{M_n + M_p}{2} = 1{,}6736 \cdot 10^{-24} \text{ g} \tag{19.20.15}$$

tömeggel, kapjuk, hogy

$$M\rho = 2{,}31 \cdot 10^{14} \text{ g/cm}^3. \tag{19.20.16}$$

A mag anyagának tömegsűrűsége tehát 14 nagyságrenddel nagyobb, mint a vízé! Ennél a tömegsűrűségnél – jelenlegi tudásunk szerint – nagyobb nem fordul elő a természetben.

3. *Az atommagok impulzusmomentuma.* A 14. §-ban megismerkedtünk az atomok elektronburkának impulzusmomentumára vonatkozó alapvető tényekkel. Az atomburok impulzusmomentuma egyrészt az elektronok keringő mozgásából

származó pályamomentumból, másrészt az elektronok spinjéből tevődik össze. Teljesen hasonló a helyzet a magok esetében is. A mag eredő impulzusmomentuma a nukleonok pályamomentumából és spinjéből tevődik össze. A nukleonok spinje, amint azt a fentebbi táblázatunk mutatja, az elektronokéval egyezően $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$-vel egyenlő.

Az impulzusmomentumok eredőjének meghatározásával majd a kvantummechanika keretei között fogunk foglalkozni. Itt most csak azt az eredményt emeljük ki, hogy az összeadási szabály szerint a mag eredő impulzusmomentuma $\frac{h}{2\pi}$ egész számú többszörösével egyenlő, ha az A tömegszám páros és $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$ páratlan egész számú többszöröse, ha A páratlan. E szabállyal a mérési eredmények teljes összhangban vannak, egyetlenegy olyan magot sem ismerünk, amely nem tenne eleget ennek a szabálynak.

A neutronok felfedezése előtt elfogadott volt a mag proton-elektron modellje, mely szerint a mag A számú protonból és $A-Z$ számú elektronból épül fel. Az impulzusmomentum összegezési szabály itt arra az eredményre vezet, hogy az eredő impulzusmomentum páros Z esetén $\frac{h}{2\pi}$ egész számú többszöröse, páratlan Z esetén pedig $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$ páratlan számú többszöröse. Nyilvánvaló, hogy a régi proton-elektron modell, és a ma elfogadott proton-neutron modell az eredő impulzusmomentumra különböző értéket ad és így lehetőség van a kérdés tapasztalati úton való eldöntésére. Jellemző példaként tekintsük az $^{14}_{7}\mathrm{N}$ magot. Ennek rendszáma $Z = 7$, tehát a proton-elektron modell szerint az impulzusmomentumnak $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$ páratlan többszörösének kellene lennie. Ugyanakkor pedig e mag $A = 14$ tömegszáma páros szám lévén, a neutron-proton szerkezet $\frac{h}{2\pi}$ egész számú többszörösével egyenlő impulzusmomentumra vezet. A tapasztalat szerint az $^{14}_{7}\mathrm{N}$ mag impulzusmomentuma $\frac{h}{2\pi}$-vel egyenlő, ami a proton-elektron modellel ellentétben áll, viszont a neutron-proton modellel teljes összhangban van. Az $^{14}_{7}\mathrm{N}$ mellett számos egyéb magot is említhetnénk, amelyek impulzusmomentuma a proton-elektron modellel ellentétben áll és ugyanakkor a neutron-proton modell alapján az impulzusmomentum értéke a mérési eredményekkel összhangban van. A mag proton-elektron modelljét elsősorban azért vetették el, mert az impulzusmomentumra helytelen eredményt adott, de más érvek is határozottan a proton-elektron modell ellen szóltak.

Végül megemlítjük, hogy a mag eredő impulzusmomentumának $\frac{h}{2\pi}$ egységekben mért értékét a szakirodalomban I-vel szokás jelölni és *magspin*nek nevezik. A magspin elnevezés – bár teljesen elfogadott – nem egészen szerencsés, mert mint

fentebb megbeszéltük, az eredő impulzusmomentum a nukleonok spinjein kívül a nukleonok pályamozgásából származó impulzusmomentumot is tartalmazza.

4. *Az atommagok mágneses momentuma.* Az atom elektronfelhőjéhez hasonlóan az atom magjának mágneses momentuma is két részből tevődik össze. A mágneses momentum eredetének egyik forrása a pályamenti mozgás. Ehhez természetesen csak a protonok járulnak hozzá, hiszen a neutronok elektromosan semlegesek, így pályamozgásuk nem jelent elektromos áramot. A k-adik proton pályamozgásából származó mágneses momentumot a 14.§-ban követett gondolatmenet szerint $\frac{e}{2M_pc}\mathbf{N}_k$ lesz, ahol $\mathbf{N}_k$ a k-adik proton impulzusmomentuma. Az egész mag pálya-eredetű mágneses momentumát úgy kapjuk, ha k szerint összegezünk az összes protonra. Az áttekinthetőbb írásmód kedvéért azonban célszerű a k szerinti összegezést valamennyi nukleonra, tehát a protonokra és neutronokra egyaránt kiterjeszteni. E célból bevezetjük a τ_k mennyiséget, amelynek értéke megállapodásszerűen 0, ha a k-adik nukleon neutron, és + 1, ha a k-adik nukleon proton. A pályamozgásból eredő mágneses momentum tehát így írható fel

$$\frac{e}{2M_pc}\sum_{k=1}^{A}\tau_k\mathbf{N}_k.$$

Most foglalkozzunk a spintől eredő mágneses momentummal. Amint a nukleonokra vonatkozó táblázatunk mutatja, mind a neutronoknak, mind pedig a protonoknak van saját mágneses momentumuk. Ez a saját mágneses momentum a spinnek megfelelő saját impulzusmomentum irányába mutat. Ha a k-ik nukleon saját impulzusmomentumait $\mathbf{S}_k$-val jelöljük, úgy e nukleon saját mágneses momentuma $\frac{eg_k}{2M_pc}\mathbf{S}_k$ alakban írható fel. g_k neve: a nukleon giromágneses faktora. Mivel a saját impulzusmomentum értéke nukleonok esetében $h/4\pi$, ezért a giromágneses faktor értéke kétszer akkora, mint a saját mágneses momentumnak az ún. mag-magnetonokban, tehát az $eh/4\pi M_pc$ egységekben mért értéke. Tehát

$$g_k = -\ 3{,}8263 \text{ neutronokra,}$$

$$g_k = +\ 5{,}58548 \text{ protonokra.}$$

A magnak a nukleonspinektől származó összes mágneses momentuma a következő kifejezéssel adható meg

$$\frac{e}{2M_pc}\sum_{k=1}^{A}g_k\mathbf{S}_k.$$

A mag eredő mágneses momentumát pedig úgy kapjuk meg, ha a pályamozgásból és a spinektől származó mágneses momentumok vektorális összegét képezzük.

$$\mu = \frac{e}{2M_pc}\sum_{k=1}^{A}(\tau_k\mathbf{N}_k + g_k\mathbf{S}_k). \qquad (19.20.17)$$

Írjuk fel a mag teljes impulzusmomentumát is, amely az $\mathbf{N}_k$ pályamomentumok és az $\mathbf{S}_k$ spinmomentumok eredője

$$\mathbf{N} = \sum_{k=1}^{A} (\mathbf{N}_k - \mathbf{S}_k). \tag{19.20.18}$$

Mivel $\tau_k \neq g_k$, ezért a μ mágneses momentum nem lesz párhuzamos az **N** impulzusmomentummal. Míg az **N** impulzusmomentum (hacsak a magra nem hat valamely forgatómomentummal bíró külső erőtér) általában mozgásállandó, addig a μ mágneses momentum nem lesz állandója a mozgásnak, hanem az **N** impulzusmomentum körül gyors precessziót végez, és ezért μ-nek az **N**-re merőleges komponense kiátlagolódik és a mag minden fizikai folyamatban úgy viselkedik, mintha a mágneses momentum μ-nek az **N**-nel párhuzamos komponensével lenne egyenlő. Ezt a komponenst a mag effektív mágneses momentumának nevezzük.

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{\mu \mathbf{N}}{\mathbf{N}^2} \mathbf{N}. \tag{19.20.19}$$

Az effektív mágneses momentum tehát – definíció szerint – **N** irányába mutat, azaz arányos N-nel. Ha az arányossági tényezőt $eg/2M_pc$ alakban írjuk fel, úgy

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{eg}{2M_pc} \mathbf{N}. \tag{19.20.20}$$

Az így definiált g mennyiséget a mag *giromágneses faktor*ának nevezzük. Értéke függ a μ és **N** vektorok által bezárt szögtől, valamint a $|\mu|/|\mathbf{N}|$ viszonytól.

5. *Az atommagok kvadrupólmomentuma.* A magok elektromos kvadrupólmomentuma annak a mértéke, hogy a protonoknak a magon belüli eloszlása mennyire tér el a gömbszimmetrikustól. Jelölje $\rho_{\text{el}}(\mathbf{r})$ a magnak a protonoktól származó elektromos töltéseloszlását és helyezzük a magot egy külső elektrosztatikus térbe, melynek potenciálja $U(r)$. A mag és az elektromos tér kölcsönhatási energiája az elektrosztatika jól ismert formulája szerint

$$W = \int \rho_{\text{el}}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) dv. \tag{19.20.21}$$

Ha az U potenciál változása a magon belül nem túl gyors, úgy $U(\mathbf{r})$-et sorba fejthetjük az $r = 0$ hely körül. Ha az **r** helyvektor komponenseit x_1, x_2, x_3-mal jelöljük, akkor a potenciál sorfejtése a következő alakot ölti:

$$U(\mathbf{r}) = U_0 + \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{\partial U}{\partial x_i}\right)_0 x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j}\right)_0 x_i x_j + \ldots .$$

Itt a 0-index arra utal, hogy az illető mennyiségnek az $r = 0$ origóban felvett értékét kell vennünk. Az origót természetesen valahol a mag belsejében vesszük fel.

A potenciál fenti sorfejtésében a harmadik tagot kissé átalakítjuk. Mivel a mag belsejében a külső elektromos térnek forrása nincsen, ezért a magon belül U kielé-

gíti a

$$\Delta U = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2 U}{\partial x_i^2} = \sum_{i,j=1}^{3} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right) \delta_{ij} = 0$$

Laplace-egyenletet, ahol δ_{ij} ismét a *Kronecker*-féle szimbólumot jelöli:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{ha } i = j, \\ 0, & \text{ha } i \neq j. \end{cases}$$

A *Laplace*-egyenlet figyelembevételével írhatjuk, hogy

$$U(r) = U_0 + \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right)_0 x_i + \frac{1}{6} \sum_{i,j=1}^{3} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0 (3x_i x_j - \delta_{ij} r^2) + \ldots .$$

Behelyettesítve ezt a W energia (20.21) képletébe, kapjuk, hogy

$$W = e \left[Z U_0 + \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{\partial U}{\partial x_i} \right)_0 D_i + \frac{1}{6} \sum_{i,j=1}^{3} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_i \partial x_j} \right)_0 Q_{ij} + \ldots \right]. \qquad (19.20.22)$$

Itt bevezettük a következő jelöléseket:

$$eZ = \int \rho_{el}(\mathbf{r}) dv, \qquad (19.20.23)$$

$$eD_i = \int \rho_{el}(\mathbf{r}) x_i dv, \qquad (19.20.24)$$

$$eQ_{ij} = \int \rho_{el}(\mathbf{r})(3x_i x_j - \delta_{ij} r^2) dv. \qquad (19.20.25)$$

Nyilvánvaló, hogy a (20.23) jobboldalán álló integrál a mag össztöltésével egyenlő, tehát Z a mag rendszáma. A D_i mennyiségből egy vektort képezhetünk:

$$D = (D_1, D_2, D_3), \qquad (19.20.26)$$

melyet a protoneloszlás dipólmomentumának nevezünk. A mag kvadropólmomentuma pedig egy 3×3-as tenzor, mely a Q_{ij} együtthatókból épül fel:

$$(Q_{ij}) = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} \end{pmatrix}. \qquad (19.20.27)$$

A tapasztalat szerint a magokban az elektromos töltéseloszlás tükörszimmetrikus a mag O centrumára vonatkozóan. Ha ezt a tükrözési centrumot választjuk koordinátarendszerünk középpontjának, akkor írhatjuk, hogy

$$\rho_{el}(\mathbf{r}) = \rho_{el}(-\mathbf{r}).$$

Hajtsuk végre a dipólmomentum (20.24) képletében az $x_i \to -x_i$ behelyettesítést és vegyük figyelembe ρ_{el} fenti tükörszimmetriáját. Azonnal adódik, hogy

$$D_1 = D_2 = D_3 = 0,$$

tehát a magoknak nincs dipólmomentumuk. Ezek szerint a külső erőtérrel való

W kölcsönhatásban a Ze össztöltés után a legfontosabb tag a Q_{ij} kvadrupólmomentumtól származik.

A kvadrupólmomentum 9 komponense nem független egymástól. A (20.25) definícióból következik egyrészt, hogy Q_{ij} szimmetrikus tenzor,

$$Q_{ij} = Q_{ji}, \tag{19.20.28}$$

másrészt, hogy a fődiagonálisban levő elemek összege zérus,

$$Q_{11} + Q_{22} + Q_{33} = 0. \tag{19.20.29}$$

(20.28) és (20.29) összesen négy összefüggést jelent a kvadrupólmomentum komponensei között, tehát a legáltalánosabb esetben is csak öt független komponens marad.

Az öt független adatból azonban csak kettő jellemzi a mag tényleges alakját, három pedig attól függ, hogy a koordinátatengelyeket milyen irányban fektetjük. Például, ha a koordinátarendszert alkalmasan választjuk, a Q_{ij} tenzor átlós alakot ölt

$$(Q_{ij}) = \begin{pmatrix} Q_1 & 0 & 0 \\ 0 & Q_2 & 0 \\ 0 & 0 & Q_3 \end{pmatrix}, \tag{19.20.30}$$

tehát az összes olyan komponens zérus, ahol $i \neq j$. A Q_1, Q_2, Q_3 mennyiségek (20.25) alapján a következő integrálokkal egyenlők:

$$\begin{aligned} eQ_1 &= \int \rho_{el}(r)\,(3x^2 - r^2), \\ eQ_2 &= \int \rho_{el}(r)\,(3y^2 - r^2), \\ eQ_3 &= \int \rho_{el}(r)\,(3z^2 - r^2), \end{aligned} \tag{19.20.31}$$

melyekben a koordinátákat most már x, y, z-vel jelöltük. Természetesen Q_1, Q_2 és Q_3 közül csak kettő független, mert fennáll, hogy

$$Q_1 + Q_2 + Q_3 = 0. \tag{19.20.32}$$

Az egyensúlyi állapotban levő magok általában forgásszimmetrikusak, szimmetriatengelyük egybeesik az eredő **N** impulzusmomentum irányával. Ha koordinátatengelyünk z-tengelyét az **N** vektor irányába fektetjük, akkor a forgásszimmetria miatt az x és y irányok ekvivalensek és ezért

$$Q_1 = Q_2. \tag{19.20.33}$$

A (20.32) és (20.33) összefüggések miatt fennáll, hogy

$$Q_1 = Q_2 = -\frac{1}{2} Q_3, \tag{19.20.34}$$

tehát a mag alakját egyetlen adat, pl. a Q_3 mennyiség jellemzi. Q_3-at általában index nélküli Q-val jelöljük és a mag kvadrupólmomentumának nevezzük. (20.31)

utolsó egyenlete szerint a kvadrupólmomentumot a következő integrál definiálja:

$$Q = \frac{1}{e} \int \rho_{el}(r)(3z^2 - r^2)dv . \qquad (19.20.35)$$

E definícióból látszik, hogy ha a mag a z-szimmetriatengely irányában megnyúlt, akkor Q pozitív, ha pedig a mag az xy sík mentén lelapult alakkal bír (zsemle alakú), akkor Q értéke negatív. Gömbszimmetrikus magokra $Q = 0$.

Ha a mag eredő **N** impulzusmomentuma zérus, úgy nincs kitüntetett irány a magban. Az ilyen magok gömbszimmetrikusak és kvadrupólmomentumuk zérus. A mérések szerint a legnagyobb kvadrupólmomentuma a $^{176}_{71}$Lu magnak van, ennél $Q = +7{,}0 \cdot 10^{-24}$ cm^2, a leginkább lapult mag pedig a $^{127}_{53}$J, melynek kvadrupólmomentuma $Q = -0{,}75 \cdot 10^{-24}$ cm^2.

A mag geometriai alakja és a Q kvadrupólmomentuma közötti összefüggést a legegyszerűbben úgy vezethetjük le, hogy a mag alakját egy forgási ellipszoidnak tekintjük. A forgási ellipszoidnak a forgástengely irányába eső féltengelyét a-val, az erre merőleges féltengelyt pedig b-vel jelöljük. Ha feltételezzük, hogy a ρ_{el} töltéseloszlás a magon belül állandó, úgy a (20.35) formula a kvadrupólmomentumra a következő kifejezést szolgáltatja

$$Q = \frac{2V\rho_{el}}{5e}(a^2 - b^2),$$

ahol V a mag térfogata,

$$V = \frac{4\pi ab^2}{3}.$$

Mivel $V\rho_{el}$ a mag Ze össztöltésével egyenlő, ezért a kvadrupólmomentum kifejezése a következő lesz

$$Q = \frac{2Z}{5}(a^2 - b^2). \qquad (19.20.36)$$

Az a és b féltengelyek helyett vezessük be az R magrádiuszt, mely annak a gömbnek a sugarával egyenlő, melynek térfogata a V magtérfogattal egyenlő,

$$R^3 = ab^2,$$

valamint a mag megnyúltságára jellemző

$$\delta = \frac{a - b}{b}$$

paramétert. Ezek segítségével a féltengelyek a következőképpen fejezhetők ki:

$$a = R(1 + \delta)^{2/3} \quad \text{és} \quad b = R(1 + \delta)^{-1/3}.$$

A kvadrupólmomentum képletébe helyettesítve ezeket az összefüggéseket, kapjuk,

hogy

$$Q = \frac{4Z}{5} R^2 \frac{\delta(1 + \delta/2)}{(1 + \delta)^{2/3}} . \qquad (19.20.37)$$

Mivel a magok alakja alig tér el a gömbalaktól, ezért $\delta \ll 1$. (20.37)-et δ szerint sorba fejtük és csak az első hatványt tartjuk meg

$$Q = \frac{4Z}{5} R^2 \delta . \qquad (19.20.38)$$

Ha ebbe a formulába a Q kvadrupólmomentum és az R magrádiusz mért értékeit behelyettesítjük, akkor kiszámíthatjuk a δ paraméter értékét. Például a $^{176}_{71}$Lu esetén $\delta = + 0{,}18$ és a $^{127}_{53}$J magnál pedig $\delta = - 0{,}03$.

21. §. A radioaktivitás

Az előző §-ban a stabilis atommagok legfontosabb tulajdonságait tekintettük át. Az atommagok egy része azonban instabilis; az instabil magok keletkezhetnek természetes vagy mesterséges magátalakulás következtében. Egy mag instabilitása abban nyilvánul meg, hogy nagyenergiájú részecske kibocsátása közben más maggá alakul át. A magoknak ezt a tulajdonságát radioaktivitásnak nevezzük.

Sokszor előfordul, hogy a radioaktív bomlás után visszamaradó mag szintén instabilis. Akkor a bomlástermék újra radioaktív sugárzást fog kibocsátani és ez a folyamat lépcsőzetesen addig tart, míg végül egy stabil atommaghoz el nem érkezünk.

A radioaktív átalakulást semmiféle behatással befolyásolni nem tudjuk, nem tudjuk gyorsítani vagy lassítani a folyamatot. Nem tudjuk továbbá azt sem előre megmondani, hogy egy instabilis mag melyik pillanatban fog elbomlani. A folyamat időbeli lefolyását csak statisztikailag tudjuk jellemezni, vagyis oly módon, hogy előre pontosan meg tudjuk mondani, hogy nagyszámú azonos mag közül egy bizonyos idő múlva hány mag bomlott el. Az időbeli lefolyásnak ezen leírására jelen § végén még visszatérünk, de előbb a radioaktív átalakulások különböző fajtáit röviden leírjuk.

α-sugárzás esetén a mag egy $^4_2$He héliummagot (α-részecskét) bocsát ki. Erről a sugaraknak elektromos és mágneses térben való eltérítésével győződhetünk meg. Az α-bomlást a következő reakcióegyenlettel írjuk le:

$$^A_Z\mathrm{X} = ^{A-4}_{Z-2}\mathrm{Y} + ^4_2\mathrm{He} + q. \qquad (19.21.1)$$

Itt X a bomló mag, Y pedig a bomlástermék kémiai jele. q-val a bomlás folyamán felszabaduló energiát jelöltük. Az Y bomlástermék rendszáma kettővel, tömegszáma pedig néggyel kisebb, mint az X magé. Ez az ún. *Soddy*-törvény.

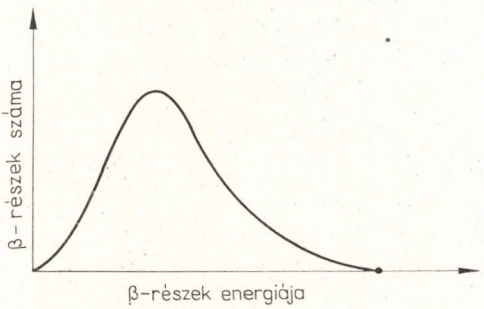
Természetes α-sugárzást, a Sm-nak egy α-sugárzó izotópjától eltekintve csak a legnehezebb elemek mutatnak. A határ egészen éles: a legnehezebb stabilis elem a ^{209}Bi és a legkönnyebb α-sugárzó elem pedig a ^{210}Po. Az α-sugárzás volt a tör-

ténelmileg legelőször felfedezett magátalakulás és ez hívta fel a figyelmet a mag összetett voltára.

A tapasztalat szerint a kisugárzott α-részek egészen meghatározott, diszkrét energiával hagyják el a magot. Ebből a szempontból az α-sugárzás hasonlít az elektronburokból kisugárzott fényhez: a (13.1) *Bohr*-féle frekvenciafeltétel szerint a kisugárzott fotonok energiája csak az elektronburok két energiaértékének különbségével lehet egyenlő. Az α-sugárzás diszkrét energiája tehát bizonyítja, hogy a magoknak szintén csak diszkrét energiaállapotai vannak.

β-sugárzás a természetben a legnehezebb elemeken kívül a K, Ru és a Lu egy-egy izotópjánál fordul elő. A természetes β-aktív elemek sugárzása elektronokból áll. A mesterséges atommagátalakítások lehetőségének felfedezése óta β-sugárzáson nem csak elektronsugárzást szokás érteni, hanem pozitronsugárzást is. Az elektron és a pozitron aktivitást jelölésben a β^- és a β^+ vagy az e^- és az e^+ jelekkel szokás egymástól megkülönböztetni. Mesterséges magátalakítások útján igen nagy számú β^- és β^+-aktív izotópot sikerült előállítani, úgyhogy ma minden elem esetében ismerünk legalább egy β-aktív izotópot.

Míg az egyfajta atommagok által kisugárzott α-részecskék energiája csak néhány diszkrét energiaértékkel lehet egyenlő, ez a β-sugárzásnál nem áll fenn. A β-sugárzásnál a kibocsátott β-részecskék energiája folytonos eloszlást mutat, amely



15. A radióaktív β-sugárzás intenzitása a β-részek energiájának függvényeként

zérustól egy, a sugárzó magra jellemző maximális energiaértékig terjed (15. ábra).

Feltételezhetjük, hogy az ugyanolyan fajta β-sugárzó magok kezdetben ugyanazon energiával rendelkeztek. Ebből rögtön arra következtetünk, hogy a folytonos energiájú β-sugárzással keletkezett új magok nem lehetnek egyenlő energiájúak, mert hiszen az a mag, amely kisebb energiájú β-részt emittált, nagyobb energiával marad vissza, mint az, amelyik nagyobb energiájú β-részt sugárzott ki. A tapasztalat ezzel ellentétben azt mutatja, hogy a keletkezett új magok között semmiféle különbség sincs. Az új atommagok különböző nagyságú energiatartalmának meg kellene mutatkoznia pl. a β-sugárzást sokszor követő α-sugárzásban. Azt kellene várni, hogy a nagyobb energiájú magok energiafeleslegüket nagyobb energiájú α-rész kibocsátásával adják le, mint a kisebb energiájúak; vagyis azt várnánk,

hogy a β-sugárzást követő α-sugárzás energiaeloszlása is folytonos. Ezzel szemben a tapasztalat azt mutatja, hogy az α-részek energiája egy diszkrét energiaérték. Ez a körülmény a mesterséges β-átalakításokkal nyert tapasztalatokkal együtt egyértelműen arra mutat, hogy valamely magfajtából a folytonos energiaeloszlású β-sugárzással keletkező új magok egyenlő energiájúak.

Ezt alátámasztják a β-sugárzás energiájára és a β-aktív mag és a keletkező új mag tömegére vonatkozó pontos mérések. A (20.3) összefüggés szerint a mag energiája a tömegéből kiszámítható és így a tömegmérések segítségével a β-aktív mag és a keletkező új mag energiakülönbsége megállapítható. Ez az energiakülönbség, bármekkora is a magból emittált β-rész energiája, mindig akkorának adódott, mint amekkora a folytonos energiaeloszlású β-sugárzás maximális energiája.

FERMI és PAULI nyomán feltételezzük, hogy a β-bomlásnál a β-részecske mellett még egy másik részecske is keletkezik úgy, hogy a hiányzó energiát éppen ez a részecske viszi magával. Ezt az új részecskét FERMI neutrinónak nevezte el. Az energiamegmaradáson túlmenően a neutrinó gondoskodik az impulzus és az impulzusmomentum állandóságának betartásáról. E feltételeieknek a neutrinó akkor tesz eleget, ha tömege zérus és spinje $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$. Mivel a neutrinó az elektromágneses térrel semmilyen észlelhető kölcsönhatásba nem lép, ezért elektromos töltése és mágneses momentuma zérus kell, hogy legyen.

Az előzőkben már részletesen megtárgyaltuk, hogy a mag neutronokból és protonokból épül fel, a mag elektronokat (pozitronokat) állandó alkatrészként nem tartalmaz. Nyomban felmerül a kérdés, hogy a β-sugárzásnál kirepülő $e^{\pm}$-részecskék honnan származnak. FERMI e kérdés megválaszolásánál az elektronfelhőből kisugárzott fény (foton) keletkezésével vont párhuzamot és feltételezte, hogy a β-sugárzásnál a β-részecskék és a velük együtt kisugárzott neutrinók a sugárzás kibocsátásának pillanatában keletkeznek.

A fentiekben, rövidség kedvéért, a β-részecskékkel együtt kisugárzott zérus tömegű és semleges részecskét neutrinónak neveztük. Meg kell azonban egymástól különböztetnünk a β^- és a β^+ bomlásnál kibocsátott részecskéket. Az általánosan elterjedt jelölésmód és szóhasználat szerint neutrinónak a β^+-bomlásnál a pozitron mellett kirepülő részecskét nevezzük; jele ν. A β^--bomlás során az elektron mellett keletkező részecske pedig az antineutrinó, melyet $\bar{\nu}$-vel jelölünk. A β^- és a β^+ bomlás szkémája tehát

$$ {}^{A}_{Z}\mathrm{X} = {}^{A}_{Z+1}\mathrm{Y} + e^- + \bar{\nu} + q, \qquad (19.21.2) $$

$$ {}^{A}_{Z}\mathrm{X} = {}^{A}_{Z-1}\mathrm{Y} + e^+ + \nu + q, \qquad (19.21.3) $$

ahol q a bomlás során felszabaduló energia. β^--bomlásnál a rendszám eggyel megnő, a tömegszám változatlan marad; ilyen átalakulással a túl sok neutronnal bíró magok igyekeznek stabilis állapotba jutni. β^+-bomlással pedig a túl sok protonnal bíró magok alakulnak át, ekkor ugyanis változatlanul maradó tömegszám mellett a rendszám eggyel csökken.

Írjuk fel a β-bomlások energiamérlegét. A (21.2) β^--sugárzás esetén a kezdeti állapot energiája az X mag $M_x c^2$ nyugalmi energiájával egyenlő, a bomlás utáni

állapot energiája pedig az $M_y c^2$ és $m_0 c^2$ nyugalmi energiákból, valamint a q felszabaduló energiából tevődik össze. (A q energia mint az Y mag, valamint az e^- és $\bar{\nu}$ kisugárzott részecskék mozgási energiája jelentkezik.) Az energiaegyenlet tehát

$$M_x c^2 = M_y c^2 + m_0 c^2 + q .$$

Behelyettesítve ide a magok tömegére vonatkozó (20.3) formulát, kapjuk, hogy

$$q = (M_n - M_p - m_0)c^2 + E_x - E_y = 1{,}53\, m_0 c^2 + E_x - E_y ,$$

ahol felhasználtuk azt a tapasztalati tényt, hogy

$$M_n - M_p = 2{,}53\ m_0.$$

A β-bomlás spontán módon csak úgy mehet végbe, ha a q energia pozitív, tehát ha

$$E_x - E_y > -\ 1{,}53\ m_0 c^2. \qquad (19\ 21.4)$$

A β^--sugárzó mag energiája tehát legfeljebb

$$1{,}53\, m_0 c^2 = 0{,}782\ \text{MeV}$$

-tal lehet kevesebb, mint a bomlás során keletkező új magé.

Hasonló gondolatmenettel megvizsgálhatjuk a β^+-bomlás energiaviszonyait. Itt arra az eredményre jutunk, hogy

$$E_x - E_y > (M_n - M_p + m_0)\, c^2 = 3{,}53\, m_0 c^2 \qquad (19.21.5)$$

kell, hogy legyen. A β^+-bomlás feltétele tehát az, hogy a sugárzó mag energiája legalább

$$3{,}53\ m_0 c^2 = 1{,}804\ \text{MeV}$$

-tal nagyobb legyen a bomlás során keletkező új magenergiánál.

K-befogáson azt a jelenséget értük, amikor a mag befogja az elektronburok (szinte kizárólag a maghoz legközelebb eső részből származó) egyik elektronját. A K-befogás reakcióegyenlete:

$$^{A}_{Z}\mathrm{X} + e^- = {}^{A}_{Z-1}\mathrm{Y} + \nu + q. \qquad (19.21.6)$$

A K-befogásnál, éppen úgy mint a β^+-bomlásnál, a rendszám eggyel csökken, tehát a K-befogás is a túl sok protonnal rendelkező magok esetében következik be. A K-befogás energetikai feltétele:

$$E_x - E_y > (M_n - M_p - m_0)\, c^2 = 1{,}53\ c^2.$$

A K-befogás tehát akkor is bekövetkezhet, ha a β^+-bomlás energetikailag tiltott, hiszen most a bomló mag energiája csak

$$1{,}53\ c^2 = 0{,}782\ \text{MeV} \qquad (19.21.7)$$

-tal kell, hogy felette legyen a keletkező új mag energiájának. A megfigyelés valóban alátámasztja, hogy sokkal több olyan mag van, amelyik a protonfeleslegétől K-befogással szabadul meg, mint ahány β^+-bomlással alakul át.

A (21.6) reakcióegyenlet mutatja, hogy a K-befogás során keletkezik egy neutrinó. Ezen neutrinó energiáját az ${}^{A}_{Z}\mathrm{X}$ és az ${}^{A}_{Z-1}\mathrm{Y}$ magok energiái egyértelműen meghatározzák; a kibocsátott neutrinók energiája tehát diszkrét. A impulzusmegmaradás miatt a kibocsátott neutrinó visszalöki a magot, és impulzusaik ellentetten egyenlők. A visszalökött mag impulzusát a következőképpen számíthatjuk ki. A $\mathbf{p}$ impulzusú mag mozgási energiáját a nemrelativisztikus $\frac{p^2}{2M}$ formulával írhatjuk le, a zérus tömegű és $-\mathbf{p}$ impulzusú neutrinó energiája pedig (6.10.14) alapján cp lesz. E kettő eredője egyenlő a bomláskor felszabaduló q energiával

$$\frac{p^2}{2M} + cp = q\,. \tag{19.21.8}$$

A (21.6) reakció energiamérlege szerint

$$q = E_x - E_y - (M_n - M_p) + m_0, \tag{19.21.9}$$

tehát a q-t az E_x és az E_y magenergiák egyértelműen megszabják. Ha q ezen értékét (21.8)-ba tesszük, úgy ki tudjuk számítani a p impulzust. Az így kapott impulzusérték teljes összhangban van a visszalökött mag megfigyelt impulzusával. Ez a megfigyelés a neutrinók létezésére vonatkozó feltételezéseket rendkívül megszilárdította.

*Izomer-átalakulás*nak az olyan magátalakulást nevezzük, amikor a magnak sem az A tömegszáma, sem a Z rendszáma nem változik meg. Az α-sugárzással kapcsolatban megbeszéltük, hogy egy magnak csak diszkrét energiaállapotai lehetnek. Ha egy mag hosszabb ideig tartózkodik egy magasabb energiájú állapotban, úgy a legalacsonyabb energiájú (úgynevezett alapállapotú) mag izomerjének nevezzük. Az izomér mag idővel γ-sugárzás, tehát foton kibocsátásával megy át az alapállapotba. A fentiekből következik, hogy a kibocsátott foton energiája csak meghatározott, diszkrét érték lehet.

Előfordulhat, hogy az izomer-átalakuláskor kibocsátott fotont a magot körülvevő elektronburok valamelyik elektronja abszorbeálja. Ezáltal ez az elektron akkora energiára tesz szert, hogy elhagyja az atom kötelékét. Ezt a jelenséget konverziós elektronkibocsátásnak nevezzük. Kiemeljük, hogy a konverziós elektron-kibocsátás és a β^--bomlás közt a legszembetűnőbb különbség az, hogy konverziós elektronok energiája egy meghatározott diszkrét érték, a β^--bomláskor kirepülő elektronok energiaeloszlása pedig, mint már megbeszéltük, folytonos.

Neutronemisszió igen ritkán fordul elő. Feltétele, hogy a mag túl nagy neutronfelesleggel rendelkezzék. Hasonlóképpen, ismerünk néhány olyan magot, melyek protonfeleslegüktől közvetlen *protonemisszió*val szabadulnak meg.

A radioaktív bomlások különböző fajtáinak megbeszélése után térjünk rá a *radioaktív bomlás időbeli lefolyásának* megbeszélésére. Már említettük, hogy a bomlástörvény tipikusan statisztikai törvény: meghatározott λ valószínűsége van annak, hogy egy bizonyos fajta atommag az elkövetkezendő időegység alatt bomlást szenvedjen. Ha a t időpillanatban összesen N számú magunk van, akkor a

dt idő alatt elbomló magok száma:

$$dN = -\lambda N dt. \tag{19.21.10}$$

Tehát az elbomló magok száma arányos a meglevő atomok számával, N-nel és arányos a dt időintervallummal. A λ arányossági tényező a radioaktív magra jellemző állandó, mely nem függ sem N-től sem a t időtől.

A (21.10) egyenlet integrálásával a következő bomlástörvényt kapjuk:

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}, \tag{19.21.11}$$

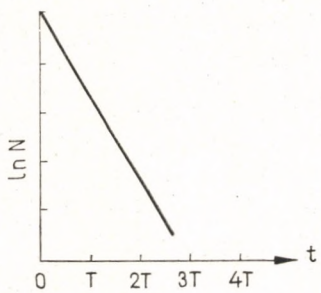
ahol N_0 a $t = 0$ időpillanatban meglevő magok számával egyenlő. A bomló magok száma tehát az idővel exponenciálisan csökken. A λ bomlási állandó annak az időnek a reciproka, mely alatt a magok száma e-ed részére csökken. A radioaktív bomlás jellemzésére általában nem a λ bomlási állandót, hanem a T felezési időt szokás megadni. T az az időtartam, mely alatt a radioaktív magok fele elbomlik. (21.11)-ből T-re a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda T},$$

amiből

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0{,}693}{\lambda}. \tag{19.21.12}$$

A bomlási törvényt a legcélszerűbben egy féllogaritmikus koordinátarendszerben ábrázolhatjuk, ahol az abszcisszára a t időt, az ordinátatengelyre pedig $\ln N$-t visszük fel. Egy ilyen diagramot láthatunk a 16. ábrán. $\ln N$ a t időnek



16. ábra. Bomlási törvény a féllogaritmikus koordinátarendszerben

lineáris függvénye, az egyenes meredeksége éppen λ-val egyenlő. A (21.10) összefüggés szerint a λN szorzat az időegység alatt elbomló magok számával egyenlő. Ezt a mennyiséget a radioaktív anyag aktivitásának nevezzük. Az aktivitásra két egységet vezettek be. Egyik a curie, amely 1 g Ra aktivitásával egyenlő:

$$1 \text{ curie} = 3{,}7 \cdot 10^{10} \text{ bomlás/sec.}$$

A másik egység a rutherford, melynek definíciója

$$1 \text{ rutherford} = 10^6 \text{ bomlás/sec.}$$

A fentiekben csak azt az egyszerű esetet tárgyaltuk, amikor a bomlás során keletkező magok már stabilisak. Most tekintsünk egy lépcsőzetes radioaktív bomlást. Legyen N_x számú X-jelű magunk, mely λ bomlási állandóval bomlik egy Y-jelű bomlástermékké, mely tovább bomlik μ bomlási állandóval Z végtermékké. Az egyszerűség kedvéért Z-ről feltételezzük, hogy már stabilis mag. A kiinduló X mag bomlását nyilván (21.11) írja le, tehát

$$N_x(t) = N_{x0}e^{-\lambda t}. \tag{19.21.13}$$

Az Y magok száma dt idő alatt megnő $\lambda N_x dt$-vel, mert ennyi X mag bomlik el, másrészt csökken $\mu N_Y dt$-vel, mert ennyi elbomlik Z-vé. Tehát dt-vel osztva és behelyettesítve (21.13)-ból N_x kifejezését, N_Y-ra a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{dN_Y}{dt} + \mu N_Y = \lambda N_{x0}e^{-\lambda t}. \tag{19.21.14}$$

Ez egy lineáris, inhomogén differenciálegyenlet $N_Y(t)$-re, melynek általános megoldása:

$$N_Y(t) = N_{x0}\frac{\lambda}{\mu - \lambda}e^{-\lambda t} + Be^{-\mu t}.$$

Itt B egy integrációs állandó, melyet a kezdeti feltétel szab meg. Ha a $t = 0$ időpillanatban a radioaktív anyag még tisztán X-ből áll, azaz $N_Y(0) = 0$, úgy

$$B = -N_{x0}\frac{\lambda}{\mu - \lambda}$$

és az Y magok számát a következő törvény írja le:

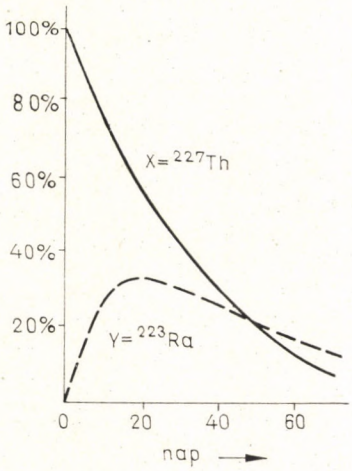
$$N_Y(t) = N_{x0}\frac{\lambda}{\mu - \lambda}(e^{-\lambda t} - e^{-\mu t}). \tag{19.21.15}$$

Ha a kiinduló X mag lassabban bomlik, mint az Y bomlásterméke ($\lambda < \mu$), akkor elegendő hosszú idő után $e^{-\mu t}$ már elhanyagolhatóan kicsiny lesz $e^{-\lambda t}$-hez képest és ekkor

$$N_Y(t) = N_{x0}\frac{\lambda}{\mu - \lambda}e^{-\lambda t}.$$

Ekkor tehát az Y bomlástermék az X mag bomlási valószínűségének megfelelően bomlik. Ezt az esetet mutatja a 17. ábra.

Különlegesen speciális eset, amikor $\lambda \ll \mu$. Ekkor (21.13) és (21.15) helyett



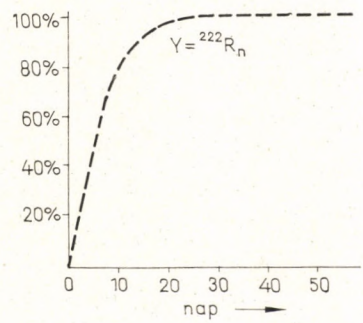
17. ábra. Az X és Y magok bomlása $\lambda < \mu$ esetén

közelítőleg írhatjuk, hogy

$$N_x(t) = N_{x0},$$

$$N_Y(t) = N_{x0}\frac{\lambda}{\mu}(1 - e^{-\mu t}).$$

Ezt az összefüggést mutatja a 18. ábránk. Az Y magok száma 0-ról felfut egy bizonyos konstans értékre, majd azon a nívón marad. Az egyensúly akkor áll be,

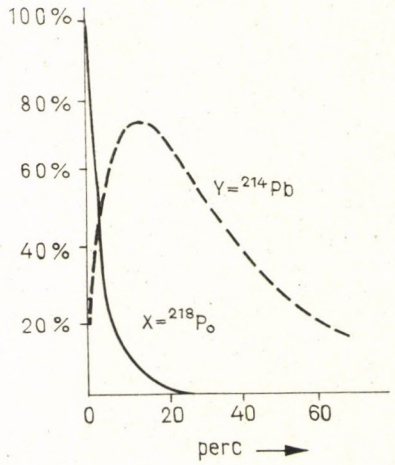


18. ábra. Az X mag koncentrációja $\lambda \ll \mu$ esetén

amikor az $e^{-\mu t}$ időfüggő tag elhanyagolható lesz $+1$ mellett. Ezen egyensúlyi állapotban

$$N_y\mu = N_x\lambda.$$

Végül tekintsük azt az esetet, amikor az X mag gyorsabban bomlik, mint az Y bomlástermék, azaz $\lambda > \mu$. Egy ilyen esetet mutat a 19. ábra. Az Y magok száma eleinte növekszik, majd az X magok elfogyása után Y a saját bomlási állandójának, μ-nek, megfelelő felezési idővel bomlik.



19. ábra. Az X és Y magok bomlása $\lambda > \mu$ esetén

22. §. Magreakciók

A mag alkotórészeit összetartó erők oly nagyok, hogy a magban csak több MeV energiájú sugárzással idézhetünk elő átalakulást. Az első mesterséges magátalakítást, mai szóhasználattal *magreakciót*, RUTHERFORDnak sikerült előidéznie 1919-ben. RUTHERFORD α-részecskék szóródását vizsgálta nitrogénben és azt találta, hogy a szórt sugárban protonok is fellépnek. A folyamat nem az N mag egyszerű felbontása, hanem egy magreakció jön létre: az α-rész ugyanis benn marad az N magban és egy proton távozik. Tehát a magreakció a következő egyenlet szerint megy végbe

$$^{14}_{7}\mathrm{N} + {}^{4}_{2}\mathrm{He} \rightarrow {}^{17}_{8}\mathrm{O} + {}^{1}_{1}\mathrm{H}\,.$$

Ugyanezt a reakciót tömörebben a következőképpen írhatjuk fel:

$$^{14}_{7}\mathrm{N}(\alpha, p)^{17}_{8}\mathrm{O}.$$

Általában minden magreakciónál beszélhetünk bombázó részecskéről, ezt I-vel jelöljük, a bombázott mag neve pedig target, jele T. A reakció következtében a target átalakul valamilyen P maggá és kirepül egy O-val jelölt mag. A magreakció egyenlete tehát

$$T + I \rightarrow P + O, \tag{19.22.1}$$

vagy

$$T(I, O)P. \tag{19.22.2}$$

Természetesen csak olyan reakciók mehetnek végbe, melyeknél a töltés- és tömegszám megmarad, tehát fenn kell, hogy álljon, hogy

$$Z_T + Z_I = Z_P + Z_0,$$

$$A_T + A_I = A_P + A_0. \tag{19.22.3}$$

Általában az I bombázó és az O kirepülő magok a periódusos rendszer elejéről való könnyű magok szoktak lenni, a T target és a P reakciótermék már lehetnek nehezebbek is. De ismerünk olyan magreakciót, ahol vagy I, vagy O szintén nehezebb mag. Néhány tipikus példa

$$^{19}\mathrm{F} + p \rightarrow {}^{16}\mathrm{O} + \alpha,$$

$$^{12}\mathrm{C} + d \rightarrow {}^{13}\mathrm{C} + p,$$

$$^{107}\mathrm{Ag} + p \rightarrow {}^{107}\mathrm{Cd} + n,$$

$$^{12}\mathrm{C} + {}^{12}\mathrm{C} \rightarrow {}^{23}\mathrm{Na} + p,$$

$$^{107}\mathrm{Ag} + \gamma \rightarrow {}^{106}\mathrm{Pd} + p,$$

ahol p és n szokás szerint a protont és a neutront jelöli, α az α-részecske, azaz a $^4_2\mathrm{He}$ mag, d a deuteronnak nevezett $^2_1\mathrm{H}$ mag, γ pedig a foton jele. Előfordul az is, hogy a P reakciótermék a T targetnek egy izomerje. Ezt általában egy (*)-gal szoktuk jelölni.

$$^{16}\mathrm{O} + p \rightarrow {}^{16}\mathrm{O}^* + p.$$

A magreakciók technikai keresztülvitele megköveteli, hogy a kiinduláskor egy $T + I$ ütközés következzék be, de a reakció nem vezet feltétlenül egy P reakciótermékből és egy O kirepülő részecskéből álló végállapothoz. Lehetséges több kirepülő részecske, ilyenek például az $(n, 2n)$ és a (p, np) típusú reakciók, és előfordulhat az is, hogy egyáltalán nincs kirepülő részecske, mint pl. a

$$^{107}\mathrm{Ag} + n \rightarrow {}^{108}\mathrm{Ag}^*$$

reakciónál. Ez utóbbi típust *radiatív befogás*nak hívjuk.

Ha egy adott I részecske egy T magnak ütközik, akkor általában többféle magreakció is bekövetkezhet. Ezt a következőképpen jelöljük:

$$T + I \rightarrow \begin{cases} P_1 + O_1 \\ P_2 + O_2 \\ \vdots \\ P_k + O_k \\ \vdots \end{cases} \tag{19.22.4}$$

Hogy az egyes $P_k + O_k$ végállapotok milyen valószínűséggel jönnek létre, ez a T és I magok összetételén kívül függ az I bombázó részecske kinetikus energiájá-

tól. Ha a végállapotban levő magok azonosak a kezdeti állapotban levőkkel, tehát ha $P = T$ és $O = I$, úgy a magreakció a *rugalmas szórás* folyamatának felel meg. A rugalmas szórás reakcióegyenlete tehát

$$T + I \rightarrow T + I. \tag{19.22.5}$$

*Rugalmatlan szórás*ról akkor beszélünk, ha a reakciótermék a bombázott T target egy izomerje:

$$T + I \rightarrow T^* + I. \tag{19.22.6}$$

Tényleges magátalakulás esetén T és P összetétele különbözik egymástól. A

$$P_1 + O_1,\ P_2 + O_2, \ldots, P_k + O_k, \ldots$$

lehetséges végállapotokat *reakciócsatornák*nak nevezzük, a $T + I$ kiindulóállapot neve: *bemenő csatorna.* A (2.25) rugalmas szórásnál a bemenő és kimenő csatorna ugyanaz, a többi magreakciónál a be- és kimenő csatornák különböznek.

Vizsgáljuk most meg a magreakciók energiaviszonyait. A magreakciók leírására olyan koordinátarendszert választunk, melyben az ütköző magok tömegközéppontja nyugalomban van. Valamely reakciócsatornához tartozó energia a hozzá tartozó magok belső energiájából és a kinetikus energiából tevődik össze. A mag belső energiáját alapállapotban, azaz a legmélyebb energiájú állapotban, E-vel jelöljük. Ha valamely csatornában egy magasabb energiájú izomer fordul elő, úgy annak energiája $E^* = E + \varepsilon^*$ lesz, ahol ε^* az alapállapot energiájától való eltérés. ε^*-ot az izomer *gerjesztési energiá*jának nevezzük.

Valamely $P + O$ csatorna teljes energiája a mondottak szerint

$$T + E_p + E_0 + \varepsilon_p^* + \varepsilon_0^*$$

lesz, ahol T a tömegközépponti rendszerhez tartozó kinetikus energia. Az energiamegmaradás tétele megköveteli, hogy a bemenő és a kimenő csatornához tartozó energia egyenlő legyen. A $T(I, O)P$ reakció esetén tehát a következő energiatételnek kell teljesülnie:

$$T_i + E_T + E_I + \varepsilon_T^* + \varepsilon_I^* = T_f + E_P + E_0 + \varepsilon_P^* + \varepsilon_0^*, \tag{19.22.7}$$

ahol T_i-vel a bemenő, T_f-fel pedig a kimenő csatorna kinetikus energiáját jelöltük. Általában a bemenő csatornában levő magok alapállapotban vannak, vagyis $\varepsilon_T^* = \varepsilon_I^* = 0$ és a legtöbb esetben a kirepülő O részecske is alapállapotú, azaz $\varepsilon_0^* = 0$. (Ha I vagy O egy neutron vagy egy proton, akkor az illető részecske alapállapotához tartozó és az ε gerjesztési energia egyaránt csak zérus lehet.)

A T_f és T_i kinetikus energiák különbségét *reakcióenergiá*nak nevezzük:

$$Q = T_f - T_i. \tag{19.22.8}$$

(22.7) alapján írhatjuk, hogy

$$Q = (E_T + E_I - E_P - E_0) + (\varepsilon_T^* + \varepsilon_I^* - \varepsilon_P^* - \varepsilon_0^*). \tag{19.22.9}$$

A reakcióenergia fenti kifejezésében az első zárójeles kifejezést a $T(I, O)P$ reakció *Q-értéke*inek szokás nevezni. Jele:

$$Q_{I0} = E_T + E_I - E_P - E_0. \tag{19.22.10}$$

Mivel az ε^* gerjesztési energiák definíció szerint csak pozitívak lehetnek és mivel a gyakorlatban $\varepsilon_T^* + \varepsilon_I^* = 0$, ezért a második zárójeles kifejezés értéke negatív, azaz a Q reakcióenergia nem lehet nagyobb, mint a reakció Q_{I0}-ja:

$$Q \leq Q_{I0}.$$

Természetesen a $T_f = T_i + Q$ kinetikus energia csak pozitív érték lehet. $Q > 0$ esetén ez automatikusan teljesül, az ilyen magreakciót *exoerg*nek nevezzük. Ha $Q < 0$, akkor a magreakció csak akkor következhet be, ha a kezdeti T_i kinetikus energia nagyobb, mint $|Q| = -Q$. Az ilyen reakciót *endoerg*nek hívjuk. Az endoerg reakció feltétele (22.9) és (22.10) figyelembevételével a következő:

$$T_i > (\varepsilon_P^* + \varepsilon_0^* - \varepsilon_T^* - \varepsilon_I^*) - Q_{I0}. \tag{19.22.11}$$

A jobboldalon szereplő kifejezést a reakció *küszöbenergiá*jának nevezzük. A fenti definíciók szerint az exoerg reakciók küszöbenergiája negatív szám, az endoerg reakcióké pedig pozitív. Az exoerg reakciók ezért tetszés szerinti kicsiny T_i kinetikus energiánál is végbemennek, az endoergek pedig csak akkor, ha T_i felette van a küszöbenergiának.

A fentiekben a magreakciók általános leírását és velük kapcsolatos legfontosabb fogalmakat ismertük meg. A magreakciók elméletének alapfeladata az, hogy egy (22.4) típusú reakció esetében megállapítsa, hogy egyáltalán milyen kimenő csatornák lehetségesek, és hogy az egyes kimenő csatornák milyen valószínűséggel lépnek fel. A lehetséges kimenő csatornákat általában a mozgásállandók, vagyis a megmaradási tételek vizsgálatával állapíthatjuk meg. Hogy az egyes kimenő csatornák mekkora valószínűséggel lépnek fel, ennek eldöntéséhez szükséges ismernünk egyrészt a mag alkotó részei között ható erők tulajdonságait, másrészt a korpuszkuláris méretű testek ütközésének törvényeit, melyet a kvantummechanikai szórásszámításban fogunk tárgyalni.

23. §. A szilárd testek korpuszkuláris elméletének alapjai

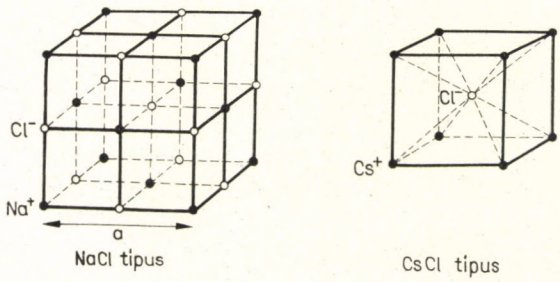
A szilárd testek – eltekintve néhány amorf anyagtól – kristályos szerkezetűek. Nagyobb egykristályok általában ritkán fordulnak elő, ill. különleges technikai eljárással lehet csak létrehozni ilyeneket; a természetben előforduló szilárd anyagok túlnyomó része apró mikrokristályokból épül fel.

A szilárd anyag kristályos szerkezete az anyagot felépítő atomok legkedvezőbb elrendezéséből adódik. Szabályos kristályelrendeződésre van szükség ahhoz, hogy a bonyolult atomi egységek jól kapcsolódhassanak egymáshoz, hogy a kémiai kötések megfelelő irányban és távolságban legyenek.

A szilárd testeket a kristályt felépítő atomok közt ható erők tartják egybe. Ezek az erők általában elektrosztatikus eredetűek, legfeljebb jelentéktelen mér-

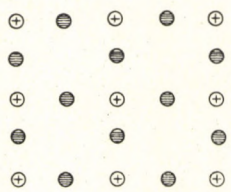
tékű mágneses kölcsönhatással. A kristályos kötést öt típusba szokás sorolni, melyek közti eltéréseket a kristály atomjai, ill. molekulái körüli elektronok különféle elrendeződése okozza. Az alábbiakban röviden ismertetjük a kristálytípusokat.

Ionos kristályok. Az ionos kristályok két különböző típusú atomból épülnek fel, mégpedig úgy, hogy egyes elektronok az egyik típusú atomokról átmennek a másik típusúakra. Az ionos kristály tehát pozitív és negatív ionokból áll. A kristály felépítése olyan, hogy az ellentétes töltésű ionok közelebb vannak egymáshoz, mint az egynemű töltésűek, tehát a kristályt lényegében véve az ellentétes töltésű ionok elektrosztatikus vonzása tartja egybe. Az ionos kristályok főképpen két kristályszerkezetben alakulnak ki. A lapcentrált típusra a NaCl, a tércentrált típusra a CsCl kristálya a legismertebb példa. Ezeket szemléltetjük a 20. ábrán.



20. ábra. A tércentrált (NaCl) és a lapcentrált (CsCl) kristály szerkezete

Kovalens kötés. A kovalens kötés olyképpen jön létre, hogy két szomszédos atom egy-egy elektronja a két atom közötti tartományban helyezkedik el. Egy ilyen kristály szkematikus képét mutatja a 21. ábra, melyen a fehér körök a pozitív ionokat, a vonalkázott tartományok pedig a vegyérték-elektronok helyét ábrázolják.

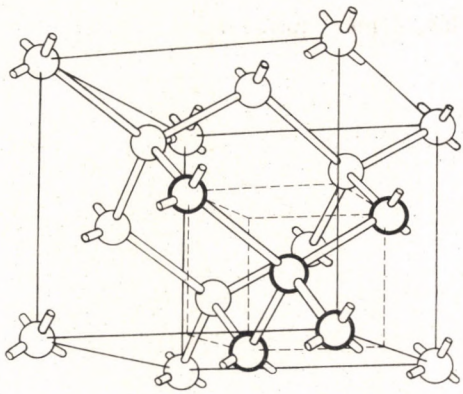


21. ábra. A kovalens kötés vázlata

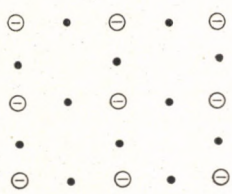
A kovalens kötés a kémiából is ismert jelenség, melyet a két ion közötti relative nagy elektronsűrűség és erős irányítottság jellemez. Főleg a szerves kémiában találkozunk vele, mert a szén az egyik legismertebb olyan atom, mely kovalens kötést tud létrehozni. Szén esetében a vegyérték-elektronok egy olyan tetraéder csúcspontjaiban helyezkednek el, melynek középpontjában a szénatom van. A metán CH_4 molekulája a tetraéderes kötés tipikus példája. A szénato-

mokból felépülő kristályok szintén tetraéderes szerkezetűek. Ilyen pl. a gyémántkristály, melynek szerkezetét a 22. ábra szemlélteti.

Hidrogénkötésű kristályok. A hidrogénkötés az ionos kötés egy speciális formája. A hidrogénatom átadja egyetlen elektronját a kristályban helyetfoglaló molekula egy másik atomjának, és a csupaszon maradt proton képezi a hidrogénkötést. Vázlatos képét a 23. ábrán láthatjuk, ahol a fehér körök negatív molekulaionokat, a fekete pontok pedig protonokat jelölnek.



22. ábra. A tetraéderes szerkezetű gyémántkristály. (Kittel, C., Bevezetés a szilárdtestfizikába, Műszaki Kiadó, Budapest 1969.



23. ábra. A hidrogénkötésű kristály vázlata

A hidrogénkötés fontos szerepet játszik bizonyos ferroelektromos kristályokban, például a káliumhidrogénfoszfát kristályában. Ugyancsak hidrogénkötés valósul meg a jégkristályokban a H_2O molekulák között és ez a hidrogénkötés felelős a jég meglepő fizikai sajátságaiért.

Molekulakristályok. Telített molekulákból vagy nemesgáz atomokból épülnek fel. A molekulakristályok építőkövei tehát elektromosan semlegesek. A kötést a molekulák, ill. atomok elektromos dipólmomentumainak kölcsönhatása hozza létre. Ilyen kristály olyan molekulákból vagy atomokból is létrejöhet, melyeknek dipólmomentuma középértékben zérus, de van fluktuáló dipólmomentumuk, melyet az elektronfelhő pillanatnyi helyzete hoz létre, ugyanis az egyes atomok minden egyes elektronja az atommaggal egy-egy dipólmomentumot alkot. Ennek a dipólmomentumnak pillanatnyi elektromos tere a szomszédos atomokban, ill.

molekulákban is indukál dipólmomentumot és a két dipólmomentum kölcsönhatása a két atom között vonzóerőt hoz létre. Az ilyen típusú kölcsönhatást *van der Waals*-kölcsönhatásnak nevezzük, és az ilyen erőkkel összetartott kristályrácsnak *van der Waals*-kristály a neve. Tipikus példa a *van der Waals*-kristályra a nemesgáz atomokból felépülő kristály, pl. a szilárd argon.

Fémes kristályok. A fémkristályokban a vegyérték-elektronok leszakadnak az atomokról és szabadon mozognak a kristályban. A fémes kristályt tehát olyannak képzeljük, hogy a pozitív ionokból álló rácsot a negatív töltésű elektronok nagyjából homogén eloszlású felhője tölti ki. Ezt az elektronfelhőt elektrongáznak szoktuk nevezni és ez az elektrongáz jön mozgásba, amikor a fémben elektromos áram folyik. A fémek jó vezetőképessége éppen onnan ered, hogy az elektrongáz viszonylag akadálytalanul mozoghat a kristályban. Az elektrongáz elektronjait néha vezetési elektronoknak nevezzük.

A fentiekben ismertetett öt kristálytípuson kívül olyan kristályok is vannak, melyek átmenetet képeznek az egyik típusból a másikba. Az ionos és a kovalens kristályok közti átmenet folytonos. Sokszor fontos tudnunk, hogy egy adott kristály kötése milyen mértékben ionos és milyen mértékben kovalens, de ezt teljes biztonsággal nemigen lehet eldönteni. Az ún. átmeneti fémekben a vegyérték-elektronoknak csak egy része képez elektrongázt, a többi pedig kovalens kötést alakít ki. Ezek a fémek tehát átmenetet képeznek a fémes és kovalens kristályok között.

A kristályos szilárd test egyes atomjai, ionjai vagy molekulái a kristályban kijelölt helyükön csak akkor tartózkodnának állandóan, ha a kristály hőmérséklete az abszolút zérus fok lenne. A hőmozgás hatására a kristály rácspontjaiban levő építőelemek rezgéseket végeznek, melyek amplitúdója a hőmérséklettel nő. Eléggé magas hőmérsékleten a kristályban uralkodó rend felbomlik és a kristály megolvad. Cseppfolyós állapotban is megmaradnak szabályos szerkezetű ún. kvázikristály elemek, de ezek pillanatról pillanatra deformálódnak. Ha ezek a deformálódások lassan mennek végbe, akkor az anyag gyakorlati szempontból szilárd lesz (ilyen pl. az üveg, az aszfalt és a többi amorf test), de elméleti szempontból ezeket az anyagokat is folyadékoknak tekintjük.

24. §. A rácsenergia

A rács elemi cellájának nevezzük a kristályban azt a legkisebb testet, melynek tranzlációjával az egész rács előállítható. Pl. a NaCl típusú rács esetében az elemi cella egy kocka, melynek éle két, egymáshoz legközelebbi Na^+ iont köt össze (l. a 20. ábrát). Az elemi cellát képező kocka a élhosszúságát rácsállandónak nevezzük.

A sűrűség megállapítása céljából meg kell határozni, hogy az elemi cellában hány Na^+ és hány Cl^- ion van. Itt figyelembe kell venni, hogy a cella csúcspontjaiban helyet foglaló ionok 8 cellához tartoznak, tehát azoknak csak $\frac{1}{8}$-a szá-

mít, hasonló okoknál fogva az éleken levő ionoknak $\frac{1}{4}$-e, a lapokon levőknek pedig csak a $\frac{1}{2}$-e jön számításba. Az elemi cella belsejében levő ion természetesen teljesen számít. Így arra az eredményre jutunk, hogy a NaCl kristály elemi cellájában $\left(\frac{8}{8}+\frac{6}{2}\right)=4$ Na^+ ion és $\left(\frac{12}{4}+1\right)=4$ Cl^- ion foglal helyet. A Na- és Cl-ionok tömege $\frac{M_{Na}}{L}$, ill. $\frac{M_{Cl}}{L}$, ha M_{Na} és M_{Cl} a Na, ill. a Cl atomsúlya. Mivel az elemi cella köbtartalma a^3, a sűrűség

$$\rho=\frac{4(M_{Na}+M_{Cl})}{La^3}.$$

Ebből a rácsállandóra a következő formulát kapjuk:

$$a=\left[\frac{4(M_{Na}+M_{Cl})}{L\rho}\right]^{1/3}. \qquad (19.24.1)$$

a-ban szerepel az L *Loschmidt*-szám, és így a csak annyira pontos, amennyire L pontos. Hasonló gondolatmenettel állapítható meg a többi kristály rácsállandója is.

Ismeretes, hogy adott hullámhosszú röntgensugaraknak a kristályon való elhajlásából a rácsállandót meg lehet határozni. A (24.1) képlet alapján ezt az eredményt L meghatározására leht felhasználni. Az így kapott érték nagyon jó egyezésben van a 8. §-ban leírt *Millikan*-módszerrel meghatározott elemi töltés segítségével kapott L értékkel.

A rács energiáján az egész rács potenciális energiáját értjük, amely a rácsot alkotó részecskék kölcsönhatásából származik. (Fémek esetén a rácsenergia tartalmazza az elektrongáz kinetikus energiáját is.) Mi az alábbiakban csak az ionkristályokkal fogunk foglalkozni. Ezeknél a rácsenergia számításához elegendő az elektrosztatika eredményeire támaszkodni. A többi rácstípus energiájának számítása csak a kvantumelmélet alapján lehetséges.

Elsősorban azt kell megvizsgálnunk, hogy milyen erők tartják össze az ionkristályokat. Erre a kérdésre egyszerűen válaszolhatunk. Az ionkristályok pozitív és negatív ionokból vannak felépítve, melyek között működő elektrosztatikus vonzóerők szolgáltatják a kristályt összetartó erőket. De nyilvánvaló, hogy ezeken a vonzóerőkön kívül az ionok között rövid hatótávolságú taszító erőknek is kell fellépniük, ugyanis ezek nélkül a rács nem lehetne stabilis, hanem az elektrosztatikus vonzóerők hatására az ionok egymásba esnének. A taszító erő fizikailag azt fejezi ki, hogy az ionok úgy viselkednek, mintha elég merev gömbök lennének, vagyis a szomszédos ionok elektronfelhői nem hatolhatnak egymásba. BORN ezeket az erőket $\frac{1}{r}$-nek magas hatványával arányosnak tételezte fel, ami megfelel annak, hogy a taszító erők kis távolság esetén számottevőek, nagy iontávol-

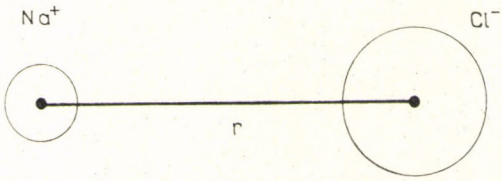
ság esetén viszont igen kicsinyek. Az alkalohalogenid kristályok esetében, melyek az ionkristályok legtipikusabb esetei, a tapasztalat szerint a taszító erők $\frac{1}{r^{10}}$-nel tekinthetők arányosnak.

A kvantummechanika megmutatta ugyan, hogy a taszító erőknek ez a formája csak közelítő jellegű, az erők nem ilyen egyszerűek, de mivel a közelítés jó, fel lehet használni.

Az alkalohalogenidek egyszeres ionokból vannak felépítve, vagyis a pozitív ionok töltése $+e$, a negatív ionoké $-e$, ahol e az elemi töltés abszolút értéke. A kötés tárgyalásánál nem az erőket, hanem a potenciális energiát vesszük alapul. Ha csak egy ionpár, tehát egy Na^+ és egy Cl^- ion volna jelen, akkor a potenciális energia a következő volna

$$u = -\frac{e^2}{r} + \frac{\beta}{r^9}, \tag{19.24.2}$$

ahol r a két ion magjának egymástól való távolsága és β egy konstans.



24. ábra. Alkalohalogenid ionpár

Az egész rács potenciális energiáját nem úgy kapjuk, hogy u-t egyszerűen megszorozzuk a rácsban jelenlevő ionpárok számával. Az elektrosztatikus potenciál ugyanis csak mint $\frac{1}{r}$ fogy a távolsággal, tehát egy kiragadott ion helyén még a távolabbi ionok elektrosztatikus potenciálja is szerepet játszik és ezt is számításba kell venni. Az elektrosztatikus kölcsönhatásból származó potenciális energiára vonatkozó számítást MADELUNG vitte véghez, ezt a számítást a § végén ismertetjük. A számítás eredménye az, hogy egy végtelen nagy (vagyis egy praktice igen sok ionból álló) NaCl típusú kristály belsejében az elektrosztatikus potenciális energia ionkötésenként

$$-\frac{\alpha e^2}{r}, \tag{19.24.3}$$

ahol r a különböző előjelű ionok közötti legrövidebb távolság $\left(\text{vagyis } \frac{a}{2}\right)$ és α egy konstans, melyet *Madelung-állandó*nak nevezünk. Értéke a NaCl típusú kristályoknál $\alpha = 0{,}2913$.

A taszító erők potenciálja a kristály belsejében egy ionkötésre vonatkoztatva ugyanaz, mint egy szabad ionpár esetében, mert ez az energia a távolsággal olyan

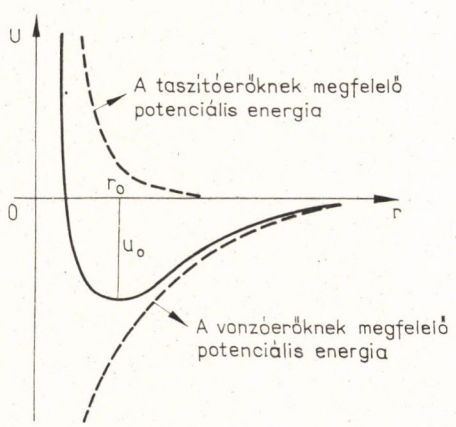
gyorsan csökken, hogy a távolabbi ionok nem játszanak szerepet. Tehát egy NaCl típusú kristály potenciális energiája egy ionkötésre, vagyis egy ionpárra vonatkoztatva

$$u = -\frac{\alpha e^2}{r} + \frac{\beta}{r^9}. \tag{19.24.4}$$

A rács egész potenciális energiáját a következőképpen nyerjük. A NaCl típusú kristályban mindegyik kiragadott iontól kötés indul ki a szomszédos ellenkező előjelű ionokhoz. Hogy mindegyik kötést csak egyszer vegyük számításba, csak az egyik fajta ionokat, pl. a Na^+ ionokat szabad tekintetbe venni. A kristálynak egy mólnyi mennyisége L számú Na^+ iont tartalmaz. Tehát a kristálynak egy mólra vonatkoztatott potenciális energiáját, vagyis az egy mólra vonatkoztatott U rácsenergiát úgy kapjuk, hogy a (24.4) alatti u-t megszorozzuk $6L$-lel.

$$U = -\frac{6\alpha L e^2}{r} + \frac{6\beta L}{r^9}. \tag{19.24.5}$$

Ez a kifejezés adja egy egyszeres ionokból felépített NaCl típusú kristály rácsenergiáját. A jobboldalon álló kifejezés első tagja, vagyis a vonzóerőknek meg-



25. ábra. Az alkalohalogenid kristály rácsenergiája. r_0 az egyensúlyi rácstávolság, U_0 a rács kötési energiája

felelő potenciális energia nagy r-eknél, a második tag, vagyis a taszító erőknek megfelelő potenciális energia pedig kis r-eknél számottevő, tehát ha U-t r függvényében ábrázoljuk, akkor a 25. ábrán feltüntetett görbét kapjuk, melynek egy bizonyos r_0 értéknél minimuma van. U minimuma U_0, mely $r = r_0$-hoz tartozik, az egyensúlyi állapotnak felel meg, mert az egyensúlyi állapotban lesz a potenciális energia minimális. U minimumát a

$$\frac{dU}{dr} = 0 \tag{19.24.6}$$

egyenlet határozza meg. Ezt az egyenletet úgy is felfoghatjuk, hogy az egyensúlyi állapotban az ionpárok közötti

$$\frac{du}{dr} = \frac{1}{6L}\frac{dU}{dr}$$

erő eltűnik, vagyis itt a vonzóerők egyenlők a taszító erőkkel. Az egyensúlyi állapotot meghatározó (24.6) egyenletből ki lehet számítani a taszító erők β konstansát.

$$\left(\frac{dU}{dr}\right)_{r_0} = \frac{6\alpha L e^2}{r_0^2} - \frac{54\beta L}{r_0^{10}} = 0,$$

ebből

$$\beta = \frac{\alpha e^2}{9} r_0^8 . \tag{19.24.7}$$

Ezt behelyettesítve U formulájába, kapjuk, hogy

$$U = -6\alpha e^2 L\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{9}\frac{r_0^8}{r^9}\right). \tag{19.24.8}$$

U_0-t, vagyis az egyensúlyi állapotnak megfelelő rácsenergiát (egy mólra vonatkoztatva) megkapjuk, ha U fenti formulájába $r = r_0$-t, vagyis az egyensúlyi állapotnak megfelelő r értéket írjuk. Így kapjuk, hogy

$$U_0 = -\frac{16\alpha e^2 L}{3r_0} . \tag{19.24.9}$$

Ez a formula az összes NaCl típusú kristályra érvényes, melyek egyszeres ionokból vannak felépítve. U_0 negatív, megfelelően annak, hogy midőn a különböző előjelű ionok kristályráccsá állnak össze, akkor energia szabadul fel. U_0 abszolút értéke azzal a munkával egyenlő, melyet akkor kell végeznünk, amikor a rácsot alkotó elemeire, vagyis ionokra bontjuk fel és ezeket egymástól végtelen távolságba távolítjuk el. U_0 nem egyenlő a szublimációs energiával, mert a szublimációs energia annak a munkának felel meg, melyet akkor végzünk, ha a kristályrácsot molekulákra bontjuk fel. Megjegyezzük, hogy a rácsenergiára vonatkozó (24.9) formulát a tapasztalat jól igazolja.

Az ionkristályoknak a fentiekben ismertetett *Born*-modelljével e kristályok igen sok fizikai tulajdonságát lehetett értelmezni. Ezért a *Born*-modellt fizikailag reálisnak tekintjük. Ki kell azonban emelnünk, hogy a β/r^9 alakú taszító kölcsönhatás bevezetése pusztán fenomenológiai úton történt, ennek fizikai megalapozása csak a kvantummechanikára épülő atomelmélet alapján lehetséges.

A (24.4) kölcsönhatás *Coulomb*-tagjában fellépő α *Madelung*-állandót az alábbi módon számíthatjuk ki. Szemeljük ki a rács egyik ionját, legyen ez pl. egy pozitív töltésű Na^+ ion. Ennek elektrosztatikus potenciális energiája

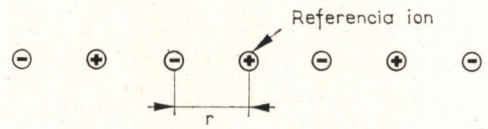
$$\phi = \sum_j{}' (\pm)\frac{e^2}{r_j}, \tag{19.24.10}$$

ahol r_j a j-edik ion távolsága a kiválasztott referenciaiontól, a plusz előjel a pozitív, a mínusz a negatív ionokra vonatkozik, végül a szumma-jel melletti vessző arra utal, hogy az összegezést minden ionra ki kell terjeszteni, kivéve a referenciaiont.

Mielőtt a NaCl típusú kristályokkal foglalkoznánk, egyszerű példaként tekintsük ellentétes töltésű, váltakozva elrendezett ionok lineáris láncát. (26. ábra). Két szomszédos ion távolsága r. Ekkor a referenciaion ϕ elektrosztatikus energiája a következő lesz:

$$\phi = 2\left(-\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{2r} - \frac{e^2}{3r} + \frac{e^2}{4r} \ldots\right).$$

A 2-es szorzó azért lépett fel, mert a referenciaiontól két ion van r_j távolságra,



26. ábra. Lineáris ionlánc

az egyik jobbra, a másik balra. ϕ-t felírhatjuk a következőképpen is

$$\phi = -\frac{2e^2}{r}\left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \ldots\right). \qquad (19.24.11)$$

A gömbölyű zárójelben szereplő összeg értékét a jól ismert sorfejtési képlet

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \ldots$$

segítségével számíthatjuk ki. Itt $x = 1$-et írva kapjuk, hogy (24.11) gömbölyű zárójelében levő összeg értéke $\ln 2$. Ezért

$$\phi = -\frac{2 \ln 2\, e^2}{r}.$$

Ha ezt a ϕ energiát úgy fogjuk fel, mintha a referenciaion két szomszédjától származna, akkor egy ionpárra jutó elektrosztatikus kötési energia $u = \frac{1}{2}\phi$ lesz.

$$u = -\frac{\ln 2\, e^2}{r}.$$

Ha ezt összevetjük az $u = -\frac{\alpha e^2}{r}$ formulával, úgy láthatjuk, hogy lineáris láncra a *Madelung*-állandó értéke

$$\alpha = \ln 2.$$

Most térjünk át a háromdimenziós, NaCl típusú rács tárgyalására. Egy kiragadott pozitív ionnak 6 legközelebbi szomszédja van, melyek negatív előjelűek (20. ábra). Ezek távolsága a referencia-iontól r. A másodszomszédok száma 12, előjelük pozitív és távolságuk $\sqrt{2}\,r$. A harmadik szomszéd csoportot 8 negatív ion szolgáltatja, melyek $\sqrt{3}\,r$ távolságban vannak. A negyedszomszédok megint pozitív ionok, számuk 6, távolságuk $\sqrt{4}\,r = 2r$. És így tovább számlálhatjuk össze a referencia iontól egyenlő távolságban levő rácsionokat. A referenciaion elektrosztatikus energiája ezek szerint:

$$\phi = -\frac{6e^2}{r} + \frac{12e^2}{\sqrt{2}\,r} - \frac{8e^2}{\sqrt{3}\,r} + \frac{6e^2}{2r} \cdots .$$

Vagyis

$$\phi = -\frac{6e^2}{r}\left(1 - \sqrt{2} + \frac{4}{3\sqrt{3}} - \frac{1}{2} + \ldots\right).$$

Az egy ionpárra vonatkoztatott *Coulomb*-kölcsönhatást úgy kapjuk, ha ϕ-t elosztjuk a legközelebbi szomszédok számával, azaz 6-tal, vagyis $u = \phi/6$. Az így adódó u-t összevetve (24.3)-mal, láthatjuk, hogy a NaCl típusú kristály *Madelung*-állandója

$$\alpha = \left(1 - \sqrt{2} + \frac{4}{3\sqrt{3}} + \ldots\right). \qquad (19.24.12)$$

Az így kapott sor konvergenciája olyan lassú, hogy az összeg értékének kiszámítása ily módon lehetetlen. Ezért úgy járunk el, hogy az ionokat többé-kevésbé semleges csoportokba rendezzük, szükség esetén egy iont tört részekre osztunk és egyes részeit különböző csoportokba képzeljük besorolva. Az ilyen semleges csoportokra való felosztásnak haszna az, hogy a semleges képződmények elektrosztatikus potenciálja a távolsággal sokkal gyorsabban csökken, mint az olyanoké, melyeknek eredő töltésük van. A NaCl típusú kristályrács esetében a legcélszerűbb felosztás, ha a rácsot elemi cellákra bontjuk. Már megbeszéltük, hogy e rács elemi cellája egy kocka, melynek lapjain levő ionok két, az éleken levő ionok négy, a csúcsokon levő ionok pedig nyolc cella közt oszlanak meg. Ezért a referencia ionnak az őt körülvevő elemi cellától származó elektrosztatikus energiája

$$-e^2\left(\frac{6/2}{r} - \frac{12/4}{\sqrt{2}\,r} + \frac{8/8}{\sqrt{3}\,r}\right) = -1{,}45\,\frac{e^2}{r}.$$

Ha az összegezést a következő nagyobb kockára, tehát összesen kilenc elemi cellára végezzük el, akkor az eredmény

$$-1{,}75\,\frac{e^2}{r}$$

lesz. Ez az eljárás egy gyorsan konvergáló sort eredményez, melynek végösszege

$$\phi = -1{,}747558\frac{e^2}{r}.$$

Az egy ionpárra jutó elektrosztatikus kölcsönhatás $\phi/6$, ezért a *Madelung*-állandó értéke

$$\alpha = \frac{1{,}747558}{6} = 0{,}291259 \qquad (19.24.13)$$

lesz.

Lényegében hasonló módszerrel állapítható meg a tércentrált CsCl típusú rács *Madelung*-állandója is. Az eredmény $\alpha = 0{,}29374$, tehát mintegy 1%-kal nagyobb, mint a NaCl típusú rács esetében. Ez azt jelenti, hogy a vonzóerők valamivel nagyobbak a CsCl típus esetében, mint a NaCl típus esetében. De a CsCl típusú rács esetén a taszító energia is megnövekszik 2–3%-kal a NaCl típushoz képest, és ez kiegyenlíti a vonzóerők megnövekedését. Végül is azt az eredményt kapjuk, hogy a NaCl típus valamivel kedvezőbb elrendeződés, mint a CsCl típus. A megfigyelés szerint valóban több ionos kristály létezik NaCl szerkezetben, mint CsCl szerkezetben, de a rácsenergiák közötti különbség oly kicsi, hogy szobahőmérsékleten már igen nehéz elméletileg eldönteni, hogy egy só melyik szerkezetben fog kristályosodni.

25. §. Rácsrezgések

Az előző §-ban megbeszéltük, hogy ha egy kristályban a rács építőkövei (atomok, molekulák, ill. ionok) a kristályszerkezet által megszabott egyensúlyi helyükön vannak, úgy semmiféle erő nem hat rájuk. A klasszikus fizika szerint ebben az állapotban a kristályt felépítő részecskék mozdulatlanok, ezt az állapotot nevezzük a kristály egyensúlyi állapotának. Ha most egy részecskét kimozdítunk az egyensúlyi helyzetéből, úgy a környező részecskék erőt fognak gyakorolni a kimozdított részecskére, ami igyekszik őt visszakényszeríteni az egyensúlyi helyzetébe. Ha a kimozdulás nem nagyon nagy, akkor ez az erő arányos lesz a kimozdulással, ekkor harmonikus erőről beszélünk. Ezen erő hatására a kimozdított részecske rezgőmozgást fog végezni az egyensúlyi helyzete körül. De Newton harmadik törvénye szerint, ha egy részecskét kimozdítunk az egyensúlyi helyzetéből, úgy nemcsak a környező részecskék fognak rá hatni, hanem reakcióképpen ő is erőt gyakorol a környező részecskékre, minek következtében azok is kimozdulnak az egyensúlyi helyzetükből, és rezgéseket végeznek. Ily módon láthatjuk, hogy ha egy egyensúlyi állapotban levő rácsban akár csak egyetlen részecskét is kilökünk az egyensúlyi helyzetből, úgy a rács valamennyi részecskéje rezgésbe jön, egy ún. rácsrezgés alakul ki. Az alábbiakban ezen rácsrezgések elméletével fogunk foglalkozni.

Mielőtt részletes tárgyalásba bocsátkoznánk, megemlítjük, hogy a rácsrezgések keltésének többféle módját is ismerjük. Ha pl. a kristályt röntgensugarak-

kal sugározzuk be, úgy a sugárzás egyik fotonja elnyelődhet a kristály valamelyik atomjában. Ekkor a foton impulzusa átadódik az abszorbeáló atomnak és kilöki azt az egyensúlyi helyzetéből, ami aztán a fentebb leírt módon egy rácsrezgés kialakulásához vezet. Hasonlóképpen, ha a kristályt neutronokkal bombázzuk, úgy a rács egyik atomjának magján a neutron szóródást szenvedhet. Szóródáskor a neutron impulzust ad át a magnak és ezzel ismét az egyensúlyi helyzet elhagyására kényszeríti az atomot. Egy további lehetőség az, ha a kristály egyik atomjának magja izomer átalakulással fotont bocsát ki. A foton kibocsátásakor fellép a magvisszalökődés jelensége, mert az impulzustörvény miatt a mag a kibocsátott fotonnal megegyező nagyságú, de ellenkező irányú impulzust fog kapni. A visszalökött mag kimozdul az egyensúlyi helyzetéből és kialakul egy rácsrezgés. Végül megjegyezzük, hogy rácsrezgések alakulnak ki a kristályt felépítő részecskék hőmozgásának hatására is.

A rácsrezgések tárgyalása céljából tekintsünk egy rácsot, mely összesen N részecskéből épül fel. A rács egy pillanatnyi állapotát úgy adhatjuk meg, ha felírjuk minden egyes részecske pillanatnyi helyzetét, ehhez összesen

$$f = 3N$$

számú koordinátára van szükség. Jelöljük ezeket a koordinátákat a következőkben

$$x_1, x_2, \ldots, x_i, \ldots, x_f \tag{19.25.1}$$

-fel. Megállapodunk abban, hogy ezek a koordináták az egyensúlyi helyzettől való elmozdulásokat írják le, vagyis az egyensúlyi helyzetet az

$$x_1 = x_2 = \ldots x_i = \ldots x_f = 0 \tag{19.25.2}$$

koordináták jellemzik. Mi a továbbiakban csak a harmonikus rezgések tárgyalására szorítkozunk, amikor az x_i elmozdulások kicsinyek.

A rács potenciális energiája természetesen az egyes részecskék helyzetének függvénye, azaz

$$U = U(x_1, x_2, \ldots, x_f). \tag{19.25.3}$$

Fejtsük ezt hatványsorba az egyes x_i koordináták szerint. Mivel az elmozdulások kicsinyek, ezért a harmad- és magasabbrendű tagokat elhanyagoljuk:

$$U = U_0 + \sum_{i=1}^{f} A_i x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{f} B_{ij} x_i x_j .$$

Nyilvánvaló, hogy U_0 nem más, mint a (25.2) egyensúlyi helyzethez tartozó potenciális energia, azaz az előző §-ban tárgyalt rácsenergia.

A következő célunk az i-edik koordinátának megfelelő erőkomponens megállapítása. Ha az általános

$$K_i = -\frac{\partial U}{\partial x_i}$$

formulát a fenti sorfejtésre alkalmazzuk, akkor kapjuk, hogy

$$K_i = -A_i - \sum_{j=1}^{f} B_{ij} x_j .$$

Az egyensúlyi helyzetben a rácsot alkotó részecskékre nem hat erő. Ezért, ha minden x_i helyébe zérust írunk, akkor az összes K_i erőkomponensnek el kell tűnnie. A K_i-re nyert formulánk szerint ez csak úgy lehetséges, ha az összes A_i sorfejtési együttható zérussal egyenlő. Tehát:

$$A_1 = A_2 = \ldots A_i = \ldots A_f = 0 . \tag{19.25.4}$$

Ezt tekintetbe véve, a potenciális energiát és az erőkomponenst a kövtkező formulákkal adhatjuk meg

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{f} B_{ij} x_i x_j , \tag{19.25.5}$$

$$K_i = -\sum_{j=1}^{f} B_{ij} x_j . \tag{19.25.6}$$

Ezek után írjuk fel a mozgásegyenleteket. NEWTON második törvénye szerint

$$M_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = K_i .$$

Beírva az erő (25.6) alakját, a következő mozgásegyenleteket kapjuk:

$$M_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\sum_{j=1}^{f} B_{ij} x_j . \qquad (i = 1, 2, \ldots, f) \tag{19.25.7}$$

Ez egy másodrendű, lineáris, állandó együtthatós differenciálegyenletrendszer. A megoldása céljából mindenekelőtt fejezzük ki a gyorsulást, vagyis osszuk el (25.7)-et M_i-vel:

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\sum_{j=1}^{f} \frac{B_{ij}}{M_i} x_j . \qquad (i = 1, 2, \ldots, f) \tag{19.25.8}$$

A (25.5) formula jobboldalán B_{ij} az $x_i x_j$ szorzat együtthatóját jelöli. Mivel ez a szorzat szimmetrikus i és j-ben: $x_i x_j = x_j x_i$, ezért az általánosság sérelme nélkül feltételezhetjük, hogy B_{ij} is szimmetrikus, azaz

$$B_{ij} = B_{ji} . \tag{19.25.9}$$

Nem mondhatjuk azonban szimmetrikusnak a (25.8) mozgásegyenlet jobboldalán fellépő B_{ij}/M_i együtthatókat, ugyanis elvben a rács különböző tömegű részecskéket is tartalmazhat, azaz általában $M_i \neq M_j$. Viszont a mozgásegyenletek megoldása sokkal kényelmesebb akkor, ha az együtthatórendszer szimmetrikus. En-

nek elérése céljából vezessük be a következő jelöléseket:

$$y_i = \sqrt{M_i} x_i \,, \tag{19.25.10}$$

$$D_{ij} = \frac{B_{ij}}{\sqrt{M_i M_j}} \,. \tag{19.25.11}$$

Vagy megfordítva

$$x_i = \frac{y_i}{\sqrt{M_i}} \,,$$

$$B_{ij} = \sqrt{M_i M_j}\, D_{ij} \,. \tag{19.25.12}$$

Ha ezeket beírjuk a (25.8) mozgásegyenletbe, úgy a következő differenciálegyenletrendszerhez jutunk:

$$\frac{d^2 y_i}{dt^2} = - \sum_{j=1}^{f} D_{ij} y_j \,. \quad (i = 1, 2, \ldots, f) \tag{19.25.13}$$

Ennek az egyenletnek a D_{ij} együtthatói már szimmetrikusak, ez következik B_{ij} szimmetriájából, valamint a (25.11) definícióból.

Keressük a (25.13) egyenletek megoldását időben periodikus formában. Célszerű lesz a komplex írásmód használata, tehát y_i-t a következő alakban vesszük fel:

$$y_i(t) = Y_i e^{-i\omega t} \,. \tag{19.25.14}$$

Itt Y_i egy konstans amplitúdó, mely komplex is lehet. A fenti kifejezés az időnek periodikus függvénye, a periódusidő

$$T = \frac{2\pi}{\omega} \,,$$

a másodpercenkénti rezgések száma, tehát a frekvencia pedig

$$\nu = \frac{1}{T} = \frac{\omega}{2\pi} \,.$$

Kiemeljük, hogy ω-t, és ezzel együtt a T periódusidőt és a ν frekvenciát az i indextől függetlennek, tehát minden koordinátára azonosnak vesszük. Ez fizikailag azt jelenti, hogy a rezgés periódusa az egész rácsra egységesen jellemző adat. Az Y_i amplitúdók már függenek i-től, tehát az egyes részecskék különböző irányokban és különböző maximális kitérésekkel rezeghetnek.

Az ω körfrekvencia és az Y_i amplitúdók meghatározása céljából írjuk be a (25.14) kifejezést a (25.13) mozgásegyenletbe. Kapjuk, hogy

$$- \omega^2 Y_i e^{-i\omega t} = - \sum_{j=1}^{f} D_{ij} Y_j e^{-i\omega t} \,.$$

Az egyenletből kiesik az $e^{-i\omega t}$ időfüggő tényező és rendezés után kapjuk, hogy

$$\sum_{j=1}^{f} D_{ij} Y_j = \omega^2 Y_i. \qquad (i = 1,2,\ldots,f) \tag{19.25.15}$$

Ez egy lineáris homogén egyenletrendszer az Y_i együtthatókra. Az egyenletrendszer triviális megoldása az, ha valamennyi Y_i helyébe zérust írunk:

$$Y_1 = Y_2 = \ldots = Y_f = 0.$$

Ebben az esetben valamennyi $x_i(t)$ koordináta minden időpillanatban azonosan zérus, tehát a triviális megoldás a kristály egyensúlyi állapotának felel meg.

A rácsrezgések vizsgálatához egyenletrendszerünknek a triviálistól különböző megoldásait kell megkeresnünk. Az algebrai egyenletek elméletéből ismeretes, hogy triviálistól különböző megoldása egy lineáris, homogén rendszernek akkor van, ha az egyenletrendszer együtthatóiból alkotott determináns zérus. (25.15) esetében ez a következő feltételt jelenti:

$$\begin{vmatrix} D_{11} - \omega^2 & D_{12} & \ldots & D_{1f} \\ D_{21} & D_{22} - \omega^2 & \ldots & D_{2f} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ D_{f1} & D_{f2} & \ldots & D_{ff} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0. \tag{19.25.16}$$

Ha ezt a determinánst kifejtjük, úgy egy f-ed fokú algebrai egyenletet kapunk az ω^2 mennyiségre, melyből ω^2 kiszámítható. Az általános esetben (25.16)-nak f különböző gyöke van, melyeket rendre a következőképpen jelölünk

$$\omega_1^2, \omega_2^2, \ldots, \omega_\sigma^2 \ldots, \omega_f^2. \tag{19.25.17}$$

Természetesen előfordulhat, hogy a (25.17) gyökök között egyenlőek is vannak, azaz (25.16)-nak többszörös gyöke van. Ebben az esetben elfajult (degenerált) gyökről beszélünk.

Az előzőkben megbeszéltük, hogy a D_{ij} együtthatók szimmetrikusak: $D_{ij} = D_{ji}$. Ennek a ténynek fontos algebrai következménye, hogy a (25.16) egyenlet gyökei, tehát az ω_σ^2 körfrekvencia-négyzetek mindig valós számok. Ha ω_σ^2 pozitív, úgy maga az ω_σ körfrekvencia is pozitív lesz; ez az eset felel meg a tényleges rácsrezgéseknek, mert csak ebben az esetben ír le (25.14) az időben periodikus mozgást. Ha ω_σ^2 negatív, úgy ω_σ imaginárius szám lesz: $\omega_\sigma = i\beta$. Ekkor a (25.14) koordináták az időnek exponenciális függvényei lesznek:

$$y_i(t) = Y_i e^{\beta t}.$$

Ekkor az egyensúlyi helyzetéből kimozdult részecske sohasem tér oda vissza; ebben az esetben a rács instabilis. Mi a továbbiakban csak stabilis rácsokkal foglalkozunk, tehát feltételezzük, hogy a (25.17) gyökök mind pozitívak.

Minden ω_σ^2 gyökhöz tartozik az Y_i amplitúdóknak egy megoldásrendszere.

A σ-dik megoldást így jelöljük:

$$Y_1^\sigma, Y_2^\sigma, \ldots, Y_f^\sigma. \tag{19.25.18}$$

Mivel a σ sorszám 1-től f-ig változhat, ezért az amplitúdókat egy $f \times f$ dimenziós mátrixba rendezhetjük:

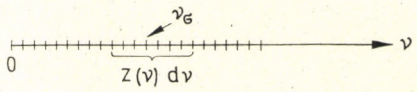
$$\begin{pmatrix} Y_1^1 & Y_1^2 \ldots Y_1^\sigma \ldots Y_1^f \\ Y_2^1 & Y_2^2 \ldots Y_2^\sigma \ldots Y_2^f \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ Y_i^1 & Y_i^2 \ldots Y_i^\sigma \ldots Y_i^f \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ Y_f^1 & Y_f^2 \ldots Y_f^\sigma \ldots Y_f^f \end{pmatrix}. \tag{19.25.19}$$

Ezt a mátrixot *amplitúdó-mátrix*nak nevezzük.

Még egy fontos fogalmat vezetünk be, a *frekvenciaeloszlási függvény*t. A (25.16 egyenlet megoldásával f számú (pozitív) ω_σ^2 értéket nyerünk, melyekből f számú

$$\nu_\sigma = \frac{\omega_\sigma}{2\pi} \tag{19.25.20}$$

rezgési frekvencia határozható meg. Ábrázoljuk ezeket a frekvenciatengelyen (27. ábra). Általában ezek a frekvenciák a frekvenciatengely egy meghatározott



27. ábra. A frekvenciaeloszlási függvény definiálása

véges tartományában helyezkednek el, mégpedig igen sűrűn, hiszen számuk $f = 3N$, és N egy makroszkopikus kristály esetén az L *Loschmidt*-szám nagyságrendjébe esik. Ezért a ν-tengely minden kis $d\nu$ intervallumába esnek rácsfrekvenciák; kis $d\nu$ esetén a ν és $\nu + d\nu$ frekvenciák közé eső rácsfrekvenciák száma arányos $d\nu$-vel, tehát

$$Z(\nu)d\nu$$

lesz. Az így definiált $Z(\nu)$ függvényt nevezzük frekvenciaeloszlási függvénynek. Mivel az összes rácsfrekvenciák száma f, ezért $Z(\nu)$-nek az összes frekvenciára kiterjesztett integrálja f-et kell, hogy adjon

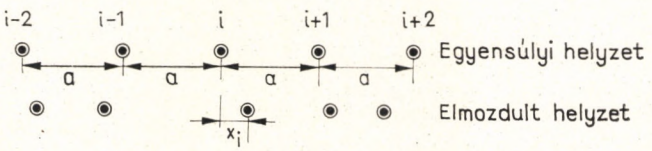
$$\int_0^\infty Z(\nu)d\nu = f. \tag{19.25.21}$$

Végül még ki kell emelnünk egy igen fontos dolgot. A rácsfrekvenciák meghatározása elvben a (25.16) egyenletből történik. Gyakorlatilag azonban ez a számítás keresztülvihetetlen. Pl. 1 mól anyag esetén $f = 3L \approx 2 \cdot 10^{24}$. Egy 10^{24}

dimenziós determináns kifejezése és egy 10^{24}-ed fokú polinom gyökeinek meghatározása képtelenség, ezt még a legnagyobb kapacitású számológépek sem tudnák keresztülvinni. A rácsfrekvenciák meghatározására ezért ki kell dolgoznunk egy olyan módszert, mely a számítások gyakorlati keresztülvitelét lehetővé teszi. Erre az ad lehetőséget, hogy a rács egyforma elemi cellákból épül fel, tehát periodikusan ismétlődő elemekből áll. Ennek a tulajdonságnak kiaknázásával fogunk foglalkozni a következő §-ban.

26. §. A rácsfrekvenciák meghatározása

Mielőtt a valóságos térbeli kristályokkal foglalkoznánk, vizsgáljuk meg az egydimenziós rácsok rezgéseit. Első példaként a legegyszerűbb esetet tekintjük, amikor az egydimenziós kristálylánc csupa egyforma atomokból áll. Egyensúlyi helyzetben a szomszédos atomok közötti távolság legyen a, az i-edik atom elmozdulása pedig x_i (28. ábra). Feltételezzük, hogy a lánc N db atomból áll; mivel egy-



28. ábra. Egydimenziós rács rezgése

dimenziós esetről van szó, ezért a koordináták száma is N lesz, tehát $f = N$.

Az áttekinthető tárgyalás kedvéért feltételezzük, hogy a láncban csak a szomszédos atomok hatnak egymásra, de a módszer, amit bemutatunk, akkor is alkalmazható, ha távolabbi szomszédok kölcsönhatását is figyelembe kell venni. Az i-edik atomra ható erő tehát az $(i+1)$-edik és az $(i-1)$-edik atomtól származik, és (25.6)-nak megfelelően arányos az egyensúlyi a távolságtól való elmozdulással.

$$K_i = -B(x_i - x_{i-1}) - B(x_i - x_{i+1}). \tag{19.26.1}$$

(Mivel az atomok azonosak, ezért nemcsak az M tömegeik egyformák, hanem a köztük ható erők B állandói is.)

(26.1)-et rendezve kapjuk, hogy

$$K_i = Bx_{i-1} - 2Bx_i + Bx_{i+1}.$$

Összehasonlítva az általános (25.6) erőkifejezéssel, láthatjuk, hogy:

$$B_{ij} = \begin{cases} +2B, & \text{ha } i - j = 0, \\ -B, & \text{ha } |i - j| = 1, \\ 0, & \text{egyébként.} \end{cases} \tag{19.26.2}$$

A B_{ij} együtthatók tehát csak az $i - j$ különbségtől függenek és ez a tulajdonság megmarad akkor is, ha távolabbi szomszédok kölcsönhatását is tekintetbe vesszük. Az alábbiakban erősen ki fogjuk használni, hogy B_{ij} csak $i - j$ függvénye.

Az előző §-ban kidolgozott szkéma szerint következő feladatunk a D_{ij} együttható-rendszer felírása. A (25.1) definícióban feltettük, hogy minden atom azonos M tömeggel rendelkezik, ezért $D_{ij} = B_{ij}/M$, azaz

$$D_{ij} = \begin{cases} +2D, & \text{ha} \quad i - j = 0, \\ -D, & \text{ha} \quad |i - j| = 1, \\ 0, & \text{egyébként}, \end{cases} \tag{19.26.3}$$

ahol $D = B/M$.

Ezek után írjuk fel az Y_i együtthatókra vonatkozó (25.15) egyenletrendszert. Esetünkben ez a következő alakot ölti:

$$-DY_{i-1} + 2DY_i - DY_{i+1} = \omega^2 Y_i. \quad (i = 1, 2, \ldots, f) \tag{19.26.4}$$

Nem nehéz belátni, hogy ennek az algebrai egyenletrendszernek a megoldása egy komplex exponenciális függvénnyel fejezhető ki, tehát az n-edik Y_n együttható a következő alakú:

$$Y_n = Ye^{ikan}. \tag{19.26.5}$$

Itt Y egy, az n indextől független amplitúdó, a az atomok egyensúlyi távolsága és k egy egyelőre önkényesen választható konstans. Beírva (26.5)-öt a (26.4) egyenletrendszerbe, kapjuk, hogy

$$DYe^{ikan}(-e^{-ika} + 2 - e^{ika}) = \omega^2 Ye^{ikan}.$$

Ebből ω^2-re kapjuk, hogy

$$\omega^2 = 4D \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right). \tag{19.26.6}$$

Láthatjuk tehát, hogy (26.5) valóban kielégíti az együtthatókra vonatkozó (26.4) egyenletrendszert és hogy minden valós k értékhez tartozik egy pozitív ω^2. A k-hoz tartozó rácsfrekvencia pedig

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{\sqrt{D}}{\pi}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right| \tag{19.26.7}$$

lesz.

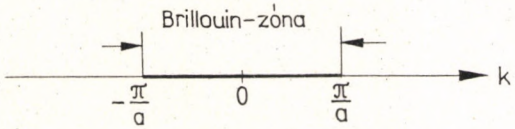
A fentiekben azt láttuk, hogy minden valós k számhoz tartozik egy rácsrezgés, melyet a (26.5) és (26.7) egyenletek írnak le. Az alábbiakban meg fogjuk mutatni, hogy a rácsrezgések leírásához k-nak csak meghatározott értékei jöhetnek szóba.

Először is beláthatjuk, hogy egy adott k-hoz, és a $k + \frac{2\pi}{a}$-hoz nem tartozik különböző megoldás. Ha ugyanis elvégezzük (26.5)-ben és (26.7)-ben a

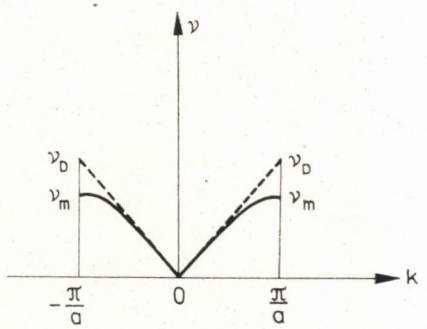
$$k \to k + \frac{2\pi}{a}$$

helyettesítést, úgy azonnal kiderül, hogy sem az Y_n együtthatók, sem a ν frekvencia

nem változik meg. Ez azt jelenti, hogy a k-tengelyen elég egy $\frac{2\pi}{a}$ hosszúságú szakaszra szorítkoznunk, ezen szakaszon levő értékekből valamennyi rácsrezgést le tudjuk származtatni. Szokás szerint ezt a $\frac{2\pi}{a}$ hosszúságú szakaszt a $k = 0$ hely körül szimmetrikusan vesszük fel és a k-tengelynek ezt a szakaszát hívjuk *Brillouin*-zónának (29. ábra). A k paramétert a *rácsrezgés hullámszámának*, a ν és k közötti összefüggést pedig *diszperziós összefüggésnek* nevezzük. A (26.7) diszperziós összefüggést láthatjuk a 30. ábrán. A ν frekvencia páros függvénye k-nak



29. ábra. Az egydimenziós rács *Brillouin*-zónája



30. ábra. A (26.7) diszperziós összefüggése

és $k = 0$-tól monoton növekszik a *Brillouin*-zóna széléig, ahol a maximális

$$\nu_m = \frac{\sqrt{D}}{\pi} = \frac{\sqrt{B}}{\pi M} \tag{19.26.8}$$

értéket veszi fel.

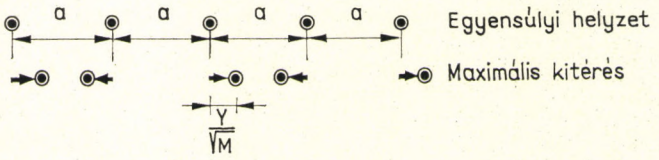
Vizsgáljuk meg a rácsrezgéseket három speciális k esetében. Legyen először k a *Brillouin*-zóna szélének megfelelő $\frac{\pi}{a}$ érték. Ekkor (26.5)-ből kapjuk, hogy

$$Y_n = e^{i\pi n} Y = (-1)^n Y .$$

(25.12) és (25.14) alapján az egyes atomok mozgását a következő képlet írja le:

$$x_n(t) = \frac{y_i(t)}{\sqrt{M}} = \frac{(-1)^n}{\sqrt{M}} Y e^{i\omega t} . \tag{19.26.9}$$

Ez a formula egy olyan állóhullámnak felel meg, melynél a szomszédos atomok egymással szemben rezegnek. Ezen rezgés szkematikus képét mutatja a (31. ábra). Az egyes atomok maximális kitérésének abszolút értéke $Y/\sqrt{M}$; amikor a páros sorszámú atomok jobbra térnek ki, akkor a páratlanok balra és fordítva. Minden



31. ábra. Az egydimenziós rács rezgése $k = \frac{\pi}{a}$ esetén

második atom mozgása pontosan azonos, ezért a rezgés hullámhossza az a rácsállandó kétszerese:

$$\lambda = 2a .$$

Az esetünkben fennálló $k = \pi/a$ összefüggés miatt a λ hullámhossz és a k hullámszám között fennáll, hogy

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} .$$

Második példaként tekintsük azt az esetet, amikor k a *Brillouin*-zóna közepét jelentő $k = 0$ érték és a szélét jelző $k = \pi/a$ érték közötti felezőpontban van, tehát ha $k = \frac{\pi}{2a}$. Ekkor (26.7)-ből kapjuk, hogy

$$v = \frac{\sqrt{D}}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{D}{2}} = \frac{v_m}{\sqrt{2}} .$$

Ekkor tehát a rácsfrekvencia a maximálisnak $\sqrt{2}$-ed része. A Y_n együtthatók (26.5) alapján

$$Y_n = e^{\frac{i\pi n}{2}} Y = i^n Y .$$

Mivel a tényleges amplitúdókat az Y_n együtthatók valós részei írják le, ezért az n-edik atom a valós amplitúdója

$$Y_n = \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) Y$$

lesz. Ez azt jelenti, hogy a páros sorszámú atomok el sem mozdulnak a helyükről, a páratlanok pedig egymással szemben rezegnek (32. ábra). A páratlan sorszámúak maximális kitérése ismét $\frac{Y}{\sqrt{M}}$ lesz. Most minden negyedik atom rezgése

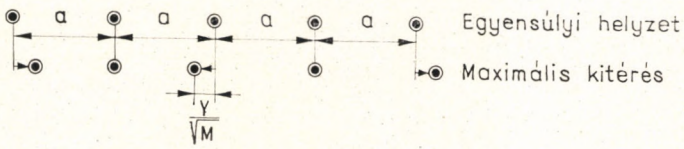
lesz azonos, a rezgés hullámhossza tehát

$$\lambda = 4a .$$

Mivel most $k = \pi/2a$, ezért fennáll, hogy

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} .$$

Belátható, hogy bármilyen k-t is választunk, a λ hullámhossz és a k hullámszám között mindig fennáll az előző példákon megismert $\lambda = 2\pi/k$ összefüggés.



32. ábra. Az egydimenziós rács rezgése $k = \frac{\pi}{2a}$ esetén

Harmadik példaként azt az esetet vizsgáljuk, amikor k nagyon közel van a *Brillouin*-zóna közepéhez, tehát $k \to 0$. Megjegyezzük, hogy ha $k = 0$, úgy (25.5) és (25.7) szerint $Y_n = Y$ és $v = 0$, tehát a lánc egy időtől független merev eltolásáról van szó, ami fizikailag érdektelen. Minket a zérustól különböző, de a

$$ka \ll 1 \qquad (19.26.10)$$

feltételt kielégítő hullámszámok érdekelnek. Ebben az esetben két szomszédos atom amplitúdójának viszonya,

$$\frac{Y_{n+1}}{Y_n} = \frac{Ye^{ika(n+1)}}{Ye^{ikan}} = e^{ika} \approx 1 + ika,$$

alig különbözik az egységtől, tehát a szomszédos atomok „majdnem" együtt mozognak, kis fáziskülönbség van csak köztük. A rezgés hullámhossza a (26.10) feltétel teljesülése esetében

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \gg a,$$

sokkal nagyobb az a rácsállandónál. Az ilyen rezgéseket akusztikus rezgéseknek nevezzük. Az akusztikus rezgések frekvenciáját (26.7) alapján kapjuk, figyelembe véve a (26.10) egyenlőtlenséget

$$v = \frac{\sqrt{D}}{\pi} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \approx \frac{\sqrt{D}}{\pi} \frac{ka}{2} = \frac{a\sqrt{D}}{2\pi} k . \qquad (19.26.11)$$

Akusztikus rezgéseknél a frekvencia arányos a k hullámszámmal. A $k = 2\pi/\lambda$

összefüggés alapján az akusztikus rezgések frekvenciáját a

$$\nu = \frac{a\sqrt{D}}{\lambda} = \frac{a}{\lambda}\sqrt{\frac{B}{M}} \tag{19.26.12}$$

alakban is felírhatjuk. Ismeretes, hogy a hullámok terjedési sebességét az általános $c = \lambda\nu$ formula adja meg. (26.12)-ből az akusztikus rezgések sebességére a

$$c = a\sqrt{D} = a\sqrt{\frac{B}{M}} \tag{19.26.13}$$

formula adódik. Ismert M tömeg és a rácsállandó esetén a c hangsebesség meghatározása a B erőállandó kiszámítását teszi lehetővé.

A rácsrezgések fenti korpuszkuláris elméletének kidolgozása előtt DEBYE egy olyan modellt állított fel, mely a kristályt folytonos testnek tekintette. Ebben az esetben csak akusztikus rezgések léphetnek fel, ami azt jelenti, hogy a diszperziós összefüggést az egész *Brillouin*-zónára a (26.12) összefüggéssel helyettesítjük. A *Debye*-modell szerint tehát

$$\nu = \frac{a\sqrt{D}}{2\pi} k = \frac{c}{2\pi} |k|, \tag{19.26.14}$$

ahol c az akusztikus rezgések terjedési sebessége. Ezt az összefüggést mutatja a 274. ábra szaggatott vonala. A maximális, vagy *Debye*-féle frekvenciát úgy kapjuk, hogyha k helyébe a *Brillouin*-zóna szélének megfelelő π/a értéket írjuk:

$$\nu_D = \frac{\sqrt{D}}{2} = \frac{c}{2a}. \tag{19.26.15}$$

A *Debye*-frekvencia tehát $\pi/2 = 1{,}571$-szer nagyobb, mint a korpuszkuláris elmélet alapján levezetett (26.8) maximális frekvencia.

A rácsrezgések eddigi tárgyalásánál nem beszéltünk a rács szélén levő viszonyokról, azaz a rács szélén előírt határfeltételekről. A fentiekben tárgyalt lineáris lánc esetében nem nehéz a rácsrezgéseket tetszőleges határfeltételek esetén meghatározni. Nem ilyen egyszerű a helyzet, ha a tárgyalást át akarjuk vinni a realisztikus háromdimenziós esetre.

A határfeltételekből adódó problémák megkerülése céljából a BORN és KÁRMÁN által javasolt módszert használjuk. Fizikailag nyilvánvaló, hogy ha a rács igen sok atomból áll, tehát $N \gg 1$, akkor a rács belsejében kialakuló fizikai viszonyokat már nem befolyásolják a rács széléhez tartozó határfeltételek. Más szóval igen nagy rácsok esetében a határfeltételeket önkényesen állapíthatjuk meg, ez a rács fizikai viselkedését nem fogja befolyásolni. A rácsrezgések megállapítása a legkényelmesebb a *Born–Kármán*-féle periodikus határfeltételek esetén, ami azt írja elő, hogy a (végtelen nagynak képzelt) rácsban az atomok mozgása az N atomszám szerint legyen periodikus, tehát pl. az 1-es sorszámú és az $N + 1$-es sorszámú atom mozgása mindenképpen azonos legyen. Ez a feltétel a lineáris

lánc esetén akkor és csakis akkor teljesül, ha (26.5)-ben az Y_n amplitúdó $n = 1$ és $n = N + 1$ esetében azonos

$$Ye^{ika} = Ye^{ika(N+1)}.$$

Ebből

$$e^{ikaN} = 1. \tag{19.26.16}$$

Ez az ún. *Born–Kármán*-határfeltétel. Ez a feltétel nem teljesül minden k-ra hanem csak akkor, ha a kaN mennyiség 2π-nek egész számú sokszorosa, vagyis ha

$$kaN = 2\pi\sigma,$$

tehát

$$k = \frac{2\pi}{Na}\sigma, \tag{19.26.17}$$

ahol σ egész szám. Mivel ráadásul k-nak a *Brillouin*-zónába kell esnie, ezért σ-ra a következő értékek jöhetnek szóba (feltesszük, hogy N páros szám):

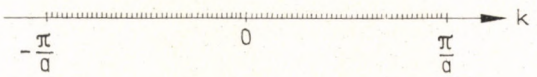
$$\sigma = -\left(\frac{N}{2} - 1\right), -\left(\frac{N}{2} - 2\right), \ldots, -1, 0, +1, \ldots, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2}. \tag{19.26.18}$$

A lehetséges σ értékek, és ezzel együtt a lehetséges k értékek száma N, ami megegyezésben van az előző § eredményével, mely szerint egy rácsnak annyiféle rezgése lehet, amennyi a független koordináták száma.

A lehetséges k értékeket a *Brillouin*-zónában az 33. ábra szemlélteti. A megengedett k értékek egymástól egyenlő,

$$\frac{2\pi}{Na}$$

távolságra fekszenek. Mivel N igen nagy, ezért a szomszédos k értékek távolsága igen kicsiny, vagyis a megengedett k értékek igen sűrűn helyezkednek el a *Brillouin*-zónában.



33. ábra. A megengedett k értékek a *Brillouin*-zónában egyenletes sűrűséggel helyezkednek el

Állapítsuk meg a $Z(\nu)$ frekvenciaeloszlási függvényt. A k-tengely egy dk szakaszára jutó rácsrezgések számát úgy kapjuk meg, ha dk-t elosztjuk a megengedett k értékek közötti távolsággal, vagyis a dk intervallumra

$$\frac{dk}{\frac{2\pi}{Na}} = \frac{Na}{2\pi}dk \tag{19.26.19}$$

rácsrezgés jut. A k hullámszám és a ν rácsfrekvencia közötti $\nu = \nu(k)$ összefüggés szerint a dk intervallumnak

$$d\nu = \frac{d\nu}{dk} dk \tag{19.26.20}$$

frekvenciaintervallum felel meg, ahol $\frac{d\nu}{dk}$ a diszperziós összefüggés deriváltja. (26.19) és (26.20) kombinálásával kapjuk, hogy a $d\nu$ frekvenciaintervallumra jutó rácsrezgések száma

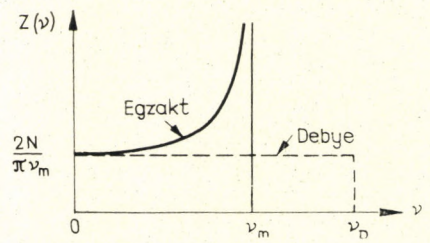
$$Z(\nu)\, d\nu = 2\frac{Na}{2\pi} dk = \frac{Na}{\pi} \frac{1}{\left(\frac{d\nu}{dk}\right)} d\nu .$$

A 2-es szorzótényező azért lépett fel, mert az $a + k$ és az $a - k$ értékhez ugyanaz a frekvencia tartozik. A fenti formulából a következő frekvenciaeloszlási függvényt kapjuk:

$$Z(\nu) = \frac{Na}{\pi} \frac{1}{\left(\frac{d\nu}{dk}\right)} . \tag{19.26.21}$$

A $\nu = \nu(k)$ diszperziós összefüggésből tehát a $Z(\nu)$ frekvenciaeloszlás egyszerűen kiszámítható. Az egyatomos lineáris láncra levezetett (26.7) diszperziós összefüggésből a

$$Z(\nu) = \frac{2N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\nu_m^2 - \nu^2}} \qquad (0 \leq \nu \leq \nu_m) \tag{19.26.22}$$



34. ábra. (A 26.22) frekvenciaeloszlási függvény és a *Debye*-féle frekvenciaeloszlási függvény

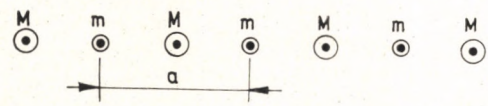
frekvenciaeloszlás adódik. Ezt ábrázoltuk a 34. ábrán. Ugyanezen ábrán feltüntetjük a *Debye*-féle (26.12) diszperziós összefüggésből adódó frekvenciaeloszlást is

$$Z(\nu) = \frac{2N}{\pi \nu_m} = \frac{N}{\nu_D} . \qquad (0 \leq \nu \leq \nu_D) \tag{19.26.23}$$

Következő példaként tárgyaljunk egy olyan lineáris láncot, mely kétféle atomból épül fel. Minden páros sorszámú atom tömege m, a páratlanoké M. Feltesszük, hogy $M > m$. Az egyensúlyi állapotban a szomszédos atomok távolsága legyen $a/2$, tehát két azonos tömegű atom közötti távolság a. A lánc képét a 35. ábra szemlélteti. A lánc álljon N számú m tömegű és ugyanannyi M tömegű atomból, tehát a láncban levő összes atomok száma

$$f = 2N. \tag{19.26.24}$$

Az egyszerűség kedvéért ismét feltételezzük, hogy csak a szomszédos atomok hatnak egymásra. Az i-edik atomra ható erőt ekkor ismét (26.1) adja meg, ahol x_i



35. ábra. Két különböző tömegű atomból álló lineáris lánc

az i-edik atom elmozdulása. A B_{ij} erőállandókat esetünkben is a (26.2) formula fogja megadni. Nem vehetjük át azonban automatikusan a D_{ij} együtthatók képletét az egyatomos lánctól, mert itt már figyelembe kell venni, hogy a láncunk két különböző tömegű atomból épül fel. Az általános (25.11) formulát alkalmazva esetünkre, kapjuk, hogy

$$D_{ij} = \begin{cases} \dfrac{2B}{m}, & \text{ha } i = j = 2n, \\ \dfrac{2B}{M}, & \text{ha } i = j = 2n+1, \\ -\dfrac{B}{\sqrt{mM}}, & \text{ha } |i-j| = 1, \\ 0 \text{ egyébként}, \end{cases} \tag{19.26.25}$$

ahol n egy egész számot, tehát $2n$ páros, $2n+1$ pedig páratlan számot jelent. D_{ij} ismét csak az $i-j$ különbségtől függ, ami a rácsfrekvenciák kiszámítását nagyon leegyszerűsíti, ahogy az alábbiakban látni fogjuk.

Most írjuk fel az Y_i amplitúdókra vonatkozó (25.15) egyenleteket. $i = 2n$ esetén kapjuk, hogy

$$\left(\frac{2B}{m} - \omega^2\right) Y_{2n} - \frac{B}{\sqrt{mM}}(Y_{2n-1} + Y_{2n+1}) = 0 \tag{19.26.26}$$

és i $= 2n + 1$ esetében

$$\left(\frac{2B}{M} - \omega^2\right) Y_{2n+1} - \frac{B}{\sqrt{mM}}(Y_{2n} + Y_{2n+2}) = 0\,. \tag{19.26.27}$$

Keressük ezen egyenletrendszer megoldását a következő alakban:

$$Y_{2n} = \alpha e^{ikan},$$
$$Y_{2n+1} = \beta e^{ika(n+\frac{1}{2})}. \tag{19.26.28}$$

Behelyettesítve ezeket a (26.26) és (26.27) egyenletekbe, a következő egyenletrendszerhez jutunk:

$$\left(\frac{2B}{m} - \omega^2\right)\alpha - \frac{2B}{\sqrt{mM}}\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\beta = 0,$$
$$\left(\frac{2B}{M} - \omega^2\right)\beta - \frac{2B}{\sqrt{mM}}\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\alpha = 0. \tag{19.26.29}$$

Ez egy kétismeretlenes, lineáris, homogén egyenletrendszer α és β-ra. A triviálistól különböző megoldás létezésének feltétele az, hogy az egyenletrendszer együtthatóiból képezett determináns zérus legyen. Tehát:

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{2B}{m} - \omega^2\right) & -\frac{2B}{\sqrt{mM}}\cos\left(\frac{ka}{2}\right) \\ -\frac{2B}{\sqrt{mM}}\cos\left(\frac{ka}{2}\right) & \left(\frac{2B}{M} - \omega^2\right) \end{vmatrix} = 0.$$

Vagy kifejtve és rendezve:

$$\omega^4 - 2B\frac{m+M}{mM}\omega^2 + \frac{4B^2}{mM}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) = 0. \tag{19.26.30}$$

Ez egy másodfokú egyenlet ω^2-re, melynek a következő két gyöke van:

$$\omega_+^2 = \frac{B}{mM}\left\{(m+M) + \sqrt{(m+M)^2 - 4mM\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\right\}, \tag{19.26.31}$$

$$\omega_-^2 = \frac{B}{mM}\left\{(m+M) - \sqrt{(m+M)^2 - 4mM\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\right\}. \tag{19.26.32}$$

Ha ω^2 a fenti két érték valamelyikével egyenlő, úgy (26.29)-nek van a triviálistól különböző megoldása. Ebben az esetben az m és M tömegű atomok amplitúdóinak viszonya:

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{\frac{2B}{m} - \omega^2}{\frac{2B}{\sqrt{mM}}\cos\left(\frac{ka}{2}\right)}. \tag{19.26.33}$$

Az egyenleteinkben szereplő k hullámszám egyelőre tetszőlegesnek volt tekinthető. Könnyen beláthatjuk, hogy k-ra ugyanazok az értékek jöhetnek szóba, mint az egyatomos láncnál. A (26.6) amplitúdók és a (26.31), (26.32) körfrekvenciák változatlanok maradnak, ha k helyébe $k + \frac{2\pi}{a}$-t írunk. Ez azt jelenti, hogy k értékeit elég egy $\frac{2\pi}{a}$ hosszúságú intervallumból választani, tehát k értékének kiválasztásánál elég a 273. ábra *Brillouin*-zónájára szorítkozni. Másrészt ismét a *Born – Kármán*-határfeltételeket írjuk elő, tehát megköveteljük, hogy (26.6) n-nek N-szerint periodikus függvénye legyen, azaz

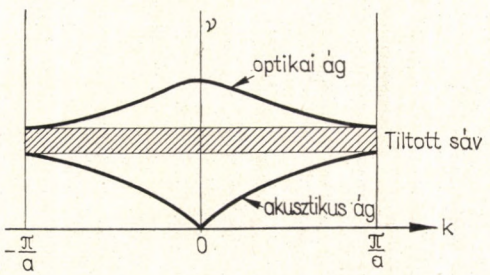
$$e^{ikaN} = 1$$

legyen. Ebből ismét következik, hogy a lehetséges k-értékeket

$$k = \frac{2\pi}{Na}\sigma,$$

$$\sigma = -\left(\frac{N}{2}-1\right), -\left(\frac{N}{2}-2\right), \ldots, -1, 0, 1, \ldots, \frac{N}{2}-1, \frac{N}{2}$$

adja meg. Tehát összesen N lehetséges k értékünk van, melyek a *Brillouin*-zónában fekszenek és a szomszédos értékek közötti távolság $\frac{2\pi}{Na}$, ahogy a 33. ábrán láthatjuk. Viszont most minden k hullámszámhoz két rácsrezgés tartozik, az egyik frekvenciáját (26.31), a másikét (26.32) adja meg. Az összes rácsrezgések száma tehát $f = 2N$-nel egyezik meg, ami megfelel a 25. §-ban kapott azon eredményünknek, hogy a rácsrezgések száma megegyezik a független koordináták számával. Mivel minden k-hoz két ν frekvencia tartozik, ezért a diszperziós összefüggés grafikonja kétágú lesz (36. ábra). A (26.31)-ből származó $\nu_+(k)$ görbét optikai ágnak, a (26.32)-nek megfelelő $\nu_-(k)$ görbét pedig akusztikus ágnak nevezzük. A 36. ábráról leolvasható, hogy az akusztikus ágnál $k = 0$-hoz a $\nu_- = 0$ érték tartozik, növekvő $|k|$-val ν_- növekszik, a maximális értékét a *Brillouin*-zóna



36. ábra. A két különböző tömegű atomból álló lánc diszperziós összefüggései

szélén veszi fel, ahol ν_- értéke

$$\nu_m = \nu_- \left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2B}{M}} \tag{19.26.34}$$

lesz. Az optikai ágban $k = 0$-hoz a zérustól különböző

$$\nu_0 = \nu_+(0) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2B(m+M)}{mM}} \tag{19.26.35}$$

érték tartozik, $|k|$ növekedtével a ν_+ optikai frekvencia csökken, a legkisebb értéket a *Brillouin*-zóna szélén kapjuk, ahol

$$\nu_e = \nu_+ \left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2B}{m}}. \tag{19.26.36}$$

A (26.34) és (26.36) frekvenciák közé semmilyen k-hoz nem tartozik rácsfrekvencia, ezért ezen két frekvencia közötti intervallumot a frekvenciák tiltott sávjának szokás nevezni. Láthatjuk, hogy a tiltott sáv annál szélesebb, minél nagyobb az m és M tömegek közötti különbség.

Vizsgáljunk meg közelebbről néhány speciális esetet. A $k = 0$ értéknél zérustól különböző frekvenciát csak az optikai ágban kapunk. Ha ezt (26.33)-ba tesszük, úgy a

$$\frac{\beta}{\alpha} = -\sqrt{\frac{m}{M}} \tag{19.26.37}$$

eredményre jutunk. A zérus hullámszámú optikai rezgésnél α és β ellenkező előjelűek, ami azt mutatja, hogy a könnyű (m tömegű) és a nehéz (M tömegű) atomok egymással szemben rezegnek. Az ilyen típusú rezgés keltésére a legalkalmasabb módszer a kristálynak fénnyel való besugárzása, innen ered az optikai rezgés elnevezés.

Ha k zérustól különböző, de $ka \ll 1$, úgy az akusztikus ág frekvenciája:

$$\nu_-(k) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{Ba^2}{2(m+M)}}\,k\,. \tag{19.26.38}$$

Ekkor tehát ν_- arányos k-val és ezért fordítva arányos a $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ hullámhosszal:

$$\nu_- = \sqrt{\frac{Ba^2}{2(m+M)}}\,\frac{1}{\lambda}\,. \tag{19.26.39}$$

(26.38), ill. (26.39) a hanghullámokra jellemző diszperziós összefüggést fejezi ki, ezért nevezzük $\nu_-(k)$-t akusztikus frekvenciának. A hang terjedési sebességét a $c = \lambda\nu$ összefüggésből kapjuk meg, innen adódik, hogy

$$c = \sqrt{\frac{Ba^2}{2(m+M)}}\,. \tag{19.26.40}$$

Most vizsgáljuk meg a *Brillouin*-zóna széléhez tartozó rácsrezgéseket. Az optikai és az akusztikai rezgések frekvenciáit erre az esetre már felírtuk (26.36), ill. (26.34) alatt. Ha ezeket a frekvenciákat (26.33)-ba tesszük, akkor kapjuk, hogy

$$\frac{\beta}{\alpha} = 0 \qquad \text{az optikai ágra,}$$

$$\frac{\beta}{\alpha} = \infty \qquad \text{az akusztikus ágra.}$$

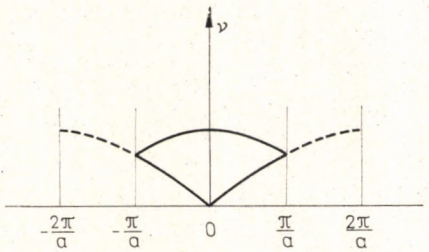
Az optikai ágban tehát véges α esetén $\beta = 0$, ami azt jelenti, hogy csak a könnyű, m tömegű atomok végeznek rezgőmozgást, az M tömegűek nem. Fordított a helyzet az akusztikus ágban. Véges β esetén ott $\alpha = 0$, tehát az M tömegű atomok rezegnek, az m tömegűek mozdulatlanok.

Érdekes megvizsgálni még az $m = M$ esetet. Ekkor a (26.31) és (26.32) diszperziós összefüggések a következőképpen alakulnak:

$$\omega_+^2 = \frac{4B}{M} \cos^2\left(\frac{ka}{2}\right),$$

$$\omega_-^2 = \frac{4B}{M} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right). \tag{19.26.41}$$

Ezt a diszperziós összefüggést láthatjuk a 37. ábrán. A tiltott sáv, ebben az esetben, eltűnik.



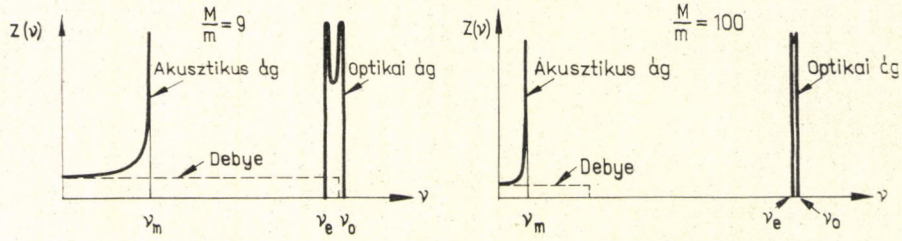
37. ábra. Diszperziós összefüggések $m = M$ esetén

Az $m = M$ esetben a lánc természetesen azonos lesz az egyatomos lánccal. A (26.41) és a (26.6) diszperziós összefüggések közötti eltérés csak formai. Először is az egyatomos lánc esetében a-val a szomszédos atomok közötti távolságot jelöltük, a kétatomos láncnál a a másodszomszédok közötti távolság jele, tehát ha a kétatomos láncból az egyatomos lánc egyenleteit akarjuk megkapni, úgy a helyébe $2a$-t kell írnunk. Ekkor (26.41)-ben az ω_- akusztikus körfrekvencia azonosan egyenlő lesz az egyatomos lánc (26.6) körfrekvenciájával. Azt is tekintetbe kell vennünk, hogy az $a \to 2a$ helyettesítéssel a *Brillouin*-zónát megfeleztük. Ha a a kétatomosnak képzelt lánc rácsállandója, vagyis a másodszomszédok távolsága, akkor az egyatomos lánc *Brillouin*-zónája $-\frac{2\pi}{a}$ és $\frac{2\pi}{a}$ közti intervallumban

van. Ha az optikai ág $-\frac{\pi}{a}$ és 0 közti szakaszát eltoljuk $\frac{2\pi}{a}$-val, úgy az akusztikus ág folytatását kapjuk meg a $\frac{\pi}{a}$ és $\frac{2\pi}{a}$ közti szakaszra; ezt az ábrán a szaggatott vonal jelöli. Ennek egyenlete

$$\omega_+^2\left(k+\frac{2\pi}{a}\right)=\frac{4B}{M}\cos^2\left(\frac{ka}{4}+\frac{\pi}{2}\right)=\frac{4B}{M}\sin^2\left(\frac{ka}{4}\right)=\omega_0^2(k)$$

lesz. Láthatjuk tehát, hogy $m = M$ esetén a kétatomos lánc rácsfrekvenciái ugyanazok, mint az egyatomos láncé.



38. ábra. Frekvenciaeloszlási függvény két különböző M/m viszony esetén

A kétféle atomból felépülő lánc frekvenciaeloszlását úgy kapjuk meg, ha az általánosan érvényes (26.21) formulába beírjuk a (26.31) és (26.32)-ből számított rácsfrekvenciákat. Az így kapott $Z(\nu)$-t láthatjuk a 38. ábrán kétféle M/m tömegviszony esetén. A 0-tól ν_m-ig terjedő szakasz az akusztikus frekvenciákat jelenti, itt a frekvenciaeloszlás kvalitatíve hasonlít az egyatomos lánc frekvenciaeloszlásához. A ν_m és ν_e közti tiltott sávban $Z(\nu)$ értéke zérus. A ν_e és ν_0 frekvenciák közé esnek az optikai rácsfrekvenciák. Az ábráról látjuk, hogy az optikai frekvenciák egy viszonylag szűk sávra korlátozódnak, a $\nu_0 - \nu_e$ optikai sávszélesség annál kisebb, minél nagyobb az $\frac{M}{m}$ tömegviszony. (Ez az eredmény igaz a háromdimenziós rácsok esetében is. Pl. litiumjodid esetében $\frac{M}{m}=\frac{127}{7}$, itt az optikai frekvenciák olyan szűk intervallumra esnek, hogy gyakorlatilag egyetlen optikai frekvenciáról beszélhetünk, melyet ν_e és ν_0 középértékével veszünk egyenlőnek.)

A rácsrezgések *Debye*-féle modellje csak az akusztikus frekvenciákat veszi figyelembe. A kétatomos lánc esetében a *Debye*-modell diszperziós összefüggése (26.38) lesz, az ebből számított frekvenciaeloszlás pedig egy ν-től független állandó

$$2N\sqrt{\frac{2(m+M)}{B}}$$

érték lesz. Mivel a frekvenciaeloszlás mindig eleget kell, hogy tegyen a (25.11)

normálási feltételnek, ezért a fenti konstans frekvenciaeloszlás csak egy ν_D határfrekvenciáig érvényes, attól kezdve Z már zérus. Mivel a kétatomos lánc esetében $f = 2N$, ezért a *Debye*-féle frekvenciaeloszlás a következő lesz:

$$Z(\nu) = \frac{2N}{\nu_D}, \qquad \text{ha} \qquad 0 \leq \nu \leq \nu_D,$$

$$Z(\nu) = 0, \qquad \text{ha} \qquad \nu > \nu_D, \tag{19.26.42}$$

ahol

$$\nu_D = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2B}{m+M}}. \tag{19.26.43}$$

A *Debye*-féle frekvenciaeloszlást a 38. ábrán szaggatott vonallal jelöltük. Láthatjuk, hogy $M \gg m$ esetén a *Debye*-frekvenciaeloszlás csak az akusztikus frekvenciákról ad közelítőleg számot, az optikai frekvenciák szűk sávja messze a *Debye*-eloszláson túl fekszik.

27. §. A háromdimenziós rácsok rezgései

Az előző §-ban az egydimenziós rácsokkal foglalkoztunk, most rátérünk a térbeli, háromdimenziós rácsok tárgyalására. A 24.§-ban láttuk, hogy a kristály csupa egyforma elemi cellából épül fel. Egy elemi cella helyzetét a kristályban három egész számmal adhatjuk meg, melyeket l_1, l_2, l_3-mal jelölünk. Ezeket egy $\mathbf{l}$ vektorban foglaljuk össze,

$$\mathbf{l} = (l_1, l_2, l_3), \tag{19.27.1}$$

ahol tehát

$$l_\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \qquad (\alpha = 1, 2, 3) \tag{19.27.2}$$

$\mathbf{l}$-et az egyes elemi cellákra vonatkozó indexnek vagy sorszámnak tekintjük, nem feledkezve meg arról, hogy $\mathbf{l}$ tulajdonképpen egy számhármast jelent. Az $\mathbf{l}$-edik elemi cella centrumának helyét $\mathbf{R}(\mathbf{l})$-el jelöljük. Ez kifejezhető a kristályrács három kristálytani tengelyéhez tartozó $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ primitív vektorokkal:

$$\mathbf{R}(\mathbf{l}) = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3. \tag{19.27.3}$$

Az $\mathbf{l}$-edik elemi cellában általában több atom is lehet, a számukat jelölje r. Ezt az r atomot egymástól egy κ indexszel különböztetjük meg, ahol

$$\kappa = 1, 2, \ldots, r. \tag{19.27.4}$$

Végeredményben tehát a kristályrács egy atommját azzal adhatjuk meg, hogy megmondjuk, hogy melyik elemi cella hányadik atomjáról van szó, vagyis az atom jellemzésére az $\mathbf{l}$ és κ adatok szolgálnak. Az atomok helyét az egyensúlyban levő

kristályban a következőképpen jelöljük:

$$\mathbf{R}\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix} = \left(R_x\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix}, R_y\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix}, R_z\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix}\right).$$

Az $\mathbf{l}$ és κ indexekkel jellemzett atom pillanatnyi kimozdulásának jele:

$$\mathbf{x}\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix} = \left(x_x\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix}, x_y\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix}, x_z\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix}\right). \tag{19.27.5}$$

A rács pillanatnyi helyzetét az $x_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix}$ koordináták összessége írja le. Ha a kristályrács N elemi cellából épül fel, úgy a lehetséges $\mathbf{l}$ vektorok száma is N. A κ index r értéket, α pedig három indexet, x, y és z-t, jelölhet. Ezért az $x_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix}$ koordináták összes száma:

$$f = 3rN. \tag{19.27.6}$$

A rácsrezgéseket leíró egyenleteket (25.15) mintájára írjuk fel. Az i index helyébe most az $(\mathbf{l}, \kappa, \alpha)$ indexcsoport kerül. A D_{ij} mátrixot a következőképpen fogjuk jelölni:

$$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\mathbf{l} & \mathbf{m}\\ \kappa & \lambda\end{pmatrix}. \tag{19.27.7}$$

A rácsrezgéseket leíró (25.15) egyenletek esetünkben a következő alakúak lesznek:

$$\sum_{\mathbf{m},\lambda,\beta} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\mathbf{l} & \mathbf{m}\\ \kappa & \lambda\end{pmatrix} Y_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{m}\\ \lambda\end{pmatrix} = \omega^2 Y_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix}. \tag{19.27.8}$$

Ez az egyenlet természetesen nem más, mint (25.15) átírása a jelenlegi jelöléseinkre. A megoldását csak akkor tudjuk megkeresni, ha egy lényeges, új fizikai körülményt tekintetbe veszünk. Tudjuk, hogy a kristályrács elemi cellák periodikus ismétlődéséből áll. Éppen ezért a (27.7) mátrix nem fog függni külön-külön az $\mathbf{l}$ és $\mathbf{m}$ cella-indexektől, hanem csak a cellák egymástól való távolságára jellemző $\mathbf{l}-\mathbf{m}$ vektortól. Tehát a D-mátrix a következő alakú:

$$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\mathbf{l}-\mathbf{m}\\ \kappa \quad \lambda\end{pmatrix}. \tag{19.27.9}$$

Ez a tény nagymértékben leegyszerűsíti a (27.8) egyenletek megoldását. Keressük ugyanis a megoldást az előző §-ban is használt periodikus alakban:

$$Y_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix} = Y_\alpha(\kappa)e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}(\mathbf{l})}. \tag{19.27.10}$$

Itt $Y_\alpha(\kappa)$ egy, az $\mathbf{l}$ indextől független amplitúdó. Behelyettesítve (27.8)-ba kapjuk,

hogy

$$\sum_{\mathbf{m},\lambda,\beta} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\mathbf{l}-\mathbf{m}\\ \kappa\quad\lambda\end{pmatrix} Y_\beta(\lambda)e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}(\mathbf{m})} = \omega^2 Y_\alpha(\kappa)e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}(\mathbf{l})}.$$

Osszuk végig ezt az egyenletet $e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}(\mathbf{l})}$-lel

$$\sum_{\mathbf{m},\lambda,\beta} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\mathbf{l}-\mathbf{m}\\ \kappa\quad\lambda\end{pmatrix} e^{-i\mathbf{k}[\mathbf{R}(\mathbf{l})-\mathbf{R}(\mathbf{m})]} Y_\beta(\lambda) = \omega^2 Y_\alpha(\kappa).$$

Az **l**-edik és **m**-edik elemi cella távolsága (27.3) szerint csak az **l**−**m** különbségtől függ. Ezért:

$$\mathbf{R}(\mathbf{l}) - \mathbf{R}(\mathbf{m}) = \mathbf{R}(\mathbf{l} - \mathbf{m}). \tag{19.27.11}$$

Vegyük ezt figyelembe a fenti egyenletünkben és jelöljük **l** − **m**-et **q**-val, ekkor

$$\sum_{\mathbf{q},\lambda,\beta} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\mathbf{q}\\ \kappa\ \lambda\end{pmatrix} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}(\mathbf{q})} Y_\beta(\lambda) = \omega^2 Y_\alpha(\kappa). \tag{19.27.12}$$

Itt az **m** szerinti összegezés helyett **q** szerinti összeget írhattunk, mert ha **m** végigfut az összes elemi cellán, akkor **q** = **l** − **m** is végig fog futni mindegyik elemi cellán. A fenti egyenletünkben a **q** szerinti összegezés nem érinti az Y amplitúdókat. Ezért bevezethetjük a következő mátrixot

$$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\mathbf{k}\\ \kappa\ \lambda\end{pmatrix} = \sum_{\mathbf{q}} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\mathbf{q}\\ \kappa\ \lambda\end{pmatrix} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}(\mathbf{q})}.$$

Szokás az α és κ indexpárt egyetlen ξ indexben és a β, λ indexpárt egy η indexben összefoglalni. Akkor a D mátrixot a következőképpen írjuk:

$$D_{\xi\eta}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}} D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix}\mathbf{q}\\ \kappa\ \lambda\end{pmatrix} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}(\mathbf{q})}. \tag{19.27.13}$$

Ez a $D_{\xi\eta}$ mátrix egy **k** vektortól függ, melyet hullámszámvektornak nevezünk. A ξ és η indexek egyenként $3r$ értéket vehetnek fel, hiszen pl. α-nak 3, κ-nak pedig r értéke lehetséges, ezért ξ összesen $3r$ értéken futhat végig. $D_{\xi\eta}$ tehát egy $3r \times 3r$ dimenziójú mátrix.

A (27.13) jelölés bevezetésével (27.12) a következőképpen alakul:

$$\sum_{\eta} D_{\xi\eta}(\mathbf{k}) Y_\eta = \omega^2 Y_\xi. \qquad (\xi = 1,2,\ldots,3r) \tag{19.27.14}$$

(27.14) egy lineáris, homogén egyenletrendszer az együtthatókra. Formailag teljesen azonos (25.15)-tel, de igen lényeges különbség van az ismeretlenek számában. Míg (25.15)-ben az ismeretlenek száma $f = 3N$, tehát makroszkopikus méretű kristály esetén 10^{24} nagyságrendű, addig (27.14)-ben az ismeretlenek száma mindössze $3r$, ahol r az elemi cellában levő atomok száma. Mivel r még a bonyolultabb kristályok esetén is kis egész szám, ezért a (27.14) egyenletrendszer megoldásának nincs semmilyen gyakorlati akadálya.

A (27.14) lineáris, homogén egyenletrendszer megoldhatóságának feltétele az, hogy az ismeretlenek együtthatóiból képezett determináns eltűnjön.

$$\begin{vmatrix} D_{11}(\mathbf{k}) - \omega^2 & D_{12}(\mathbf{k}) & \dots & D_{1,3r}(\mathbf{k}) \\ D_{21}(\mathbf{k}) & D_{22}(\mathbf{k}) - \omega^2 & \dots & D_{2,3r}(\mathbf{k}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ D_{3r,1}(\mathbf{k}) & D_{3r,2}(\mathbf{k}) & \dots & D_{3r,3r}(\mathbf{k}) - \omega^2 \end{vmatrix} = 0. \qquad (19.27.15)$$

Ezt a determinánst kifejtve egy $3r$-ed fokú polinomot kapunk ω^2-re, amelyből a rácsfrekvenciák kiszámíthatók. (27.15) gyökeit a következőképpen jelöljük:

$$\omega_1^2(\mathbf{k}),\ \omega_2^2(\mathbf{k}),\ \dots,\omega_{3r}^2(\mathbf{k}). \qquad (19.27.16)$$

$3r$-ed fokú polinomról lévén szó, $3r$ megoldást kapunk. A körfrekvenciákból számított

$$\nu_1(\mathbf{k}),\ \nu_2(\mathbf{k}),\ \dots,\ \nu_{3r}(\mathbf{k}) \qquad (19.27.17)$$

rácsfrekvenciák száma szintén $3r$. Ez azt jelenti, hogy minden $\mathbf{k}$ hullámszámvektorhoz $3r$ frekvencia tartozik. A $\nu = \nu(\mathbf{k})$ összefüggést most is diszperziós összefüggésnek nevezzük, de most a hullámszám nem egy lineáris paraméter, hanem egy háromdimenziós $\mathbf{k}$ vektor. (27.17) pedig azt mutatja, hogy a diszperziós görbének $3r$ ága van. Ezek kvalitatív menetét (a $\mathbf{k}$-tér egy önkényesen kiválasztott irányában) a 39. ábrán láthatjuk. Bebizonyítható, hogy a diszperziós görbék között mindig három olyan van, melyek $k = 0$ esetén $\nu = 0$ frekvenciát adnak. Ezeket hívjuk akusztikus ágaknak. A többi $3(r-1)$-ág neve: optikai ágak.

Hátra van még a lehetséges $\mathbf{k}$ hullámszámvektorok megállapítása. Ehhez mindenekelőtt meg kell ismerkednünk a reciprok-rácsvektorok fogalmával. Legyen $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ és $\mathbf{a}_3$ a három kristálytani tengelynek megfelelő primitív eltolási vektor. A reciprok-rácsvektorokat a következőképpen definiáljuk:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{V_a},$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{V_a},$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]}{V_a},$$

ahol

$$V_a = \mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3],$$

az elemi cella térfogata. A reciprok-rácsvektorok ezen definíciójából azonnal következik, hogy

$$\mathbf{a}_i\mathbf{b}_j = \delta_{ij}, \qquad (19.27.18)$$

ahol δ_{ij}-vel, szokás szerint, a *Kronecker*-féle δ szimbólumot jelöltük, melynek

értéke

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{ha } i = j, \\ 0, & \text{ha } i \neq j. \end{cases} \tag{19.27.19}$$

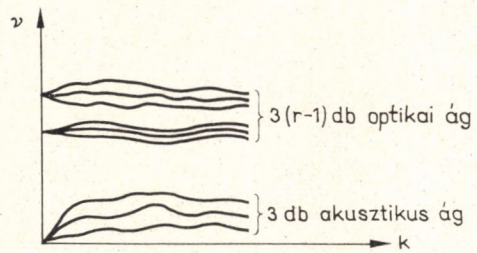
Legyen $\boldsymbol{\tau}$ a reciprok-rácsvektorok egészszámú többszöröseiből felépülő vektor

$$\boldsymbol{\tau}(\mathbf{h}) = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3, \tag{19.27.20}$$

melyben tehát

$$h_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad (i = 1, 2, 3)$$

Szorozzuk meg skalárisan $\boldsymbol{\tau}$-t az l-edik elemi cella centrumát megadó $\mathbf{R}$ vektor-



39. ábra. Háromdimenziós kristályok diszperziós görbéi

ral. Mivel $\mathbf{R}$ (27.3) alakú, ezért (27.20) figyelembevételével kapjuk:

$$\mathbf{R}(\mathbf{l})\,\boldsymbol{\tau}(\mathbf{h}) = l_1h_1 + l_2h_2 + l_3h_3 = \text{egész szám.} \tag{19.27.21}$$

Ezért, ha a rácsrezgéseket leíró $Y_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{l}\\ \kappa\end{pmatrix}$ amplitúdók (27.10) kifejezésében $\mathbf{k}$ helyébe $\mathbf{k} + 2\pi\boldsymbol{\tau}$-t írunk, úgy nem kapunk újabb megoldást. Ugyanezt mondhatjuk a rácsfrekvenciák kiszámításánál alapvető szerepet játszó $D_{\xi\eta}$ mátrixról is. Ha (27.13)-ban elvégezzük a $\mathbf{k} \to \mathbf{k} + 2\pi\boldsymbol{\tau}$ helyettesítést, akkor (27.21) miatt $D_{\xi\eta}$ változatlan marad, következésképpen a $\mathbf{k}$ hullámszámhoz és a $\mathbf{k} = 2\pi\boldsymbol{\tau}$ hullámszámhoz tartozó rácsfrekvenciák ugyanazok. Éppen ezért elegendő azokkal a $\mathbf{k}$ vektorokkal foglalkoznunk, melyek végpontja a

$$2\pi\mathbf{b}_1, \quad 2\pi\mathbf{b}_2, \quad 2\pi\mathbf{b}_3$$

vektorok által kifeszített paralelepipedonba esik. Ezt a paralelepipedont nevezzük a (háromdimenziós) *Brillouin*-zónának.

A $\mathbf{k}$-vektorok lehetséges értékeire vonatkozó másik megszorítás a határfeltételekből adódik. Ismét egy igen nagy kristályra gondolunk és a *Born—Kármán*-féle periodikus határfeltételeket írjuk elő. A kristályban levő elemi cellák számát

$$N = N_1 N_2 N_3$$

alakban írhatjuk fel, ahol N_1, N_2, ill. N_3 az egyes kristálytani tengelyek mentén levő elemi cellák számát jelölik. Természetesen feltételezzük, hogy ezek igen nagy

számok:

$$N_1, N_2, N_3 \gg 1 . \tag{19.27.22}$$

Az 1-gyel jelölt kristálytani tengely menti periodicitás azt jelenti, hogy az $\mathbf{R} = N_1\mathbf{a}_1$ centrumú elemi cellában az atomok éppen úgy rezegnek, mint az origónál levő $\mathbf{R} = 0$ cetrumú elemi cellában. Ugyanez igaz a 2-vel és 3-mal jelölt kristálytani tengelyekre. Tehát a *Born—Kármán*-határfeltételek szerint

$$Y_\alpha\begin{pmatrix} N_1, 0, 0 \\ \kappa \end{pmatrix} = Y_\alpha\begin{pmatrix} 0, N_2 0 \\ \kappa \end{pmatrix} = Y_\alpha\begin{pmatrix} 0, 0, N_3 \\ \kappa \end{pmatrix} = Y_\alpha\begin{pmatrix} 0, 0, 0 \\ \kappa \end{pmatrix}$$

Vagy (27.10) miatt

$$e^{i\mathbf{k}N_1\mathbf{a}_1} = e^{i\mathbf{k}N_2\mathbf{a}_2} = e^{i\mathbf{k}N_3\mathbf{a}_3} = 1 . \tag{19.27.23}$$

(27.18) alapján rögtön fel tudjuk írni azokat a $\mathbf{k}$ vektorokat, melyek teljesítik ezt a feltételt:

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi h_1}{N_1}\mathbf{b}_1 + \frac{2\pi h_2}{N_2}\mathbf{b}_2 + \frac{2\pi h_3}{N_3}\mathbf{b}_3, \tag{19.27.24}$$

ahol h_1, h_2 és h_3 egész számok. Mivel $\mathbf{k}$-nak a *Brillouin*-zónába kell esnie, ezért a h_i egész számokra csak a következő értékek jöhetnek szóba:

$$h_i = 1, 2, \ldots, N_i. \quad (i = 1, 2, 3) \tag{19.27.25}$$

Az összes megengedett $\mathbf{k}$ vektor száma tehát $N_1N_2N_3 = N$ lesz, ugyanannyi, mint az elemi cellák száma. Mivel minden $\mathbf{k}$ hullámszámvektorhoz $3r$ rácsfrekvencia tartozik, ezért az összes rácsfrekvenciák száma $3rN$ lesz, azaz ugyanannyi, mint a (27.6) szerinti összes koordináták száma. Ez az eredmény teljes összhangban van a 25. §-ban kimondott általános tétellel, mely szerint a rácsfrekvenciák száma egyenlő a független koordináták számával.

(27.24)-ből láthatjuk, hogy a megengedett $\mathbf{k}$-vektorok végpontjai egy rácsszerkezetet alkotnak, melynek primitív vektorai a következők:

$$\frac{2\pi}{N_1}\mathbf{b}_1 , \quad \frac{2\pi}{N_2}\mathbf{b}_2 , \quad \frac{2\pi}{N_3}\mathbf{b}_3 . \tag{19.27.26}$$

Ezek a primitív vektorok igen kicsinyek, mert (27.22) szerint N_1, N_2 és N_3 igen nagy számok. Ez azt jelenti, hogy a megengedett $\mathbf{k}$ vektorok végpontjai a *Brillouin*-zónában igen sűrűn helyezkednek el.

Sokszor szükséges lesz tudnunk, hogy a $\mathbf{k}$ vektorok terének egy

$$d^3k = dk_x dk_y dk_z$$

térfogatelemébe hány megengedett $\mathbf{k}$-vektor jut. Ezt nyilván úgy kapjuk meg, ha a d^3k térfogatelemet elosztjuk a (27.26) primitív vektorok általk ifeszített paralelepipedon térfogatával, azaz a

$$\frac{(2\pi)^3}{N_1N_2N_3}\mathbf{b}_1[\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3] \tag{19.27.27}$$

kifejezéssel. Vegyük figyelembe, hogy $N_1 N_2 N_3 = N$ és hogy a $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ és $\mathbf{b}_3$ reciprok-rácsvektorok (27.16) definíciója szerint

$$\mathbf{b}_1[\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3] = \frac{1}{V_a},$$

ekkor (27.27)-et a következőképpen írhatjuk fel:

$$\frac{(2\pi)^3}{NV_a}.$$

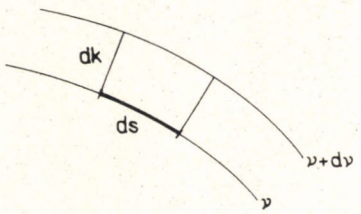
Végeredményben tehát a d^3k térfogatelembe eső **k**-vektorok száma a következő:

$$\frac{NV_a}{(2\pi)^3} d^3k \tag{19.27.28}$$

Végül számítsuk ki a $Z(\nu)$ frekvenciaeloszlási függvényt. Láttuk, hogy a $\nu = \nu(\mathbf{k})$ diszperziós összefüggés $3r$ ágra bomlik fel, ennek megfelelően $Z(\nu)$-is $3r$ részből fog összetevődni, melyek részben átfedhetik egymást

$$Z(\nu) = \sum_{\sigma=1}^{3r} Z_\sigma(\nu) . \tag{19.27.29}$$

A $Z_\sigma(\nu)$ frekvenciaeloszlás kiszámításához húzzuk meg a **k**-vektorok terében azt a



40. ábra. Konstans frekvenciájú felületek a hullámszám-térben

felületet, ahol a $\nu_\sigma(\mathbf{k})$ frekvencia egy konstans ν értéket vesz fel, valamint azt a felületet is, ahol $\nu_\sigma(\mathbf{k})$ értéke $\nu + d\nu$-vel egyenlő (40. ábra). E két felület egymástól való távolsága

$$dk = \frac{d\nu}{|\operatorname{grad}_{\mathbf{k}} \nu_\sigma(\mathbf{k})|} \tag{19.27.30}$$

lesz. Ha a ν értékhez tartozó felületen kijelölünk egy ds felületelemet, akkor a ds alapú és dk magasságú hasábban levő $\nu_\sigma(\mathbf{k})$ frekvenciák száma (27.28) alapján

$$\frac{NV_a}{(2\pi)^3} dsdk = \frac{NV_a}{(2\pi)^3} \frac{ds}{|\operatorname{grad}_{\mathbf{k}} \nu_\sigma(\mathbf{k})|} d\nu$$

lesz. Ha ezt integráljuk valamennyi ds felületelemre, akkor megkapjuk a ν és

$\nu + d\nu$ frekvenciák közé eső, a σ-dik ághoz tartozó rácsfrekvenciák számát. Tehát

$$Z_\sigma(\nu) = \frac{NV_a}{(2\pi)^3} \int \frac{ds}{|\mathrm{grad}_{\mathbf{k}}\, \nu_\sigma(\mathbf{k})|} . \tag{19.27.31}$$

$Z_\sigma(\nu)$-re nyert fenti kifejezésünk a konkrét számítás elvégzésére sokszor alkalmatlan. Ezért $Z_\sigma(\nu)$-t egy azonos matematikai átalakítással célszerűbb alakra szokás hozni. Ennek az átalakításnak részleteit nem mutatjuk be, csak a végeredményt közöljük.

$$Z_\sigma(\nu) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iy\nu} f(y)\, dy , \tag{19.27.32}$$

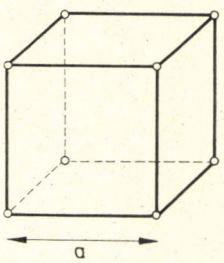
ahol

$$f(y) = \frac{NV_a}{(2\pi)^3} \int e^{iy\nu_\sigma(\mathbf{k})} d^3k , \tag{19.27.33}$$

melyben a $\mathbf{k}$-szerinti integrálást a *Brillouin*-zónára kell kiterjeszteni.

28. §. Longitudinális és tranzverzális rácsrezgések

Vizsgáljuk meg részletesebben a legegyszerűbb háromdimenziós kristályrács, az ún. egyszerű köbös rács rezgéseit. E rács egy elemi celláját mutatja a 41. ábra. Az elemi cella egy a élhosszúságú kocka, melynek csúcsaiban egymással azonos



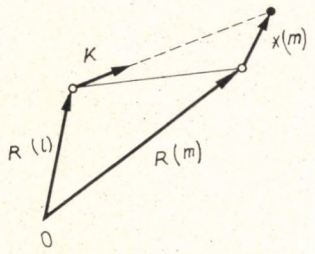
41. ábra. Egyszerű köbös rács

atomok helyezkednek el. A rács primitív vektorai tehát

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= (a, 0, 0), \\ \mathbf{a}_2 &= (0, a, 0), \\ \mathbf{a}_3 &= (0, 0, a) \end{aligned} \tag{19.28.1}$$

és minden elemi cellába csak egyetlen atom tartozik, azaz $r = 1$. A rácsfrekvenciák kiszámítása céljából mindenekelőtt a $D_{\xi\eta}(\mathbf{k})$ mátrixot kell megállapítanunk. Esetünkben ez egy 3×3 dimenziójú mátrix lesz, mert a ξ és η indexek három értéken futhatnak végig, melyek az x, y és z irányoknak felelnek meg.

Első feladatunk az atomok közötti erők felírása lesz. A 42. ábrán az **l**-edik és az **m**-edik atom nyugalmi helyzetét láthatjuk. Gondoljuk el, hogy az **m**-edik atomot elmozdítjuk az egyensúlyi helyzetéből egy kicsi **x**(**m**) vektornak megfelelő távolsággal. Ekkor az **l**-edik és az **m**-edik atom között egy **K** erő fog fellépni, mely arányos lesz a két atom közötti távolság megváltozásával és a köztük levő **R**(**m**) +



42. ábra. Az *l*-edik és az *m*-edik atom között ható erő

+ **x**(**m**) − **R**(**l**) távolság irányába fog mutatni. Az **l**-edik atomra ható erő kifejezése tehát a következő lesz:

$$\mathbf{K} = f^{|\mathbf{l}-\mathbf{m}|}\,\frac{\mathbf{R}(\mathbf{m})+\mathbf{x}(\mathbf{m})-\mathbf{R}(\mathbf{l})}{|\mathbf{R}(\mathbf{m})+\mathbf{x}(\mathbf{m})-\mathbf{R}(\mathbf{l})|}\,\{|\mathbf{R}(\mathbf{m})+\mathbf{x}(\mathbf{m})-\mathbf{R}(\mathbf{l})|-|\mathbf{R}(\mathbf{m})-\mathbf{R}(\mathbf{l})|\}\,,$$

ahol $f^{|\mathbf{l}-\mathbf{m}|}$ az erőállandó szerepét betöltő arányossági tényező, mely az **l** és **m** atomok kölcsönös távolságától függ. Ha **x**(**m**) nagyon kicsi, akkor a fenti erőkifejezésre sorba fejtéssel kapjuk, hogy

$$\mathbf{K} = f^{|\mathbf{l}-\mathbf{m}|}\,\frac{(\mathbf{R}(\mathbf{l})-\mathbf{R}(\mathbf{m}))\,\mathbf{x}(\mathbf{m})}{|\mathbf{R}(\mathbf{l})-\mathbf{R}(\mathbf{m})|^2}\,(\mathbf{R}(\mathbf{l})-\mathbf{R}(\mathbf{m}))\,.$$

Ezt az erőkifejezést összevetve az általános (25.6) képlettel, leolvashatjuk, hogy $\mathbf{l} \neq \mathbf{m}$ esetén

$$B_{\xi\eta}(\mathbf{l},\mathbf{m}) = -f^{|\mathbf{l}-\mathbf{m}|}\,\frac{(\mathbf{R}(\mathbf{l})-\mathbf{R}(\mathbf{m}))_\xi}{|\mathbf{R}(\mathbf{l})-\mathbf{R}(\mathbf{m})|}\cdot\frac{(\mathbf{R}(\mathbf{l})-\mathbf{R}(\mathbf{m}))_\eta}{|\mathbf{R}(\mathbf{l})-\mathbf{R}(\mathbf{m})|}\,. \qquad (19.28.2)$$

Mivel az összes atom egyenlő M tömegű, ezért a (25.11)-gyel definiált D-mátrix (28.2)-nek M-ed része lesz. Láthatjuk, hogy a D mátrix valóban (27.9)-nek megfelelően csak $\mathbf{l}-\mathbf{m}$-től függ. Írhatjuk tehát, hogy

$$D_{\xi\eta}(\mathbf{q}) = -\frac{f^{|\mathbf{q}|}}{M}\cdot\frac{R_\xi(\mathbf{q})}{|\mathbf{R}(\mathbf{q})|}\,\frac{R_\eta(\mathbf{q})}{|\mathbf{R}(\mathbf{q})|}\,. \qquad (19.28.3)$$

Ez az eredmény $\mathbf{l} = \mathbf{m}$ esetére, azaz $\mathbf{q} = 0$-ra nem vonatkozik. A $\mathbf{q} = 0$-hoz tartozó D-mátrix megállapítása céljából gondolatban mozdítsuk el a kristály valamennyi atomját az egyensúlyi helyzetből $\mathbf{x} = (x_x, x_y, x_z)$-vel. Nyilvánvaló, hogy egy ilyen elmozdítás az egész kristálynak mint merev testnek tranzlációját je-

lenti, ilyen esetben az atomokra semmiféle erő nem fog hatni. A (25.6) általános erőkifejezésbe az atomoktól független **x** eltolást írva, kapjuk, hogy az **l**-edik atomra ható erő

$$-\sum_{\mathbf{m}}\sum_{\eta=x,y,z} B_{\xi\eta}(\mathbf{l},\mathbf{m})x_\eta = 0\,.$$

Mivel ez tetszőleges **x**-re igaz, ezért fennáll, hogy

$$\sum_{\mathbf{m}} B_{\xi\eta}(\mathbf{l},\mathbf{m}) = 0\,.$$

Vagyis

$$B_{\xi\eta}(\mathbf{l},\mathbf{l}) = -\sum_{\mathbf{m}\neq\mathbf{l}} B_{\xi\eta}(\mathbf{l},\mathbf{m})\,. \tag{19.28.4}$$

A jobboldalon már olyan B koefficiensek lépnek fel, melyekre $\mathbf{l} \neq \mathbf{m}$, tehát kifejezésüket (28.2) adja meg. Ha (28.4)-et elosztjuk M-mel és tekintetbe vesszük, hogy a $D = B/M$ mátrix csak $\mathbf{l} - \mathbf{m}$-től függ, úgy a következő eredményt kapjuk

$$D_{\xi\eta}(0) = -\sum_{\mathbf{q}\neq 0} D_{\xi\eta}(\mathbf{q})\,. \tag{19.28.5}$$

Ezzel a D-mátrixot teljes mértékben meghatároztuk, mert a $\mathbf{q} = 0$-hoz tartozó D-mátrixot ki tudtuk fejezni a $\mathbf{q} \neq 0$-nak megfelelő D-mátrixokkal, ez utóbbiakat pedig már (28.3) alatt megadtuk.

A számítás következő lépése a (27.13) $D(\mathbf{k})$ mátrix meghatározása. Ha (27.13)-ban a **q** szerinti összegezésnél először felírjuk a $\mathbf{q} = 0$-hoz tartozó tagot, majd pedig összegezünk $\mathbf{q} \neq 0$-ra, akkor (28.5) alapján kapjuk, hogy

$$D_{\xi\eta}(\mathbf{k}) = -\sum_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} D_{\xi\eta}(\mathbf{q})\,(1 - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}(\mathbf{q})})\,. \tag{19.28.6}$$

Ha most behelyettesítjük a D-mátrix (28.3) konkrét kifejezését és tekintetbe vesszük, hogy az egyszerű köbös rács esetében

$$\mathbf{R}(\mathbf{q}) = a\mathbf{q}\,, \tag{19.28.7}$$

ahol a a rácsállandó, úgy a következő eredményre jutunk:

$$D_{\xi\eta}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}\neq 0} \frac{f^{|\mathbf{q}|}}{M}\frac{q_\xi q_\eta}{q^2}(1 - e^{-ia\mathbf{k}\mathbf{q}}). \tag{19.28.8}$$

A rácsfrekvenciák meghatározása céljából ezt a D kifejezést kell (27.15)-be helyettesítenünk és az így kapott egyenletből ω^2-et kiszámítani. Az egyszerűség kedvéért a számításokat csak az ún. másodszomszéd közelítésben fogjuk keresztülvinni. Ez azt jelenti, hogy az $f^{|\mathbf{q}|}$ erőállandót csak két olyan atom esetén tekintjük zérustól különbözőnek, melyek közti távolság vagy az elemi cella élhosszának, vagy a lap átlójának felel meg. Az első esetben $|\mathbf{q}| = 1$ és ekkor az erőállandót f-fel jelöljük, a második esetben $|\mathbf{q}| = \sqrt{2}$ és ekkor az erőállandó jele legyen f' (43. ábra). Ebben az esetben a (28.8)-ban szereplő **q**-szerinti összeg csak 12 tagra terjed ki és a képlet könnyen kiértékelhető. A diagonális ($\xi = \eta$) elemek

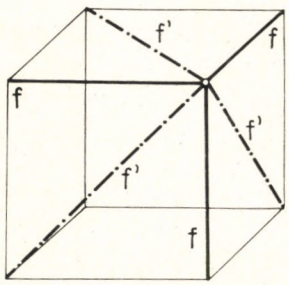
közül csak egyet írunk fel:

$$D_{xx}(\mathbf{k}) = \frac{4f}{M}\sin^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + \frac{2f'}{M}\{2 - \cos k_x a(\cos k_y a + \cos k_z a)\}, \quad (19.28.9)$$

a másik kettő az x, y, z indexek ciklikus felcserélésével kapható meg. A $\xi \neq \eta$ elemek pedig

$$D_{xy} = \frac{2f'}{M}\sin k_x a \sin k_y a \quad (19.28.10)$$

alakúak, itt is a másik kettő az indexek periodikus felcserélésével adódik. Érdekes,



43. ábra. A másodszomszéd közelítésben csak az f és f' erőállandókat vesszük tekintetbe

hogy $\xi \neq \eta$ esetén a legközelebbi szomszédok járuléka kiesik és $D_{\xi\eta}$ kifejezésében csak az f' erőállandó lép fel.

D ismeretében már könnyen kiszámíthatjuk az egyes $\mathbf{k}$ hullámszámokhoz tartozó rácsfrekvenciákat. Csak néhány érdekes példára szorítkozunk. Legyen először $\mathbf{k}$ az egyik, pl. az x iránynak megfelelő kristálytani tengely irányába mutató vektor, azaz

$$\mathbf{k} = (k, 0, 0). \quad (19.28.11)$$

Ekkor a (28.9) és (28.10) képletek alapján megállapított D-mátrix a következő szerkezetű lesz:

$$D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{pmatrix}, \quad (19.28.12)$$

ahol

$$\alpha = \frac{4}{M}(f + 2f')\sin^2\frac{ka}{2},$$

$$\beta = \frac{4}{M}f'\sin^2\frac{ka}{2}. \quad (19.28.13)$$

Ezen D-mátrix esetén a (24.14) és (27.15) egyenletek triviális egyszerűséggel meg-

oldhatók. ω^2-re egy egyszeres gyök és egy kétszeres gyök adódik; az első éppen α-val, a második pedig β-val egyezik meg. A három rácsfrekvencia tehát a következő lesz:

$$\nu_1 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\alpha} = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{f+2f'}{M}}\sin\frac{ka}{2},$$

$$\nu_2 = \nu_3 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\beta} = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{f'}{M}}\sin\frac{ka}{2}. \tag{19.28.14}$$

Az első gyök esetén a (27.14) egyenletek megoldása:

$$Y_\xi = (1,\ 0,\ 0). \tag{19.28.15}$$

Ez az amplitúdó-vektor párhuzamos a (28.11) hullámszámvektorral, ezért longitudinális rácsrezgésnek nevezzük. A másik két gyök esetén a következő amplitúdóvektorok adódnak:

$$Y_\xi = (0,\ 1,\ 0),$$
$$Y_\xi = (0,\ 0,\ 1). \tag{19.28.16}$$

Ezek pedig merőlegesek **k**-ra, tehát tranzverzális rezgéseket jelentenek.

Második példaként az elemi cella lapátlójának megfelelő irányú **k** vektor esetét tárgyaljuk, azaz, ha

$$\mathbf{k} = (k, 0, k). \tag{19.28.17}$$

Ekkor (28.9) és (28.10) a következő D-mátrixot szolgáltatják:

$$D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & \gamma \\ 0 & \beta & 0 \\ \gamma & 0 & \alpha \end{pmatrix}, \tag{19.28.18}$$

ahol most

$$\alpha = \frac{4}{M}(f+f')\sin^2\frac{ka}{2} + \frac{2f'}{M}\sin^2 ka,$$

$$\beta = \frac{8f'}{M}\sin^2\frac{ka}{2}, \tag{19.28.19}$$

$$\gamma = \frac{2f'}{M}\sin^2 ka.$$

Ezen D-mátrix esetében megoldva a (27.15)-ből adódó harmadfokú egyenletet,

a következő rácsfrekvenciákat kapjuk

$$\nu_1 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\alpha+\gamma}\,,$$

$$\nu_2 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\alpha-\gamma}, \tag{19.28.20}$$

$$\nu_3 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\beta}\,.$$

A hozzájuk tartozó Y_ξ amplitúdók rendre a következők lesznek:

$$\begin{aligned} Y_\xi &= (1,\ 0,\ 1),\\ Y_\xi &= (1,\ 0,\ -1),\\ Y_\xi &= (0,\ 1,\ 0). \end{aligned} \tag{19.28.21}$$

A ν_1 frekvenciához tartozó Y_ξ amplitúdó-vektor párhuzamos a (28.17) alatti **k**-val, tehát ez egy longitudinális rezgést jelent, a másik két amplitúdó-vektor merőleges **k**-ra, ezek tehát tranzverzális rezgéseket írnak le.

Végül vizsgáljuk meg az elemi cella testátlójának irányába mutató **k** vektor esetét.

$$\mathbf{k} = (k,\ k,\ k). \tag{19.28.22}$$

Ekkor a D-mátrix a következő lesz:

$$D = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \beta \\ \beta & \alpha & \beta \\ \beta & \beta & \alpha \end{pmatrix}, \tag{19.28.23}$$

ahol most α és β a következő kifejezéseket jelölik:

$$\alpha = \frac{4f}{M}\sin^2\frac{ka}{2} + \frac{4f'}{M}\sin^2 ka\,,$$

$$\beta = \frac{2f'}{M}\sin^2 ka. \tag{19.28.24}$$

Az ω^2-re vonatkozó harmadfokú egyenletnek most ismét egy egyszeres és egy kétszeres gyöke lesz. A rácsfrekvenciák:

$$\nu_1 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\alpha+2\beta}\,,$$

$$\nu_2 = \nu_3 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\alpha-\beta}\,. \tag{19.28.25}$$

A megfelelő amplitúdó-vektorok rendre a következők:

$$Y_\xi = (1, \quad 1, \quad 1),$$
$$Y_\xi = (1, \quad -1, \quad 0), \tag{19.28.26}$$
$$Y_\xi = (1, \quad 0, \quad -1).$$

A ν_1 frekvenciánál az Y_ξ amplitúdó ismét párhuzamos, ν_2 és ν_3 esetében pedig merőleges **k**-ra. Tehát ismét egy longitudinális és két tranzverzális rezgést kaptunk.

Végül foglalkozzunk az egyszerű köbös rács rezgéseivel igen kis hullámszám-vektorok, tehát $\mathbf{k} \to 0$ esetében. A könnyebb tárgyalásmód kedvéért egy újabb egyszerűsítést vezetünk be, nevezetesen feltételezzük, hogy az f és f' erőállandók egyenlők. $f = f'$ és $\mathbf{k} \to 0$ esetén a (28.9) és (28.10) képletekkel adott D-mátrix a következőképpen fog alakulni:

$$D_{\xi\eta}(\mathbf{k}) = \frac{fa^2}{M}(k^2\delta_{\xi\eta} + 2k_\xi k_\eta), \tag{19.28.27}$$

ahol $\delta_{\xi\eta}$ a *Kronecker*-féle δ-szimbólum. Ha ezt a D-mátrixot behelyettesítjük a rácsrezgéseket leíró (27.14) alapvető egyenletekbe, akkor kapjuk:

$$\frac{fa^2}{M}(k^2 Y_\xi + 2k_\xi \sum_{\eta=x,y,z} k_\eta Y_\eta) = \omega^2 Y_\xi. \qquad (\xi = x, y, z) \tag{19.28.28}$$

Longitudinális rezgések esetén az Y_ξ amplitúdó-vektor párhuzamos lesz a hullámszám-vektorral, azaz $Y_\xi = \beta k_\xi$, ahol β egy tetszőleges állandó. Ezt beírva (28.28)-ba, láthatjuk, hogy az egyenlet valóban kielégül, ha

$$\omega^2 = \frac{3fa^2}{M}k^2. \tag{19.28.29}$$

Ebből a longitudinális rácsrezgések frekvenciájára a

$$\nu_l = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{3fa^2}{M}}\,k \tag{19.28.30}$$

érték adódik. A frekvencia arányos a k hullámszámmal és ezért fordítva arányos a

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$

hullámhosszal. A rezgés tehát akusztikus rezgés lesz, a hang terjedési sebessége

$$c_l = \lambda\nu_l = \frac{2\pi}{k}\nu_l = \sqrt{\frac{3fa^2}{M}}. \tag{19.28.31}$$

Most vizsgáljuk meg a tranzverzális rezgéseket. Ekkor az amplitúdó és a hullámszám-vektorok merőlegesek egymásra, ezért a (28.28)-ban fellépő η-szerinti

összeg, ami tulajdonképpen az amplitúdó- és a hullámszám-vektorok skaláris szorzata, zérus lesz:

$$\sum_{\eta=x,y,z} k_\eta Y_\eta = 0 .$$

Ekkor (28.28)-nak szintén van a triviálistól különböző megoldása, a körfrekvenciára pedig kapjuk, hogy

$$\omega^2 = \frac{fa^2}{M} k^2 . \tag{19.28.32}$$

A tranzverzális hullámok frekvenciájára ebből

$$\nu_t = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{fa^2}{M}}\, k \tag{19.28.33}$$

adódik. Ez szintén arányos k-val, tehát ismét akusztikus rezgés. A tranzverzális hullámok terjedési sebessége

$$c_t = \frac{2\pi}{k} \nu_t = \sqrt{\frac{fa^2}{M}} \tag{19.28.34}$$

lesz.

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy az egyszerű köbös rácsnak csak akusztikus rezgései vannak. Ez megfelel az előző §-ban mondottaknak, mely szerint minden rácsnak van három akusztikus rezgéstípusa. Egyszerű köbös rács esetén más rezgéstípus nem is lehet, mert itt $r = 1$ és az összes rezgéstípusok száma, amint az előző §-ban láttuk, $3r$-rel egyenlő. A longitudinális rezgés frekvenciáját (28.30) adja meg, a két tranzverzális rezgéstípus frekvenciája egyenlő egymással, közös értékük a (28.33) alatti kifejezéssel egyenlő.

Végül még határozzuk meg az egyszerű köbös rács frekvenciaeloszlási függvényét a *Debye*-féle közelítésben, amikor is a diszperziós összefüggéseket az igen kis **k**-ra vonatkozó (28.30) és (28.33) képletekkel azonosítjuk. A frekvenciaeloszlást a (27.31) formula alapján fogjuk kiszámítani. A diszperziós összefüggéseket összefoglalóan

$$\nu_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{c_\sigma}{2\pi} k \tag{19.28.35}$$

alakban írhatjuk, ahol most a σ index a longitudinális és a két tranzverzális rezgésre utal, c_σ pedig a rezgés terjedési sebessége, melyet (28.31), ill. (28.34) ad meg. (28.35-)ből kapjuk egyrészt, hogy

$$|\operatorname{grad}_{\mathbf{k}} \nu_\sigma(\mathbf{k})| = \frac{c_\sigma}{2\pi} , \tag{19.28.36}$$

másrészt láthatjuk, hogy a konstans frekvenciaértékhez tartozó felületek a **k** vektorok terében koncentrikus gömbök lesznek, hiszen $\nu_\sigma(\mathbf{k})$ csak **k** abszolút értékétől, k-tól függ. Ezért esetünkben a (27.31)-ben a ds-re vonatkozó integrál egy k sugarú gömb felszínére vonatkozik, és mivel az integrandus (28.36) szerint egy

konstans szám lesz, ezért a ds szerinti integrálás egyszerűen a gömb $4\pi k^2$ felszínét fogja eredményül adni. Végeredményben kapjuk, hogy

$$Z_\sigma(\nu) = \frac{NV_a}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{c_\sigma} 4\pi k^2 = Na^3 \frac{4\pi\nu^2}{c_\sigma^3}, \tag{19.28.37}$$

ahol figyelembe vettük, hogy az egyszerű köbös rács elemi cellájának térfogata: $V_a = a^3$.

Ha ezt összegezzük σ három lehetséges értékére, úgy megkapjuk a teljes frekvenciaeloszlást:

$$Z(\nu) = Na^3 \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right) 4\pi\nu^2. \tag{19.28.38}$$

Természetesen ez a formula csak egy bizonyos ν_D határfrekvenciáig lehet érvényes, mert $Z(\nu)$ ki kell, hogy elégítse a (25.11) normálási feltételt. Mivel az egyszerű köbös rácsnál $f = 3N$, ezért (25.11)-ből a következő feltétel adódik:

$$\int_0^{\nu_D} Z(\nu) d\nu = Na^3 \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right) \frac{4\pi\nu_D^3}{3} = 3N.$$

Ebből a *Debye*-féle határfrekvencia értékére a következő egyenlet adódik:

$$\frac{1}{\nu_D^3} = \frac{4\pi a^3}{9} \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{1}{c_t^3} \right). \tag{19.28.39}$$

Ha ide beírjuk c_l és c_t kifejezéseit, úgy az

$$\frac{1}{\nu_D^3} = \frac{4\pi}{9} \left(\frac{1}{3^{3/2}} + 2 \right) \left(\frac{M}{f} \right)^{3/2}$$

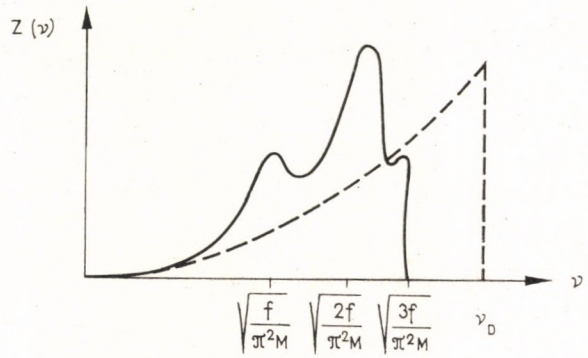
eredményt kapjuk, amiből

$$\nu_D = 0{,}68 \sqrt{\frac{f}{M}}. \tag{19.28.40}$$

(28.39)-et (28.38)-ba téve a frekvenciaeloszlási függvény a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} Z(\nu) &= \frac{9N\nu^2}{\nu_D^3}, \quad \text{ha} \quad \nu \leq \nu_D, \\ Z(\nu) &= 0, \qquad \text{ha} \quad \nu > \nu_D. \end{aligned} \tag{19.28.41}$$

Ezt a frekvenciaeloszlást láthatjuk a 44. ábrán szaggatott vonallal feltüntetve. Összehasonlításképpen felrajzoltuk a pontos (28.9) és (28.10) formulákból kapott diszperziós görbe alapján levezetett frekvenciaspektrumot is.



44. ábra. A *Debye*-féle frekvenciaeloszlás összehasonlítása az egzakttal

29. §. Gázok diffúziója

Legyen adva valamilyen zárt edényben egy tetszőleges, egyensúlyban levő gáz. Ez a gáz, miután egyensúlyban van, egyenletes sűrűséggel kitölti az egész rendelkezésre álló teret és atomjai, ill. molekulái rendezetlenül minden irányban és különböző sebességgel, közben-közben egymással, ill. a fallal ütközve mozognak úgy, hogy átlagsebességük, $\bar{v}$ a T abszolút hőmérsékletnek megfelelő

$$\frac{1}{2} m\bar{v}^2 = \frac{3}{2} kT$$

érték lesz.

Jusson most ebbe a zárt rendszerbe valami ilyen idegen gáz, pl. úgy, hogy az edény fala párolog. Ez az idegen gáz tehát kezdetben az edény fala mentén található csak, idővel azonban hőmozgásuk következtében az idegen gáz molekulái egyre jobban eltávolodnak a falaktól és a rendelkezésre álló tér minden részébe eljutnak, miközben természetesen ütköznek az eredeti gáz molekuláival is. Az idegen gáz sűrűsége ily módon helyről helyre és időről időre változni fog.

Ezen sűrűségváltozás az idegen gáz molekuláinak áramlásával – *diffúziójával* – jár együtt, ill. megfordítva, ha egy gázban a sűrűség helyről helyre változik, ez a gázban diffúziót hoz létre. Ezt könnyen beláthatjuk, hiszen, ha a gáz sűrűsége egyenletes, akkor bárhol kiszemelve a gáz belsejében egy tetszőleges felületet, az azon adott idő alatt keresztülhaladó molekulák száma egyik irányból ugyanannyi, mint a másik irányból. Ha azonban a felület egyik oldalán kisebb a gáz sűrűsége, mint a felület másik oldalán, akkor a nagyobb sűrűségű oldalról több molekula fog áthaladni az adott idő alatt, mint a kisebb sűrűségű oldalról, tehát áramlást tapasztalunk. Ez az áramlás arányos lesz a gáz n sűrűségének egységnyi úton mért változásával és iránya a sűrűség csökkenésének irányába mutat:

$$\mathbf{I} = -D \operatorname{grad} n . \qquad (19.29.1)$$

Az arányossági tényezőt, D-t, *diffúziós állandó*nak nevezzük. A diffúziós állandó értéke a fent vázolt folyamat részletesebb vizsgálatából meghatározható. Mielőtt erre rátérnénk, foglalkozzunk kissé a diffúziós folyamatban lényeges szerepet játszó rugalmas ütközésekkel.

Legyen az ütköző két részecske tömege m_1, ill. m_2, sebességük az ütközés előtt $\mathbf{v}_1$ és $\mathbf{v}_2$, az ütközés után $\mathbf{v}_1'$ és $\mathbf{v}_2'$. Az ütközés folyamán teljesülnie kell az impulzus megmaradás és – miután rugalmas ütközésről van szó – a kinetikus energia megmaradás feltételének, tehát

$$\begin{aligned} m_1\mathbf{v}_1 + m_2\mathbf{v}_2 &= m_1\mathbf{v}_1' + m_2\mathbf{v}_2', \\ \frac{1}{2}m_1\mathbf{v}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\mathbf{v}_2'^2 &= \frac{1}{2}m_1\mathbf{v}_1'^2 + \frac{1}{2}m_2\mathbf{v}_2'^2. \end{aligned} \tag{19.29.2}$$

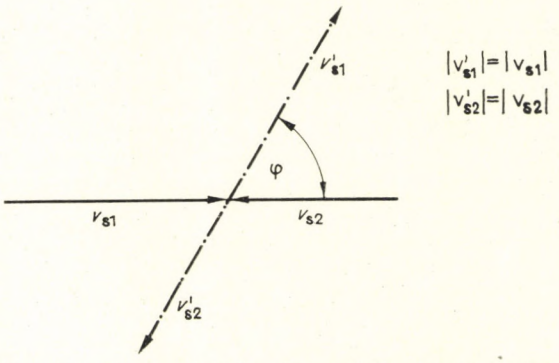
(29.2) két egyenletéből $\mathbf{v}_1'$ és $\mathbf{v}_2'$ meghatározható. A számítás lényegesen egyszerűsödik, ha az L laboratóriumi koordinátarendszerről áttérünk az S súlyponti koordinátarendszerre. Miután a súlypont $\mathbf{v}_S$ sebessége L-ben

$$\mathbf{v}_S = \frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{v}_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2}\mathbf{v}_2, \tag{19.29.3}$$

az eredményt könnyen visszatranszformálhatjuk a laboratóriumi rendszerbe úgy, hogy a szóródás utáni S-beli sebességekhez hozzáadjuk $\mathbf{v}_S$-t.

A súlyponti koordinátarendszerben az eredő impulzus szórás előtt (és természetesen szórás után is) zérus. Ezt és a kinetikus energia megmaradását felhasználva azt kapjuk, hogy S-ben a szóródás folyamán a szóródó részek sebességének abszolút értéke nem változik, csak a sebességek iránya, de az is csak úgy, hogy a két részecske sebessége továbbra is 180°-os szöget zár be (hogy az eredő impulzus zérus maradjon). A súlyponti koordinátarendszerben a lehetséges szóródásokat tehát a ϕ szög jellemzi (l. a 45. ábrát).

Érdekes a lehetséges két határeset: ha $\phi = 0$, az ütközéskor semmi sem történt, a két részecske eredeti sebességével folytatja útját az S rendszerben és L-ben is. Ha $\phi = 180°$, akkor okozza az ütközés a legnagyobb változást a részecskék moz-



45. ábra. Rugalmas szóródás súlyponti koordinátarendszerben

gásában: $\mathbf{v}'_{S1} = -\mathbf{v}_{S1}$, $\mathbf{v}'_{S2} = -\mathbf{v}_{S2}$, a részecskék „visszapattannak" egymásról. Visszatérve a laboratóriumi koordinátarendszerre, tehát ekkor a részecskék sebessége a szóródás után:

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}'_{S1} + \mathbf{v}_S = -(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_S) + \mathbf{v}_S = -\mathbf{v}_1 + 2\mathbf{v}_S, \quad \mathbf{v}'_2 = -\mathbf{v}_2 + 2\mathbf{v}_S,$$

tehát

$$\mathbf{v}'_1 = -\frac{m_2 - m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{v}_1 + 2\frac{m_2}{m_1+m_2}\mathbf{v}_2$$

és (19.29.4)

$$\mathbf{v}'_2 = 2\frac{m_1}{m_1+m_2}\mathbf{v}_1 + \frac{m_2 - m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{v}_2 .$$

Áttekinthetőbbé válik az eredmény, ha feltételezzük, hogy az egyik részecske szóródás előtt nyugalomban volt, $v_2 = 0$. Ebben az esetben az 1 részecske szóródáskor a saját addigi haladási irányában meglöki a 2 részecskét, maga pedig valamivel kisebb sebességgel visszalökődik. Felírhatjuk az 1 részecske által a 2 részecskének átadott $\Delta E_k/E_{k1}$ relatív kinetikus energiát:

$$\frac{\Delta E_k}{E_{k1}} = \frac{\frac{1}{2}m_1 v_1'^2 - \frac{1}{2}m_1 v_1^2}{\frac{1}{2}m_1 v_1^2} = \left(\frac{m_2 - m_1}{m_1 + m_2}\right)^2 - 1 = -(1 - r). \qquad (19.29.5)$$

Bevezettük az $r = \left(\frac{m_2 - m_1}{m_1 + m_2}\right)^2$ rövidítő jelölést. r értéke $0 \leq r \leq 1$ értékeket vesz fel aszerint, hogy a két részecske relatív tömege mekkora. Ha a két részecske egyforma tömegű, $r = 0$ és az 1 részecske lefékeződve teljes kinetikus energiáját átadja a korábban nyugalomban volt 2 részecskének. Ha a nyugalomban levő 2 részecske tömege igen nagy, $m_2 \gg m_1$, akkor $r \to 1$, az 1 részecske kinetikus energiáját megtartva „visszapattan" a nagytömegű, nyugalomban maradó 2 részecskéről.

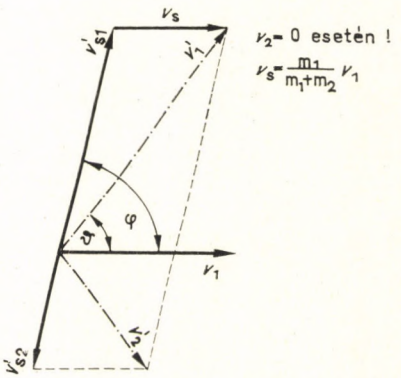
Végül vizsgáljuk meg, hogy a súlyponti rendszerben egy tetszőleges ϕ szöggel jellemezhető szóródásnak mi felel meg a laboratóriumi rendszerben. Az áttekinthetőség kedvéért ismét feltételezzük, hogy a 2 részecske a szóródás előtt nyugalomban van, $v_2 = 0$. Ekkor az 1 részecske sebessége szóródás után

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}'_{S1} + \mathbf{v}_S, \quad \text{ahol } |\mathbf{v}'_{S1}| = |\mathbf{v}_{S1}| = \frac{m_2}{m_1 + m_2}|\mathbf{v}_1|,$$

$$\mathbf{v}_S = \frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{v}_1$$

és $\mathbf{v}'_{S1}$ ϕ szöget zár be $\mathbf{v}_S$ irányával (l. a 46. ábrát). Ebből

$$v_1'^2 = \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right)^2 v_1^2 + \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right)^2 v_1^2 - 2\frac{m_2}{m_1 + m_2}\frac{m_1}{m_1 + m_2}v_1^2 \cos(180° - \phi)\cdot$$



46. ábra. Rugalmas szóródás eredményeinek áttranszformálása súlyponti koordinátarendszerből laboratóriumi koordinátarendszerbe

tehát az 1 részecske által átadott relatív kinetikus energia

$$\frac{\Delta E_k}{E_{k1}} = \left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2 + \left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2 + 2\frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{m_1}{m_1+m_2}\cos\phi - 1 =$$

$$= \frac{1+r}{1} - 1 + \frac{1-r}{2}\cos\phi,$$

$$\frac{\Delta E_k}{E_{k1}} = -\frac{1-r}{2}(1-\cos\phi). \tag{19.29.6}$$

Az 1 részecske ϑ szóródási szögére pedig azt kapjuk, hogy

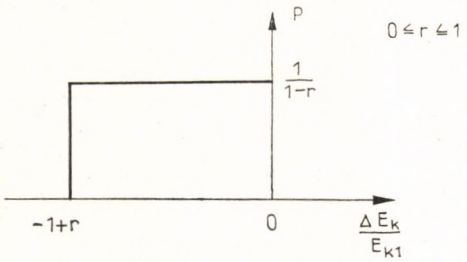
$$\cos\vartheta = \frac{m_1 + m_2\cos\phi}{\sqrt{m_1^2 + m_2^2 + 2m_1m_2\cos\phi}}. \tag{19.29.7}$$

A kapott eredményből látható, hogy valóban $\phi = 180°$ esetén lesz maximális a kinetikus energiaátadás és ekkor $\vartheta = 0$ vagy $180°$. Meghatározhatjuk az átlagos kinetikus energiaátadás értékét is. Ehhez tudnunk kell, hogy mi a valószínűsége az egyes ütközéseknek. Súlyponti koordinátarendszerben az eloszlás gömbszimmetrikus, tehát valamennyi $\cos\phi$ érték egyformán valószínű, $\overline{\cos\phi} = 0$. A laboratóriumi koordinátarendszerben viszont

$$\overline{\cos\vartheta} = \frac{1}{4\pi}\oint \cos\vartheta\, d\Omega = \frac{2}{3}\frac{m_1}{m_2}, \tag{19.29.8}$$

tehát a szóródás szögeloszlása csak akkor lesz közel izotrop, ha m_2 sokkal nagyobb, mint m_1.

Figyelembe véve, hogy $\overline{\cos\phi} = 0$, az átadott relatív kinetikus energia értéke egyforma P valószínűséggel lehet bármelyik érték a két lehetséges szélső érték, 0 és $-1+r$ között (l. a (29.6) egyenletet és a 71. ábrát). Az átlagos kinetikus



47. ábra. Az átadott relatív kinetikus energia valószínűsége állandó a lehetséges $(-1 + r)$-től 0-ig terjedő tartományban

energiaátadás pedig

$$\frac{\overline{\Delta E_k}}{E_{k1}} = -\frac{1-r}{2}. \tag{19.29.9}$$

Az előbbiekben azt vizsgáltuk, hogy mi történik két részecske rugalmas ütközésekor. Következő lépésként azt akarjuk meghatározni, hogy egy egyensúlyban levő gázban milyen gyakran ütközik egy molekula. Az ütközések nyilvánvalóan véletlenszerűen következnek be. Így, ha egy igen hosszú t időtartamot választunk, ami alatt a kiszemelt molekula sokszor, N esetben, ütközött, akkor igaz lesz az, hogy $2t$ idő alatt $2N$ ütközés bekövetkezése várható, tehát, hogy

$$N = \frac{t}{\tau}, \tag{19.29.10}$$

ahol τ két egymás utáni ütközés közti átlagos idő. Ha már most nem egy kiszemelt molekulát figyelünk hosszú ideig, hanem egy N molekulából álló gázban akarjuk meghatározni, hogy egy kis dt időtartam alatt hány molekula ütközött, akkor figyelembe véve, hogy a gáz egyensúlyi helyzetben van, ugyanolyan valószínűséggel fog egy kiszemelt molekula Ndt idő alatt ütközni, mint N molekula a dt idő alatt, tehát $N\frac{dt}{\tau}$ lesz a várható ütközések száma.

Ezen megfontolások után határozzuk meg, hogy mi a $P(t)$ valószínűsége annak, hogy egy molekula t ideig *nem* ütközik. Legyen $N(t)$ azoknak a molekuláknak a száma, melyek N_0 számú molekulát tartalmazó gázban már t idő óta nem ütköztek. Akkor ezek közül további dt idő alatt $N(t)\frac{dt}{\tau}$ számú molekula fog ütközni, tehát a $t + dt$ időpontban a még mindig nem ütközött molekulák száma

$$N(t + dt) = N(t) - N(t)\frac{dt}{\tau}. \tag{19.29.11}$$

$N(t + dt)$-t sorba fejtve és átrendezve, a következő differenciálegyenletrejutunk:

$$\frac{dN(t)}{N(t)} = -\frac{dt}{\tau}, \tag{19.29.12}$$

aminek megoldása

$$N(t) = N_0 e^{-t/\tau}. \tag{19.29.13}$$

Az integrációs konstans ugyanis meg kell, hogy egyezzék a $t = 0$ idő alatt nem ütköző molekulák számával, azaz a gázban levő összes molekula N_0 számával. A keresett $P(t)$ valószínűséget megkapjuk, ha a t idő alatt nem ütközött molekulák számát elosztjuk a gáz összes molekuláinak számával, azaz

$$P(t) = \frac{N(t)}{N_0} = e^{-\frac{t}{\tau}}. \tag{19.29.14}$$

Azt kaptuk tehát, hogy annak a valószínűsége, hogy egy egyensúlyi állapotban levő gáz egy molekulája t ideig ne ütközzön, az időtartammal exponenciálisan csökken. Két ütközés közti τ átlagos idő alatt csökken a valószínűség éppen e-ed részére.

Megvizsgálhatjuk azt is, hogy átlagosan milyen távolságot tesz meg a gáz egy molekulája két ütközés között. Ezt a λ *átlagos szabad úthossz*at felírhatjuk a molekulák v átlagsebességének és τ-nak ismeretében:

$$\lambda = \tau v. \tag{19.29.15}$$

Az előbbi okoskodás mintájára annak $P(x)$ valószínűsége, hogy x út megtétele közben a molekula nem ütközik,

$$P(x) = e^{-x/\lambda}. \tag{19.29.16}$$

A λ átlagos szabad úthossz függ a gáz sűrűségétől, és a molekulák σ ütközési hatáskeresztmetszetétől. Ha ismét kiszemelünk egy molekulát, mely egy n_0 sűrűségű gázban mozog, akkor felírhatjuk, hogy mi a valószínűsége annak, hogy dx úthosszon ütközzön. Ez a valószínűség nyilván egyenesen arányos a gáz sűrűségével és az úthosszal ($P(x)$ annak a valószínűségét jelentette, hogy a molekula *ne ütközzön*):

$$1 - P(dx) = \sigma n_0 dx,$$

ahol σ a gázmolekulákra jellemző *ütközési hatáskeresztmetszet*. Ha a mozgó molekula irányára merőleges egységnyi alapterületű, dx magasságú hasábot jelölünk ki a gázban, akkor ennek belsejében $n_0 dx$ gázmolekula lesz. A σ hatáskeresztmetszetnek így szemléletesen geometriai jelentést adhatunk: σ felületet tulajdonítva az egyes gázmolekulának a dx hasábon belül $\sigma n_0 dx$ felület lesz az egységnyi felületből letakarva a mozgó molekula számára. Ütközés akkor következik be, ha a mozgó molekula középpontja ilyen „lefedett területen" haladna át (l. a 292. ábrát).

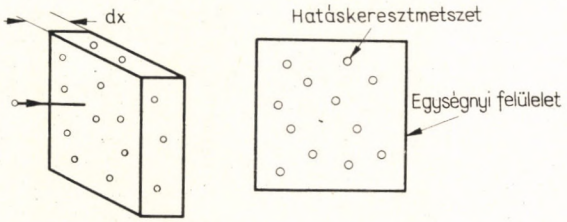
Ha a hatáskeresztmetszet segítségével (29.17) alatt felírt ütközési valószínűséget összehasonlítjuk a (29.16)-ból kis dx úthosszra sorfejtéssel kapható valószínűséggel, akkor megkapjuk az átlagos szabad úthossz és a hatáskeresztmetszet közti összefüggést:

$$1 - \left(1 - \frac{dx}{\lambda}\right) = \sigma n_0 dx,$$

tehát

$$1 = \sigma n_0 \lambda. \qquad (19.29.18)$$

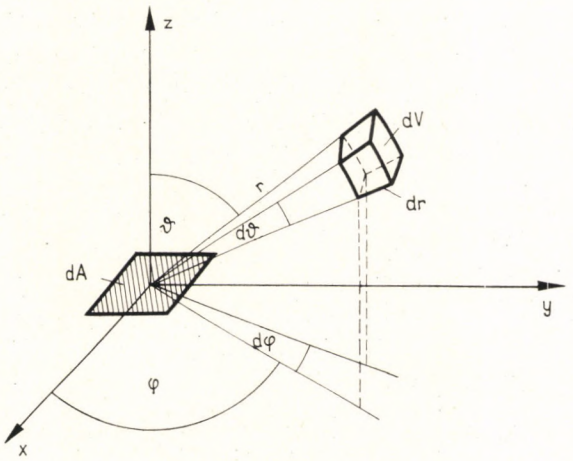
Az átlagos szabad úthossz és a hatáskeresztmetszet között kapott összefüggést igen szemléletesen értelmezhetjük. Egységnyi alapterületű és λ magasságú hasábban a gázmolekulák által „lefedett" felület, $\sigma n_0 \lambda$, tehát egységnyi, azaz a hasáb



48. ábra. Az ütközési hatáskeresztmetszet. (Simonyi K. Elektronfizika, Tankönyvkiadó, Budapest 1965.)

teljes alapterülete „le van fedve". Természetesen ez a lefedés nem egy síkban van, a gázmolekulák egymás előtt – mögött helyezkednek el, ezért lehetséges, hogy az átlagos szabad úthossznál hosszabb vagy rövidebb utat is megtehet ütközés nélkül egy molekula.

Miután így áttekintettük az ütközéssel, szóródással kapcsolatos problémákat, visszatérhetünk a diffúzió tárgyalásához. A §. elején már láttuk, hogy ha a gáz $n(x, y, z)$ sűrűsége pontról pontra változik, akkor diffúzió indul meg, amely igyekszik kiegyenlíteni a sűrűségkülönbségeket. Láttuk, hogy közben a diffundáló molekulák ütköznek az n_{sz} egyenletes sűrűségű szóró gáz molekuláin. Válasszunk ki a gázban egy a z-tengelyre merőleges dA felületelemet és számítsuk



49. ábra. A Φ fluxus megállapítása. (Simonyi K. Elektronfizika, Tankönyvkiadó, Budapest 1965.)

ki, hogy tőle r távolságban levő dV térfogatból izotrop szóródás esetén hány részecske szóródik úgy, hogy áthaladjon a dA felületen (l. a 49. ábrát). Bevezetjük a

$$\Phi(x, y, z) = vn(x, y, z) \tag{19.29.19}$$

részecskefluxust, az egységnyi keresztmetszeten időegység alatt áthaladó részecskék számát, ahol v a diffundáló molekulák átlagsebessége. Egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy mindegyik molekula sebessége ekkora. A (29.17) formula megadja annak a valószínűségét, hogy egyetlen molekula dx úthosszon ütközzön. Ennek alapján annak a valószínűsége, hogy $\Phi(x, y, z)$ részecskefluxus esetén dV térfogatban az időegység alatt ütközés következzen be,

$$\Phi(x, y, z)\sigma n_{sz} dV.$$

Ezt a valószínűséget megszorozva a dA felület

$$\frac{dA \cos \vartheta}{4\pi r^2}$$

térszögével, valamint annak a valószínűségével, hogy az r távolságon további ütközés nem következik be (l. a (29.16) egyenletet):

$$P(r) = e^{-\frac{r}{\lambda}} = e^{-\sigma n_{sz} r},$$

akkor megkapjuk azoknak a részecskéknek a számát, amelyek a dV térfogatban szóródva keresztül mennek a dA felületen. A $+z$ térrészre dV szerint integrálva ezt a kifejezést megkapjuk az I_{-z} negatív z-tengely irányába a dA felületen átdiffundáló részecskék számát:

$$I_{-z} dA = \frac{dA}{4\pi} \sigma n_{sz} \int \Phi \frac{e^{-\sigma n_{sz} r}}{r^2} \cos \vartheta \, dV, \tag{19.29.20}$$

ahol I_{-z} a negatív z-tengely irányába, az egységnyi felületen átdiffundáló részecskék száma. A 49. ábrából leolvasható, hogy

$$x = r \sin \vartheta \cos \phi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \phi, \quad z = r \cos \vartheta$$

és

$$dV = r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\phi.$$

Ezt felhasználva és a $\Phi(x, y, z)$ fluxust sorba fejtve a koordinátarendszer középpontjának környezetében az elsőrendű tagokig

$$\Phi(x, y, z) \approx \Phi_0 + x \left(\frac{d\Phi}{dx}\right)_{x=0} + y \left(\frac{\partial \Phi}{\partial y}\right)_{y=0} + z \left(\frac{\partial \Phi}{\partial z}\right)_{z=0}, \tag{19.29.21}$$

a (29.20) integrálás elvégezhető:

$$I_{-z} = \frac{1}{4\pi}\sigma n_{sz}\Phi_0 \int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi/2} e^{-\sigma n_{sz} r}\cos\vartheta \sin\vartheta dr d\phi d\vartheta +$$

$$+ \frac{1}{4\pi}\sigma n_{sz}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right)_{z=0} \int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi/2} r e^{-\sigma n_{sz} r}\cos^2\vartheta \sin\vartheta\, dr d\phi d\vartheta =$$

$$= \frac{\Phi_0}{4} + \frac{1}{6\sigma n_{sz}}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right)_{z=0}. \qquad (19.29.22)$$

A $\frac{\partial\Phi}{\partial x}$ és $\frac{\partial\Phi}{\partial y}$ -os tagok integráláskor 0-t adtak, mivel $\cos\phi$-t, ill. $\sin\phi$-t kellett 0-tól 2π-ig integrálni. Hasonlóképpen

$$I_{+z} = \frac{\Phi_0}{4} - \frac{1}{6\sigma n_{sz}}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right)_{z=0} \qquad (19.29.23)$$

lesz a pozitív tengely irányába diffundáló részecskék száma. Az eredő $+z$ irányban haladó áramlás:

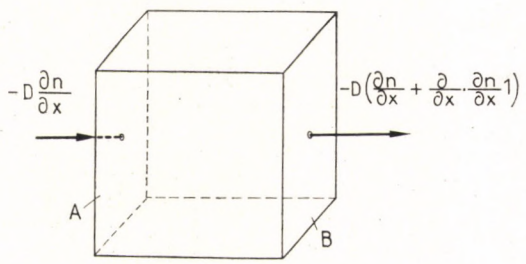
$$I_z = I_{+z} - I_{-z} = -\frac{1}{3\sigma n_{sz}}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right)_{z=0}. \qquad (19.29.24)$$

A dA felületet, azaz a z-tengely irányát tetszőlegesen vehetjük fel a gázban, ezért általánosabban írhatjuk, hogy

$$\mathbf{I} = -\frac{1}{3\sigma n_{sz}}\operatorname{grad}\Phi = -\frac{\lambda v}{3}\operatorname{grad} n. \qquad (19.29.25)$$

Összehasonlítva a (29.1) és (29.25) egyenleteket, azt kapjuk, hogy a diffúziós állandó arányos az átlagos szabad úthosszal és a részecskék átlagsebességével:

$$D = \frac{\lambda v}{3}. \qquad (19.29.26)$$



50. ábra. A diffúzióegyenlet. (Simonyi K. Elektronfizika, Tankönyvkiadó, Budapest 1965.)

Végül írjuk fel a diffúzió mozgásegyenletét. Kijelölünk a gáztérben egy egységnyi térfogatú kockát (l. 50. ábrát) és felírjuk, hogy ennek belsejében idővel hogyan változik a sűrűség. A sűrűség időbeli változásának oka az, hogy a kockába belépő és kilépő részecskék száma különböző. Egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a sűrűség, $n(x)$ csak az x-tengely mentén változik és írjuk fel az x-tengely mentén az egységnyi kockába egységnyi idő alatt belépő és kilépő részecskék számát:

$$I_{be} = -D\frac{\partial n(x)}{\partial x},$$

$$I_{ki} = -D\frac{\partial n(x+1)}{\partial x} = -D\left(\frac{\partial n(x)}{\partial x} + \frac{\partial^2 n(x)}{\partial x^2}\right). \tag{19.29.27}$$

A sűrűség megváltozása tehát

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = I_{be} - I_{ki} = D\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2}, \tag{19.29.28}$$

vagy általában

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\Delta n. \tag{19.29.29}$$

Példaként megadjuk a diffúzióegyenlet megoldását abban az egyszerű esetben, mikor a sűrűség csak az x-tengely mentén változik. Ekkor a megoldást kereshetjük a következő alakban: $n(x, t) = X(x)T(t)$. Behelyettesítve

$$\frac{1}{T}\frac{dT}{dt} = \frac{D}{X}\frac{d^2X}{dx^2} = \alpha,$$

ahol α az ún. szeparációs állandó, értékét a kezdőfeltételek szabják meg.

$$T(t) = A_1 e^{\alpha t}, \qquad X(x) = A_2 e^{\pm\sqrt{\frac{\alpha}{D}}x},$$

vagy egy másik szeparációs állandót, k-t bevezetve a következő módon:

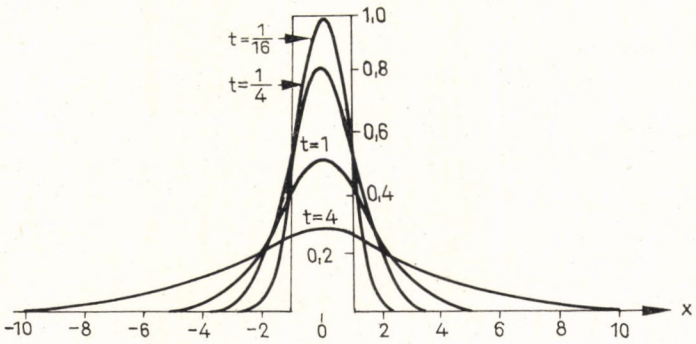
$$\alpha = -k^2 D,$$

$$n(x,t) = Ae^{-k^2Dt}e^{\pm ikx}. \tag{19.29.30}$$

Megadva a kezdőfeltételeket

$$n(x, 0) = n(x),$$

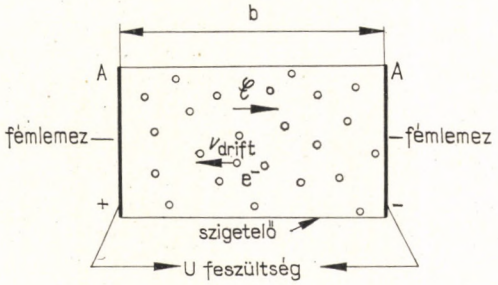
kiszámíthatjuk konkrét probléma esetén a sűrűségeloszlást különböző időpillanatokban. Az 51. ábrán bemutatjuk, hogy kezdetben vékony rétegben elhelyezkedő molekulák hogyan diffundálnak szét.



51. ábra. Vékony réteg szétdiffundálása. (Simonyi K. Elektronfizika, Tankönyvkiadó, Budapest 1965.)

30. §. Töltött részek áramlása külső erőtér hatására gázban

Vizsgáljuk meg, hogyan mozognak elektronok egy gáztérben akkor, ha elektromos erő hat rájuk. Legyen rendszerünk egy téglaalakú edénybe zárva, az edény két egymással szembeni A felületű oldala legyen fémből és erre kapcsoljuk az erőteret létrehozó U feszültséget (l. az 52. ábrát). Az $\mathfrak{E} = \frac{U}{b}$ elektromos térerősség hatására az elektron gyorsuló mozgást fog végezni a térerősséggel ellentétes irányban,



52. ábra. Töltött részek áramlása külső tér hatására

de rövidebb, hosszabb, átlagosan τ idő múlva ütközni fog valamelyik gázmolekulával, elveszíti a gyorsulás révén szerzett sebességét és az ütközés után tetszőleges kezdősebességgel „újrakezdi az életét", újból gyorsulni kezd az elektromos tér hatására. Végeredményben az ütközések okozta rendezetlen mozgásra szuperponálódik az elektronnak egy, a térrel szemben haladó mozgása, melynek sebessége

$$\mathbf{v}_{\text{drift}} = -\frac{e\mathfrak{E}}{m}\tau, \qquad (19.30.1)$$

az ún. *driftsebesség*. A driftsebesség tehát arányos az elektromos térerősséggel

$$\mathbf{v}_{\text{drift}} = -\mu \mathfrak{E} . \tag{19.30.2}$$

A μ arányossági tényezőt mozgékonyságnak nevezik. A két egyenletet összehasonlítva látjuk, hogy

$$\mu = e \frac{\tau}{m} . \tag{19.30.3}$$

Tehát a mozgékonyság egyenesen arányos a két egymásutáni ütközés közt átlagosan eltelt idővel — minél ritkábban ütközik az elektron a gázmolekulákkal, annál nagyobb a mozgékonysága és ezzel együtt a driftsebessége is. A tömeggel viszont fordítva arányos a mozgékonyság, nehezebb részecske kevésbé „mozgékony".

Meghatározhatjuk a driftmozgás közvetítette áramot is: az A felületű elektródát T idő alatt azok az elektronok érhetik el, amelyek nincsenek messzebb az elektródától, mint $v_{\text{drift}} T$. Ha n_e az elektronok sűrűsége az edényben, akkor az elektródára jutó töltések száma T idő alatt

$$A e n_e v_{\text{drift}} T ,$$

vagyis az áram

$$I = A e n_e v_{\text{drift}} . \tag{19.30.4}$$

Írjuk be ide (30.1) alapján v_{drift} értékét, a térerősség helyébe bevezetve az edényre kapcsolt U feszültséget:

$$I = \frac{e^2}{m} \tau n_e A \frac{U}{b} = e \mu n_e \frac{A}{b} U . \tag{19.30.5}$$

Az áram arányos a feszültséggel, az arányossági tényező a gáz-elektron keverék vezetőképessége:

$$\frac{1}{R} = e \mu n_e \frac{A}{b} . \tag{19.30.6}$$

A gázmolekulákkal való ütközések tehát ohmos ellenállásként jelentkeznek.

Eddigi megfontolásainkban a töltött részek elektronok voltak, tehát jóval kisebb tömegű részek, mint a gázmolekulák, melyekkel ütköznek. Így joggal feltételezhettük, hogy minden ütközéskor teljesen elvesztették driftsebességüket és „új életet kezdtek". Ha a tárgyalást ionokra is ki akarjuk terjeszteni, melyek közel azonos tömegűek a velük ütköző gázmolekulákkal, akkor minden egyes ütközéstől még nem vesztik el teljesen a tér irányába mutató impulzusukat, hanem jó néhány ütközés kell ahhoz, hogy az ion mozgása ismét „véletlenszerű" legyen. Bevezethetünk az ütközések közti átlagos idő, τ helyett egy ennél hosszabb, τ' időt, az „átlagos felejtési időt"; ezt beírva képleteinkbe, ionokra is érvényes formulákat kaphatunk.

Ha töltött részek diffúzióját vizsgáljuk – nem kapcsolunk feszültségkülönbséget az A lemezek közé – akkor összefüggést kereshetünk az ionok mozgékonysága és diffúziós állandója között. A (29.26) egyenletet elosztva a (30.3) egyenlettel és τ helyébe (29.15) alapján beírva az átlagos szabad úthosszat, kapjuk, hogy

$$\frac{D}{\mu} = \frac{1}{3} \frac{\lambda \bar{v}}{e \frac{\lambda}{m\bar{v}}} = \frac{1}{3} \frac{m\bar{v}^2}{e}, \tag{19.30.7}$$

ahol $\bar{v}$ az ionok átlagsebessége.

Felhasználva az $\frac{1}{2} m\bar{v}^2 = \frac{3}{2} kT$ egyenlőséget, felírhatjuk az ún. *Einstein*-összefüggést:

$$\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{e}. \tag{19.30.8}$$

HUSZADIK FEJEZET

STATISZTIKUS MECHANIKA

1. §. Bevezetés

Eddig az elemi korpuszkulák létezésének kimutatásával és az elemi korpuszkulák tulajdonságaival foglalkoztunk. A következőkben az elemi korpuszkulákból felépített makroszkopikus testek, úgymint a gázok és szilárd testek tulajdonságainak értelmezését keressük a korpuszkuláris elmélet alapján. Folyadékokkal a következőkben nem foglalkozunk, mert egyrészt azokról való ismereteink hiányosak, másrészt pedig a folyadékok tárgyalása eléggé bonyolult. Elsősorban a gázokkal foglalkozunk és ezekkel kapcsolatban meg fogunk ismerkedni a fizikai statisztikai módszerekkel.

2. §. A gázok korpuszkuláris szerkezete

Az ún. ideális gázt pontszerű atomok, ill. molekulák halmaza gyanánt fogjuk fel, melyek egymásra erőt nem gyakorolnak és mivel pontszerűek, egymással nem ütköznek. A gázok korpuszkuláris szerkezetének főjellemzője a teljes rendezetlenség, az atomok, ill. molekulák össze-vissza repülnek nagy sebességgel. Innen következik, hogy az ideális gáz részecskéi egyenesvonalú mozgást végeznek és a gáz minden rendelkezésre álló térfogatot kitölt. Az egyes korpuszkulák sebessége irány és nagyság szerint általában igen különböző. Ha a gáz egy zárt edényben van, akkor a gáz az edény falaira nyomást gyakorol, mégpedig azáltal, hogy a korpuszkulák az edény falába ütköznek és impulzusukat átadják az edény falának.

Az ideális gázok tulajdonságainak értelmezése a fenti feltevések alapján lehetséges, de a valódi gázokra jobb közelítést kapunk, ha az atomokat, ill. molekulákat véges kiterjedésű kis gömböknek tekintjük, amidőn már a részecskéknek egymással való ütközését is számításba kell venni.

A fizikailag mérhető mennyiségeket, mint pl. a sűrűséget, mozgási állapotot azáltal jellemezhetjük, hogy megadjuk, hogy egy térfogatelemben, az ún. *makrodifferenciál*ban, mely kicsi a gáz által kitöltött térfogat méreteihez képest, hány rész van, mi ezek átlagos sebessége, stb.

Ha feltételezzük, hogy a korpuszkulák átlagos kinetikus energiája arányos az abszolút hőmérséklettel, akkor elemi úton le lehet vezetni a gázegyenletet. Mi nem követjük ezt az utat, hanem elvontabb és sokkal általánosabb módon fogjuk tárgyalni a gázokat. A módszer a termodinamika és a fizikai statisztika közötti rendkívül fontos összefüggésen alapszik.

3. §. Entrópia és valószínűség

Ha egy korpuszkulákból álló testet mechanikailag egyértelműen jellemezni akarunk, akkor minden egyes korpuszkula koordinátáit és sebességét irány és nagyság szerint meg kell adni. Ezzel egyúttal a rendszer állapotának változása is meghatározott a mechanika törvényei szerint.

Ezzel szemben ha egy testet állapothatározókkal jellemzünk, pl. egy gáznál megadjuk a térfogatot, a nyomást és a hőmérsékletet, akkor egy ilyen állapotmeghatározás egyáltalán nem tekinthető mechanikailag egyértelmű állapotmeghatározásnak. Egy ilyen, állapothatározókkal jellemzett állapotnak, ún. makroállapotnak, több, sok rész esetében igen nagy számú mechanikai állapot, ún. mikroállapot felel meg.

Egy makroállapotot nem termodinamikai fogalmakkal, hanem a korpuszkuláris elméletnek megfelelően azáltal jellemezhetünk, hogy egy állapoteloszlást adunk meg, vagyis megadjuk, hogy pl. hány részecske van a koordináta tér egyes makrodifferenciáljaiban és az ún. *impulzustér*, vagyis a 3 impulzuskomponens mint koordináta által meghatározott tér egyes makrodifferenciáljaiban. Kérdezhetjük pl., hogy egyensúly esetében meghatározott körülmények között milyen állapoteloszlás valósul meg.

A mechanika törvényei szerint a makroállapot egyáltalán nem határozza meg a mikroállapotot és így annak változását sem, úgyhogy első pillanatra meglepő, hogy a makroállapotokra egyáltalán törvényszerűségeket mondhatunk ki. Hogy ez mégis lehetséges, az onnan ered, hogy a mikroállapotok nagy sokasága ugyanahhoz az állapoteloszláshoz vezet és az egyensúlyhoz tartozó mikroállapotok száma túlnyomó a többi mikroállapot számához képest. Eszerint a makroszkopikus törvények valószínűségi törvények, melyek nem kivétel nélkül, hanem csak az esetek igen túlnyomó számában valósulnak meg.

Mivel a makroszkopikus törvények valószínűségi törvények, bevezetjük egy makroállapot valószínűségének fogalmát. Ez alatt értjük a makroállapothoz tartozó mikroállapotok számát, tehát azoknak a mikroállapotoknak a számát, melyek mind ugyanazt a makroállapotot adják. A valószínűségszámításban a valószínűséget a kedvező esetek számának és az összes lehetséges esetek számának hányadosa gyanánt definiálják, tehát a valószínűség maximális értéke 1. A statisztikai termodinamikában az összes lehetséges eset, vagyis az összes lehetséges mikroállapot számával nem osztunk, tehát egy makroállapot valószínűsége nagy szám.

Különböző makroállapotok valószínűsége különböző. A termodinamikai egyensúlynak az az állapot felel meg, melynek valószínűsége túlnyomó. Másrészt egy lezárt rendszert jellemez az, hogy ott egyensúly esetében az entrópia maximális.

Tehát az entrópia és a valószínűség között olyan összefüggésnek kell fennállnia, hogy az egyik a másikkal növekszik. Hogy ez az összefüggés milyen, azt a következőképpen láthatjuk be. Két független rendszer entrópiája, mivel az entrópiák additív módon tevődnek össze, az egyes rendszerek entrópiáinak összegével

egyenlő. Tehát

$$S_{12} = S_1 + S_2. \tag{20.3.1}$$

Másrészt annak a valószínűsége, hogy az egyik rendszer egy meghatározott állapotban, a másik rendszer egy másik meghatározott állapotban van, a valószínűségszámítás törvényei szerint az egyes valószínűségek szorzata, tehát

$$W_{12} = W_1 W_2. \tag{20.3.2}$$

Az entrópia és a termodinamikai valószínűség kapcsolatát vegyük fel az

$$S = f(W) \tag{20.3.3}$$

alakban, ahol f egy egyelőre ismeretlen függvénykapcsolatot jelent. (3.1) és (3.2) alapján kapjuk, hogy

$$f(W_1) + f(W_2) = f(W_1 W_2). \tag{20.3.4}$$

Ez egy ún. függvényegyenlet az ismeretlen f függvényre. Megoldása céljából differenciáljuk ezt az egyenletet W_2 szerint, konstans W_1 mellett

$$f'(W_2) = W_1 f'(W_1 W_2).$$

Legyen most $W_2 = 1$ és W_1 helyébe írjunk index nélküli W-t:

$$Wf'(W) = f'(1).$$

Ezt az egyenletet W-vel osztva és integrálva W szerint, kapjuk, hogy

$$f(W) = f'(1) \ln W + f(1). \tag{20.3.5}$$

Az itt fellépő $f(1)$ értéket az eredeti (3.4) függvényegyenletből könnyen megkaphatjuk. Legyen ugyanis (3.4)-ben $W_2 = 1$, úgy azonnal látjuk, hogy $f(1) = 0$, vagyis $f(W) = f'(1) \ln W$. Ha még bevezetjük a $k = f'(1)$ jelölést, úgy az entrópia és a termodinamikai valószínűség kapcsolatára a következő eredményt kapjuk:

$$S = k \ln W. \tag{20.3.6}$$

A k arányossági faktor neve: *Boltzmann*-állandó, értéke pedig attól függ, hogy az S entrópiát milyen egységekben mérjük; cgs egységrendszerben a *Boltzmann*-állandó

$$k = 1{,}38054 \cdot 10^{-16} \frac{\text{erg}}{\text{fok}}. \tag{20.3.7}$$

Az S és W közötti (3.6) összefüggés az ún. *Boltzmann*-féle egyenlet, mely a fizika legfontosabb összefüggései közé tartozik. k számértéke onnan adódik, hogy a termodinamikában definiált entrópia és a valószínűség a *Boltzmann*-egyenlet szerint függenek össze, ha k-nak a fenti számértéket tulajdonítjuk, amint azt a továbbiakból látni fogjuk. Hogy k-t kicsinek kell választani, azt már itt belátjuk. Ha ugyanis a test számos részből áll, akkor W igen nagy szám, ellenben a termodinamikailag definiált entrópia közepes nagyságú szám, tehát k-nak igen

kis számnak kell lenni. A fenti *Boltzmann*-egyenlet alapján következtetést vonhatunk le arra nézve, hogy mi a valószínűsége annak, hogy az entrópia az egyensúlyi állapotnak megfelelő maximális entrópia értéktől, S_m-től eltér. Feleljen meg az egyensúlyi állapotnak W_m valószínűség, akkor

$$S_m = k \ln W_m,$$

tehát

$$W_m = e^{\frac{S_m}{k}}.$$

Egy másik állapotban, melynek megfelelő értékek S és W, fennáll, hogy

$$W = e^{\frac{S}{k}}.$$

A valószínűségek viszonya, vagyis a relatív valószínűség a következő lesz

$$\frac{W}{W_m} = e^{-\frac{S_m - S}{k}} = e^{-\frac{\Delta S}{k}}, \tag{20.3.8}$$

ahol $\Delta S = S_m - S$.

Egy közepes entrópiaeltérésnek, ΔS-nek, igen nagy $\Delta S/k$ érték felel meg, tehát W/W_m igen kis szám, vagyis igen kevés esetben tér el az entrópia az egyensúlyi értéktől egy közepes értékkel. Hogy az entrópiaeltérés több esetben forduljon elő, ahhoz szükséges, hogy ΔS k-nagyságrendű legyen. Tehát az entrópia normális ingadozásai igen kicsinyek. Sőt, amint látni fogjuk, mindazon esetekben, midőn a részek száma nagy, az egyensúlytól való eltérések, minthogy nagyon kis számban fordulnak elő, jelentéktelenek. Az egyensúly körüli ingadozások csak bizonyos körülmények között észlelhetők, pl. midőn a részek száma kicsi.

Hogy az entrópiát kiszámíthassuk, meg kell állapítani a valószínűséget. A valószínűség kifejezésében, ha a részek számát N-nel jelöljük, fellép az $N!$. Mivel N nagyságrendje általában az L *Avogadró*-szám, vagyis 10^{23}, az $N!$ kiszámítása közvetlenül nem lehetséges. De $N!$ számára le lehet vezetni egy közelítő formulát a következőképpen

$$\ln N! = \ln 1 + \ln 2 + \ln 3 + \ldots + \ln N,$$

ezt a sort felfoghatjuk mint derékszögű téglalapok összegét, melyek szélessége, $\Delta x = 1$, magassága $\ln x$. x nagy értékeinél a $\Delta x = 1$ intervallumok praktice differenciálok, úgyhogy a fenti összeg, ha N nagy, a következő integrállal helyettesíthető

$$\int_0^N \ln x dx = [x \ln x - x]_1^N = N \ln N - N + 1.$$

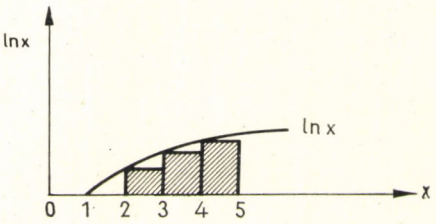
Ha 1-et N mellett elhanyagolhatjuk, akkor a következő nagyon használható közelítő formulát nyerjük

$$\ln N! \sim N \ln N - N, \tag{20.3.9}$$

vagyis

$$N! \sim \left(\frac{N}{e}\right)^N . \tag{20.3.10}$$

Mindkét közelítő formula csak nagy N-re érvényes.



53. ábra. ln $N!$ meghatározása $N \gg 1$ esetén

4. §. Ideális gáz sűrűségeloszlásának meghatározása. A klasszikus vagy Boltzmann-féle statisztika

A statisztikus mechanika módszereinek alkalmazásáról a legjobban egy egyszerű példa kapcsán kaphatunk képet. Ezért meg fogjuk határozni statisztikai módszerekkel egy ideális gázban egyensúly esetén a sűrűségeloszlást. Az eredményt előre ismerjük, a sűrűségeloszlásra konstanst kell kapnunk, de a módszer megvilágítására a példa nagyon alkalmas. Feladatunk tehát meghatározni egy termodinamikai állapot valószínűségét, amivel egyúttal meg van határozva az állapot entrópiája, amelyből, mint látni fogjuk, már következtethetünk az egyensúlyi állapot sűrűségeloszlására. Evégből felosztjuk az ideális gáz által elfoglalt térfogatot, V-t $\Delta\tau$ egyenlő nagyságú makrodifferenciálokra. Az i-edik cellába eső részek száma legyen N_i. A sűrűség tehát $N_i/\Delta\tau$. $\Delta\tau$-nak nem kell indexet adnunk, mert a cellák térfogatát egyenlő nagyságúnak választottuk. Az egyes $\Delta\tau$ nagyságú kis cellákat, mint azt a makrodifferenciál definíciójánál már említettük, oly nagynak kell választanunk, hogy azokban még sok rész legyen jelen, ekkor a sűrűség folytonos függvénye a helynek. Gondoljuk a cellákat és a molekulákat megszámozva. Mivel a cellák egyenlő nagyok, eleve egyenlő a valószínűsége annak, hogy egy rész az i-edik vagy a k-adik cellába esik. Tehát azáltal, hogy a cellákat egyenlő térfogatúaknak választottuk, elértük azt, hogy az egyes cellák egyenlő, a priori - valószínűséggel bírnak. Ezt az egyenlő a priori-valószínűséget az sem befolyásolja, ha az egyes cellákban már van egy bizonyos számú rész. Legyen a cellák száma Z. A termodinamikai valószínűség meghatározására tehát csak azt kell meghatároznunk, hogy hányféleképpen lehet N részt Z cellára úgy elosztani, hogy az i-edik cellába N_i ($i = 1, 2, \ldots, Z$) rész jusson. Ez lesz a valószínűsége annak az állapotnak, melyet az $N_1, N_2, \ldots, N_Z$ számok jellemeznek. Ha ugyanannyi cella volna, mint amennyi rész van, vagyis ha N számú cella volna és mindegyikben csak 1 rész, akkor az összes lehetséges állapotok száma $N!$, vagyis annyi permutáció,

ahány N elemből alkotható, mert különböző cellákban levő részek felcserélése új mikroállapotot jelent.

A valóságban azonban a helyzet az, hogy a részek száma sokkal nagyobb, mint a cellák száma és az egyes cellákban sok rész foglal helyet. A lehetséges mikroállapotok száma tehát nem lesz $N!$, hanem sokkal kevesebb, mert az egy cellában helyet foglaló részek felcserélése nem vezet újabb mikroállapothoz, ezeket a permutációk képzésénél egyenlő elemeknek kell tekinteni. Tehát a kombinatorika szabályai szerint nyerjük, ha az első cellában N_1, a másodikban N_2, ... rész van, hogy az összes lehetséges, egymástól különböző mikroállapotok száma, vagyis a termodinamikai valószínűség

$$W = \frac{N!}{N_1!N_2!\ldots} = \frac{N!}{\Pi N_i!}. \tag{20.4.1}$$

Ez a valószínűség a klasszikus vagy *Boltzmann*-féle statisztikában.

A (3.10) közelítő formula alkalmazásával kapjuk, hogy

$$W = \frac{N^N}{\Pi N_i^{N_i}}. \tag{20.4.2}$$

Vezessünk be ezek után a részek sűrűségére egy $f(i)$ függvényt a következőképpen

$$N_i = f(i)\Delta\tau. \tag{20.4.3}$$

Ekkor az entrópiára nyerjük, hogy

$$S = k(N\ln N - \sum_i N_i \ln N_i) = k[N\ln N - \sum_i f(i)\Delta\tau \ln f(i) - \sum_i f(i)\Delta\tau \ln \Delta\tau].$$

Az egyensúlyi állapotban S maximummal bír, vagyis S első variációja eltűnik. Variálni $f(i)$-t kell. Tehát nyerjük, hogy

$$-\frac{\delta S}{k} = \sum_i \delta f(i)\Delta\tau \ln f(i) + \sum_i \delta f(i)\Delta\tau + \sum_i \delta f(i)\Delta\tau \ln \Delta\tau = 0. \tag{20.4.4}$$

A variációra egy feltétel áll fenn. Ugyanis az összes rész száma nem változhat a variációnál. Tehát fennáll, hogy

$$\sum_i f(i)\Delta\tau = N, \tag{20.4.5}$$

vagyis

$$\sum_i \delta f(i)\Delta\tau = 0. \tag{20.4.6}$$

A variációk tehát nem tetszőlegesek, hanem a variációknak ki kell elégíteni a (4.6) egyenletet. Alkalmazzuk a multiplikátorok módszerét. Szorozzuk meg a (4.6) egyenletet egy α faktorral és adjuk hozzá a (4.4) egyenlethez. Ekkor nyerjük, hogy

$$\sum_i [\ln f(i) + 1 + \ln \Delta\tau + \alpha]\Delta\tau\delta f(i) = 0.$$

Itt most már a $\delta f(i)$ variációk egyes koefficiensei 0-val tehetők egyenlővé, vagyis nyerjük, hogy

$$\ln f(i) + 1 + \ln \Delta\tau + \alpha = 0,$$

tehát

$$f(i) = c,$$

ahol c egy konstans.

Mint tehát már előre vártuk, a legvalószínűbb eloszlásra egy mindenütt egyenlő sűrűséget, vagyis egy egyenletes eloszlást kaptunk. $f(i)$ számértékét (4.5)-ből határozhatjuk meg. Mivel f_i = konstans, $f(i)$ a Σ alól kiemelhető és nyerjük, hogy

$$f(i) \sum_i \Delta\tau = f(i)V = N,$$

$$f(i) = \frac{N}{V},$$

amit előre vártunk.

A következőkben egy fontos általánosítással kell foglalkoznunk. Az egyenlő a priori-valószínűséggel bíró cellákra való felbontás nem mindig alkalmas. Egyrészt pl. egy gömbfelületen való eloszlás vizsgálatainál, ill. meghatározásánál egyáltalán nem célszerű az egyenlő nagyságú cellákra való felbontás. Másrészt pedig a kvantumstatisztikában előfordul az az eset, hogy az egyes celláknak különböző a priori-valószínűségeket, ún. súlyokat kell tulajdonítanunk, ami persze ekvivalens azzal, hogy a cellák nagyságát különbözőknek kell választanunk. (Sok esetben az a priori-valószínűségek a valóságban inkább a posteriori-valószínűségek, mert sok esetben az a priori-valószínűségeket a tapasztalatból határozták meg. Ezeknek mélyebb elméleti megalapozása, vagyis tényleges a priori-valószínűségekké való átváltoztatása egy további fejlődési folyamatban történt.) Az általános esetben felmerül tehát a kérdés, hogy hogyan kell eljárnunk, midőn az egyes cellák térfogata, $\Delta\tau_i$ egymástól különbözik és az egyes cellák egymástól különböző g_i a priori-valószínűséggel bírnak. Az egyes cellák összsúlyát, G_i-t mindenesetre g_i és $\Delta\tau_i$ szorzatával tesszük egyenlővé. Hogy ebben az esetben egy eloszlás valószínűségét milyen formulával lehet előállítani, azt egyszerűen belátjuk. Tegyük fel, hogy az egyik cella térfogatát a többi egyenlő nagy cella térfogatának 2-szeresére növeljük meg, akkor annak a valószínűsége, hogy egy a részecske ebbe a cellába esik, 2-szer akkora, mint annak a valószínűsége, hogy egy másik cellába esik. Ugyanez áll fenn pl. egy b és egy c részecskére is. Annak a valószínűsége tehát, hogy az a, b és c részecskék együtt, vagyis egyszerre foglalnak helyet a kitüntetett cellában (mivel ennek a valószínűsége az egyszerű valószínűségek szorzatával egyenlő), 2^3 faktorral nagyobb, mint annak a valószínűsége, hogy az a, b és c részecskék egy másik cellában foglalnak egyszerre helyet. Általában tehát abban a kifejezésben, mely megadja annak a valószínűségét, hogy N_i részecske esik egy G_i súlyú cellába, a $G_i^{N_i}$ faktor lép fel. Az a kifejezés tehát, mely megadja annak a valószínűségét, hogy az első G_1-súlyú cellába N_1, a második G_2-súlyú cellába N_2, a harmadik G_3-súlyú cellába N_3 részecske jut,

a $G_1^{N_1}$, $G_2^{N_2}$, $G_3^{N_3}$ ... faktorokat tartalmazza. Tehát nyerjük, hogy ez a valószínűség a következő

$$W = \frac{N! \prod G_i^{Ni}}{\prod N_i!} = \frac{N^N \prod G_i^{N_i}}{\prod N_i^{N_i}} = \frac{N^N \prod G_i^{f(i)\Delta\tau_i}}{\prod (f(i)\,\Delta\tau_i)^{f(i)\Delta\tau_i}}, \qquad (20.4.7)$$

ha ismét

$$N_i = f(i)\Delta\tau_i.$$

(4.7) a valószínűség általánosabb kifejezése a klasszikus, vagy *Boltzmann*-féle statisztika szerint. S-re nyerjük, hogy

$$S = k[N \ln N + \sum_i f(i)\Delta\tau_i \ln G_i - \sum_i f(i)\Delta\tau_i \ln f(i) - \sum_i f(i)\Delta\tau_i \ln \Delta\tau_i].$$

A további számítás hasonló az előző esethez. A legvalószínűbb eloszlást a

$$\frac{\delta S}{k} = \sum_i \delta f(i)\Delta\tau_i \ln G_i - \sum_i \delta f(i)\,\Delta\tau_i \ln f(i) - \sum_i \delta f(i)\,\Delta\tau_i - \sum_i \delta f(i)\,\Delta\tau_i \ln \Delta\tau_i = 0$$

egyenletből határozzuk meg az $N = \sum_i f(i)\Delta\tau_i$, vagyis a

$$\delta N = \sum_i \delta f(i)\Delta\tau_i = 0$$

mellékfeltétellel. Ha ezt az egyenletet egy $(-\alpha)$ multiplikátorral szorozva hozzáadjuk a fenti egyenlethez, nyerjük, hogy

$$\sum_i [\ln G_i - \ln f(i) - 1 - \ln \Delta\tau_i - \alpha]\Delta\tau_i\,\delta f(i) = 0,$$

ahonnan hasonlóan, mint előbb, következik, hogy

$$\ln G_i - \ln f(i) - 1 - \ln \Delta\tau_i - \alpha = 0.$$

Innen nyerjük, hogy

$$f(i) = c\frac{G_i}{\Delta\tau_i}.$$

A c konstanst az $N = \sum_i f(i)\Delta\tau_i$ egyenletből határozhatjuk meg, ugyanis

$$N = \sum_i f(i)\Delta\tau_i = c\sum_i G_i,$$

$$c = \frac{N}{\sum_i G_i}.$$

Tehát nyerjük, hogy

$$f_i = \frac{NG_i}{\Delta\tau_i \sum_i G_i} = \frac{Ng_i}{\sum_i g_i \Delta\tau_i}.$$

Ez a függvény adja jelen esetben a legvalószínűbb eloszlást.

Egyenlő a priori-valószínűségek esetén, vagyis $g_i = 1$ esetben

$$f(i) = \frac{N}{\sum_i \Delta\tau_i} = \frac{N}{V}.$$

Tehát a legvalószínűbb eloszlás különböző nagyságú cellák esetében is, ha azok nem bírnak még külön a priori-valószínűségekkel, az egyenletes eloszlás, vagyis egy olyan eloszlás, melynél a sűrűség mindenütt ugyanakkora.

5. §. Liouville tétele. A fázistér

Egy gázban általában a részecskéknek nemcsak térbeli eloszlását, hanem sebességeloszlását is meg akarjuk határozni az egyensúlyi állapotban. Közelfekvő, hogy az előző fejezetben kifejtett módszert erre az esetre átvigyük. Ugyanis evégből csak az szükséges, hogy a valóságos tér helyett egy új 6 dimenziós teret vezessünk be, melynek 3 tengelyére a részecskék koordinátáit, másik 3 tengelyére pedig a részecskék sebességi komponenseit mérjük fel, vagyis melyben minden egyes pont 3 derékszögű koordinátával és 3 sebességi komponenssel van definiálva és állapítsuk meg a részecskék eloszlását. Itt azonban az a nehézség merül fel, hogy ebben az új 6 dimenziós térben nem ismerjük a cellák a priori-valószínűségét és nem közvetlenül evidens, hogy ezek a priori-valószínűsége a térfogatukkal arányos. Célszerű az előbb definiált 6 dimenziós tér helyett egy másik 6 dimenziós teret választani, melynek 3 tengelyére ugyancsak a részecskék 3 koordinátáját, q_1, q_2, q_3-t, másik 3 tengelyére pedig a részecskéknek ezekhez a koordinátákhoz kanonikusan konjugált 3 impulzuskoordinátáját, p_1, p_2, p_3-t mérjük fel. Ezt a 6 dimenziós koordináta-impulzusteret *fázistér*nek nevezzük. Be fogjuk bizonyítani, hogy ebben a térben az egyenlő nagyságú cellák a priori-valószínűsége egyenlő, vagyis hogy a cellák a priori-valószínűsége a cellák térfogatával arányos. Határoljunk el ebben a térben egy $\Delta\tau$ nagyságú térfogatot, ekkor a térfogatot határoló felületen a fázistér egyes pontjai, melyek az egyes részecskék állapotát (helyzetét és impulzusát) reprezentálják, áthaladnak, egyesek belépnek $\Delta\tau$-ba, mások kilépnek onnan, megfelelően annak, hogy az egyes részecskék állapota (helyzete és impulzusa) állandóan változik. Egészen hasonlóan, mint 3 dimenzió esetében, meghatározhatjuk a $\Delta\tau$-ból ki- és $\Delta\tau$-ba beáramló fázistér-pontokra vonatkozóan a $\Delta\tau$ térfogatelem forráserősségét, vagyis divergenciáját. Egy fázistérpont sebességének, C-nek komponensei $\frac{dq_1}{dt}, \frac{dq_2}{dt}, \frac{dq_3}{dt}, \frac{dp_1}{dt}, \frac{dp_2}{dt}, \frac{dp_3}{dt}$. div C-re egészen hasonlóan, mint 3 dimenzió esetén, kapjuk, hogy

$$\operatorname{div} C = \frac{\partial C_1}{\partial q_1} + \frac{\partial C_2}{\partial q_2} + \frac{\partial C_3}{\partial q_3} + \frac{\partial C_4}{\partial p_1} + \frac{\partial C_5}{\partial p_2} + \frac{\partial C_6}{\partial p_3} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial q_1}\frac{dq_1}{dt} + \frac{\partial}{\partial q_2}\frac{dq_2}{dt} + \frac{\partial}{\partial q_3}\frac{dq_3}{dt} + \frac{\partial}{\partial p_1}\frac{dp_1}{dt} + \frac{\partial}{\partial p_2}\frac{dp_2}{dt} + \frac{\partial}{\partial p_3}\frac{dp_3}{dt}.$$

Az egyes részecskék követik a mechanika törvényeit, tehát mozgásuk a mechanika alaptörvényei szerint megy végbe. Így a részecskék mozgására fennállnak a *Hamilton*-egyenletek, melyek szerint

$$\frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_k}, \qquad \frac{dq_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_k}. \qquad (k = 1, 2, 3)$$

Ezekből következik, hogy

$$\frac{\partial}{\partial p_k}\frac{dp_k}{dt} + \frac{\partial}{\partial q_k}\frac{dq_k}{dt} = 0. \qquad (k = 1, 2, 3)$$

Innen láthatjuk, hogy a div$C$ kifejezésében $2-2$ egyenlő indexű tag összege 0, vagyis div C is 0-val egyenlő. A sebesség divergenciájának eltűnése egy inkompreszszibilis folyadék áramlásának jellemzője. Bizonyos számú részecske, jelen esetben a fázistér-pontok, egy $\Delta\tau_i$ fázistércellát tölt be, egy későbbi időpillanatban egy másik, de az előzővel egyenlő térfogatú elemet fog betölteni. A fázistérnek ez a két egyenlő térfogatú eleme tehát abban a kapcsolatban van egymással, hogy ha az egyik N_i részecskének megfelelő N_i fázisponttal van betöltve, akkor a másik is ugyancsak N_i fázisponttal van betöltve. Mivel elegendő hosszú idő alatt a fázistér pontjainak áramlása a fázistér összes elemén áthalad, az előbbi megállapítás a fázistér összes egyenlő térfogatú elemére érvényes, vagyis az egyenlő térfogatú elemek a priori-valószínűsége ugyanakkora. Ez LIOUVILLE tétele. Ez alapot nyújt arra, hogy a sűrűségeloszlás mellett a sebességeloszlást is meghatározzuk. LIOUVILLE tétele nemcsak a 6 dimenziós fázistérben érvényes, hanem többdimenziójú (vagy esetleg kevesebb dimenziójú) fázistérre is, ha a részecskék mozgása, melyeknek megfelelő fázistérpontok áramlását vizsgáljuk, a mechanika törvényeinek eleget tesz.

6. §. A Maxwell–Boltzmann-féle energiaeloszlás

LIOUVILLE tétele alapján az ideális gáz sűrűségeloszlásának meghatározására kidolgozott módszert átvihetjük a fázistérre. Ezáltal, mint látni fogjuk, választ kapunk arra a kérdésre, hogy hogyan oszlik el egy sok részből álló rendszer U összenergiája az egyes részecskékre.

A fázistér minden egyes cellája meghatározott energiával bír, melyet az i-edik cella esetében $u(i)$-vel jelölünk. Ez az az energia, mellyel egy részecske bír, ha a neki megfelelő fázistérpont ebbe a cellába esik. Az általánosság kedvéért feltesszük, hogy a cellák térfogata, $\Delta\tau_i$ különböző. Az egyes cellák súlyáról, G_i-ről LIOUVILLE tétele értelmében feltesszük, hogy az $\Delta\tau_i$-vel arányos. Az arányossági faktort 1-nek vesszük, amit tehetünk, mert az arányossági faktor a valószínűség kifejezésében csak egy konstans faktort adna. Ha ismét definiálunk egy $f(i)$ eloszlási függvényt a következőképpen: $N_i = f(i)\Delta\tau_i$, akkor a valószínűségre nyerjük, hogy

$$W = \frac{N^N \prod \Delta\tau_i^{f(i)\Delta\tau_i}}{\prod (f(i)\Delta\tau_i)^{f(i)\Delta\tau_i}}. \qquad (20.6.1)$$

Az entrópiára pedig adódik, hogy

$$S = kN \ln N - k \sum_i f(i) \Delta\tau_i \ln f(i) .$$

A feladat ismét az, hogy meghatározzuk $f(i)$-t az egyensúlyi állapotban, vagyis hogy meghatározzuk $f(i)$-t a $\delta S = 0$ egyenletből. A mellékfeltételek most a következők. Először is ismét az, hogy az összes rész száma, N, állandó legyen, vagyis hogy

$$N = \sum_i f(i) \Delta\tau_i \text{ állandó, tehát} \tag{20.6.2}$$

$$\delta N = \sum_i \delta f(i) \Delta\tau_i = 0 \tag{20.6.3}$$

legyen.

Másodszor az összenergiának, U-nak is állandónak kell maradni. Azoknak a részeknek energiája, melyeknek megfelelő fázispontok az $u(i)$ energiájú i-edik cellába esnek, $u(i)f(i)\Delta\tau_i$. Tehát az összenergia

$$U = \sum_i u(i) f(i) \Delta\tau_i . \tag{20.6.4}$$

U a variálásnál nem változhat, tehát

$$\delta U = \sum_i \delta f(i) u(i) \Delta\tau_i = 0. \tag{20.6.5}$$

Az entrópia variációjának eltűnéséből a következő egyenletet nyerjük

$$-\frac{\delta S}{k} = \sum_i \delta f(i)\, \Delta\tau_i \ln f(i) + \sum_i \delta f(i)\, \Delta\tau_i = 0 . \tag{20.6.6}$$

Alkalmazzuk ismét a multiplikátorok módszerét, vagyis adjuk hozzá a (6.3) egyenletet egy α, a (6.5) egyenletet pedig egy β multiplikátorral szorozva a (6.6) egyenlethez. Ekkor kapjuk, hogy

$$\sum_i \big(\ln f(i) + 1 + \alpha + \beta u(i)\big) \Delta\tau_i \delta f(i) = 0,$$

ahonnan következik, hogy

$$\ln f(i) + 1 + \alpha + \beta u(i) = 0.$$

Ebből

$$f(i) = e^{-(1+\alpha)} e^{-\beta u(i)} .$$

Ha az $e^{-(1+\alpha)}$ konstanst A-val jelöljük,

$$f(i) = A e^{-\beta u(i)} . \tag{20.6.7}$$

Az A konstanst a (6.2) egyenletből határozhatjuk meg, ugyanis (6.2)-ből (6.7)-tel nyerjük, hogy

$$N = A \sum_i e^{-\beta u(i)} \Delta\tau_i ,$$

vagyis

$$A = \frac{N}{\sum_i e^{-\beta u(i)} \Delta\tau_i} .$$

Tehát

$$f(i) = \frac{N e^{-\beta u(i)}}{\sum_i e^{-\beta u(i)} \Delta\tau_i} . \tag{20.6.8}$$

$f(i)$ nevezőjében álló összeget *állapotösszeg*nek nevezzük és a következőkben a rendszernek ezt a fontos jellemzőjét σ-val jelöljük, tehát

$$\sigma = \sum_i e^{-\beta u(i)} \Delta\tau_i . \tag{20.6.9}$$

Hogy a másik multiplikátort, β-t is meghatározhassuk, vissza kell térnünk az entrópiának fentebb nyert kifejezésére, melyből $f(i) = \frac{N}{\sigma} e^{-\beta u(i)}$-vel nyerjük, hogy

$$S = kN \ln N - k \sum_i \frac{N}{\sigma} e^{-\beta u(i)} \Delta\tau_i (\ln N - \beta u(i) - \ln \sigma) .$$

Figyelembe véve a (6.9) és az

$$\frac{N}{\sigma} \sum_i e^{-\beta u(i)} u(i) \Delta\tau_i = U \tag{20.6.10}$$

egyenletet, nyerjük, hogy

$$S = k\beta U + kN \ln \sigma. \tag{20.6.11}$$

A termodinamikai fejezetben láttuk, hogy

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_V ,$$

ahol V a rendszer térfogata és T az abszolút hőmérséklet. A (6.10) egyenletből látható, hogy U β függvénye, tehát β is függvénye U-nak. Így

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_V = \frac{dS}{d\beta} \left(\frac{\partial \beta}{\partial U}\right)_V = \frac{dS}{d\beta} \frac{1}{\left(\frac{\partial U}{\partial \beta}\right)_V} . \tag{20.6.12}$$

A (6.11) egyenletből nyerjük

$$\frac{dS}{d\beta} = kU + k\beta \frac{\partial U}{\partial \beta} + kN \frac{1}{\sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \beta} . \tag{20.6.13}$$

A (6.9) egyenlet differenciálásából pedig kapjuk, ha figyelembe vesszük (6.10)-et, hogy

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \beta} = - \sum_i u(i) e^{-\beta u(i)} \Delta\tau_i = - \frac{U_\sigma}{N} . \tag{20.6.14}$$

(6.14)-et (6.13)-ba helyettesítve nyerjük, hogy $\frac{dS}{d\beta} = k\beta \frac{\partial U}{\partial \beta}$. Itt $\frac{\partial U}{\partial \beta}$ helyett írhatunk $(\partial U/\partial \beta)_V$-t, mert a (6.11) formula differenciálásánál V konstans. A $dS/d\beta$-ra nyert kifejezést visszahelyettesítve (6.12)-be, nyerjük, hogy $(\partial S/\partial U)_V = k\beta$. Ezt az $1/T = (\partial S/\partial U)_V$ formulába helyettesítve adódik, hogy

$$\beta = \frac{1}{kT}. \tag{20.6.15}$$

Ezzel $f(i)$ számára kapjuk, hogy

$$f(i) = \frac{Ne^{-\frac{u_i}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{u(i)}{kT}} \Delta\tau_i}. \tag{20.6.16}$$

Ez a híres *Maxwell–Boltzmann*-féle energiaeloszlási törvény.

A (6.11) formulából (6.15)-tel nyerjük, hogy

$$S = \frac{U}{T} + kN \ln \sigma .$$

Ez a formula még kiigazításra szorul, ugyanis a logaritmus alatti mennyiség dimenziója a fázistér térfogatelemének dimenziójával azonos. A logaritmus alatt azonban éppen úgy, mint az exponensben, csak egy dimenzió nélküli mennyiség állhat. A klasszikus termodinamikában S definíciója szerint S-hez még egy tetszőleges additív állandó járulhat. Egy ilyen additív konstans pl. $-kN \ln \Delta\tau_0$, ahol $\Delta\tau_0$ a fázistér egy térfogateleme, melynek nagyságát egyelőre határozatlannak hagyjuk, dimenziója (koordináta × impulzus)^n, ha a helyzetkoordináták száma n. Ezzel az additív konstanssal S számára nyerjük, hogy

$$S = \frac{U}{T} + kN \ln \frac{\sigma}{\Delta\tau_0}. \tag{20.6.17}$$

Az F szabad energia pedig a következő lesz

$$F = U - TS = -kNT \ln \frac{\sigma}{\Delta\tau_0}. \tag{20.6.18}$$

$\Delta\tau_0$ nagyságát itt nem adtuk meg és mivel úgyis csak mint additív állandó szerepel az entrópiában, itt nem is lényeges. A kvantumelmélet azonban, mint látni fogjuk, mutatja, hogy $\Delta\tau_0$-nak egészen meghatározott értéket kell tulajdonítani.

7. §. Sebességeloszlás ideális gázban

A következőkben a fentiek alkalmazása gyanánt meg fogjuk határozni egy ideális gázban a részek sebességének eloszlását. A következőkben csak a részek súlypontjának transzlációs mozgására szorítkozunk, úgyhogy az eredmények nemcsak

olyan valódi gázokra vonatkoznak, melyek részei egy atomból állnak, hanem olyanokra is, melyek részei, molekulái több atomból épülnek fel. Ezeknél ugyanis még a súlypont körüli rotáció is lehetséges, de ezt tárgyalásainkból kizárjuk. Ezt tehetjük, mert ez a rotáció a transzlációs sebesség eloszlását nem befolyásolhatja.

Derékszögű koordinátákban az impulzuskomponensek

$$p_x = m\dot{x}, \quad p_y = m\dot{y}, \quad p_z = m\dot{z},$$

az impulzus abszolút értéke pedig

$$p = m\sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2} = mc,$$

ahol c a sebesség abszolút értéke.

A részek energiája a kinetikus energiájukkal azonos, tehát

$$u = \frac{1}{2}mc^2 = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{p^2}{2m}.$$

Azoknak a részeknek száma, melyek súlypontkoordinátái x és $x + \Delta x$, y és $y + \Delta y$, z és $z + \Delta z$, valamint melyek impulzuskomponensei p_x és $p_x + \Delta p_x$, p_y és $p_y + \Delta p_y$, p_z és $p_z + \Delta p_z$ közé esnek, az előbbi fejezet szerint

$$\Delta N = \frac{N}{\sigma} e^{-\frac{1}{2mkT}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)} \Delta x \Delta y \Delta z \, \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z . \tag{20.7.1}$$

Ha a $\Delta x \Delta y \Delta z$ térfogatelemmel mindkét oldalon osztunk, akkor nyerjük azoknak a térfogategységben levő részeknek számát, melyek impulzuskomponensei a fenti intervallumba esnek.

Számítsuk ki a nevezőben álló σ-t. Mivel a klasszikus statisztikában a cellák nagyságára nincsen kikötés, a Δx, Δy, Δz és Δp_x, Δp_y, Δp_z intervallumokat olyan kicsivé tehetjük, hogy σ-ban az összeg helyett integrált írhatunk, tehát

$$\sigma = \iiiiiint e^{-\frac{1}{2mkT}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)} dx dy dz \, dp_x dp_y dp_z . \tag{20.7.2}$$

A koordináták szerint azonnal integrálhatunk. Ha a térfogatot, melyben a gáz helyet foglal, V-vel jelöljük, nyerjük, hogy

$$\sigma = V \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2mkT}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)} dp_x dp_y dp_z .$$

Ez így is írható

$$\sigma = V \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2mkT}p_x^2} dp_x \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2mkT}p_y^2} dp_y \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2mkT}p_z^2} dp_z . \tag{20.7.3}$$

Ez a 3 integrál azonos, csak az integrációs változó van másképpen jelölve. Ha tehát bevezetjük a következő jelölést

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2mkT} p_i^2} dp_i, \quad (i = x, y, z) \tag{20.7.4}$$

akkor

$$\sigma = VI^3.$$

A (7.4) integrált határozatlan formában nem lehet kiszámítani, csak a $-\infty$ és $+\infty$ határok közötti határozott integrált. Legyen $\sqrt{2mkT} = \gamma$ és

$$\frac{p_x}{\sqrt{2mkT}} = \frac{p_x}{\gamma} = \xi, \quad \text{vagyis } dp_x = \gamma d\xi.$$

Ekkor nyerjük, hogy

$$I = \gamma \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi.$$

Ha ebben az integrálban a ξ integrációs változó helyett η-t írunk, az integrál értéke nem változik, tehát $I = \gamma \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\eta^2} d\eta$. Szorozzuk meg ezt az integrált az előbbivel, akkor

$$I^2 = \gamma^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\xi^2+\eta^2)} d\xi d\eta.$$

Ha itt ξ-t és η-t derékszögű koordináták gyanánt fogjuk fel, akkor azt mondhatjuk, hogy az integrációt az egész ξ, η síkra ki kell terjeszteni. Ha a ξ és η helyett áttérünk a ρ és ϕ polárkoordinátákra, akkor $\xi^2 + \eta^2$ helyébe ρ^2 kerül, $d\xi d\eta$ területelem helyébe pedig $\rho d\rho d\phi$. Az integrációt ρ-ra 0-tól ∞-ig és ϕ-re 0-tól 2π-ig kell kiterjeszteni, mert ezekkel a határokkal ismét az egész síkra lesz kiterjesztve az integrál. Tehát

$$I^2 = \gamma^2 \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} e^{-\varrho^2} \rho d\rho d\phi = 2\pi\gamma^2 \int_0^{\infty} e^{-\varrho^2} \rho d\rho = -2\pi\gamma^2 \left[\frac{1}{2} e^{-\varrho^2}\right]_0^{\infty} = \pi\gamma^2,$$

vagyis

$$I = \gamma\sqrt{\pi} = \sqrt{2\pi mkT}.$$

Ezzel nyerjük, hogy

$$\sigma = V(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}. \tag{20.7.5}$$

Bennünket nem annyira az impulzuskomponensek és ezzel a sebességkomponensek eloszlása érdekel, hanem inkább az impulzus, ill. a sebesség abszolút ér-

tékének eloszlása. Állítsuk elő az impulzusvektorokat mint rádiuszvektorokat, melyeket egy pontból mérünk fel és állapítsuk meg, hogy hány impulzusvektor végpontja esik p és $p + \Delta p$ közé. Mivel az eloszlási függvény csak $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = p^2$-től függ, vagyis egy gömbfelületen állandó, ezt a számot megkapjuk, ha az eloszlási függvényt $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$ helyett a p és $p + \Delta p$ sugarú gömbfelületekkel határolt gömbhéj térfogatával, $4\pi p^2 \Delta p$-vel szorozzuk meg. Tehát a (7.1) formulából nyerjük, hogy a térfogategységben levő részek közül azoknak a száma, melyek impulzusának abszolút értéke p és $p + \Delta p$ közé esik

$$\Delta n = \frac{\Delta N}{\Delta x \Delta y \Delta z} = \frac{N}{\sigma} e^{-\frac{1}{2mkT} p^2} 4\pi p^2 \Delta p = \frac{4\pi N e^{-\frac{1}{2mkT} p^2} p^2 \Delta p}{V(2\pi mkT)^{3/2}} .$$

Ha p-ről a $p = mc$ formula alapján áttérünk c-re és ha $\frac{N}{V}$ helyett n-et írunk, ahol n a térfogategységben levő részek száma, akkor

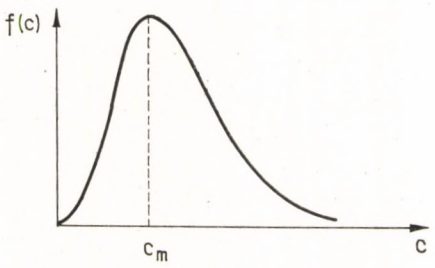
$$\frac{\Delta n}{n} = \frac{4c^2 e^{-\frac{mc^2}{2kT}}}{\sqrt{\pi}\left(\frac{2kT}{m}\right)^{\frac{3}{2}}} \Delta c = f(c)\Delta c .$$

Az $f(c)$ eloszlási függvény n-szerese adja a térfogategységben levő részek közül azoknak a számát, melyek sebességének abszolút értéke c és $c + \Delta c$ közé esik. Amint látható, az eloszlási függvény $c = 0$-ra és $c = \infty$-re eltűnik, tehát közben maximuma van. Ezt könnyen kiszámíthatjuk. Vezessük be a $\sqrt{\frac{2kT}{m}} = \alpha$ jelölést. A maximum helyét a $df/dc = 0$ egyenletből határozhatjuk meg, mely részletesen a következő

$$\frac{df}{dc} = \frac{8c}{\alpha^3\sqrt{\pi}} e^{-\frac{c^2}{\alpha^2}} - \frac{8c^3}{\alpha^5\sqrt{\pi}} e^{-\frac{c^2}{\alpha^2}} = 0.$$

A maximum helyére, c_m-re nyerjük, hogy

$$c_m = \alpha = \sqrt{\frac{2kT}{m}} .$$



54. ábra. A *Maxwell*-féle sebességeloszlási függvény

Tehát azoknak a részeknek a száma a legnagyobb, melyek a $c_m - \frac{\Delta c}{2}$ és $c_m + \frac{\Delta c}{2}$ intervallumba esnek (egyenlő Δc intervallumok esetén).

Fontos még c és c^2 átlagértéke, melyeket $\bar{c}$-vel, ill. $\overline{c^2}$-tel jelölünk. Ezek számára nyerjük

$$\bar{c} = \frac{1}{n}\sum c\Delta n = \int_0^\infty cf(c)dc = \frac{4}{\alpha^3\sqrt{\pi}}\int_0^\infty c^3 e^{-\frac{c^2}{\alpha^2}}dc = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} = \frac{2c_m}{\sqrt{\pi}},$$

$$\overline{c^2} = \frac{1}{n}\sum c^2\Delta n = \int_0^\infty c^2 f(c)dc = \frac{4}{\alpha^3\sqrt{\pi}}\int_0^\infty c^4 e^{-\frac{c^2}{\alpha^2}}dc = \frac{3\alpha^2}{2} = \frac{3c_m^2}{2}.$$

8. §. Ideális gáz állapotegyenlete. A Boltzmann-állandó és gázállandó közti összefüggés

A szabad energia számára (6.18) alatt nyertük

$$F = -kNT \ln \frac{\sigma}{\Delta\tau_0}, \tag{20.8.1}$$

mely formulát részletesebben kiírva adódik:

$$F = -kNT \ln \sigma + kNT \ln \Delta\tau_0,$$

$$F = -kNT \ln \left[V(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}\right] + kNT \ln \Delta\tau_0. \tag{20.8.2}$$

A termodinamikai fejezetben megadott $p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ egyenlet segítségével nyerjük hogy a nyomás

$$p = \frac{kNT}{V}. \tag{20.8.3}$$

1 mól esetében $N = L$, a gázállandó R és $V = v$, tehát

$$pv = kLT = RT.$$

Innen következik, hogy

$$k = \frac{R}{L}, \tag{20.8.4}$$

vagyis k az 1 részecskére (molekulára) vonatkoztatott gázállandó. A számértékeket beírva nyerjük, hogy

$$k = \frac{8{,}313 \cdot 10^7 \text{ erg/grad}}{6{,}02 \cdot 10^{23}} = 1{,}380 \cdot 10^{-16} \frac{\text{erg}}{\text{grad}}. \tag{20.8.5}$$

9. §. Az ekvipartíció tétele és alkamazása a fajhőre

Egy részecske energiája, u, a legtöbb esetben a koordináták négyzetének és az impulzuskomponensek négyzeteinek homogén kifejezése. Jelöljük most a koordinátákat és impulzuskomponenseket egységesen $x_1, x_2, \ldots, x_f$-fel. f tehát a koordináták és impulzuskomponensek számának összege. f-et, vagyis az összes független paraméter számát, melytől az energia függ, nevezzük itt a szabadsági fokok számának, szemben a mechanikával, ahol csak azoknak a független paramétereknek a számát neveztük a szabadsági fokok számának, melyek egy rendszer helyzetét határozzák meg. Ha u $x_1, x_2, \ldots, x_f$ másodfokú homogén függvénye, akkor fennáll EULER tétele, mely szerint

$$x_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} + \ldots + x_f \frac{\partial u}{\partial x_f} = 2u .$$

Egy rendszer összenergiája, ha az összegezésről rögtön integrálra térünk át, a következő

$$U = \int u dN = N \frac{\int\int \ldots \int e^{-\frac{u}{kT}} u dx_1 dx_2 \ldots dx_f}{\int\int \ldots \int e^{-\frac{u}{kT}} dx_1 dx_2 \ldots dx_f} = N \frac{Z}{\sigma}, \qquad (20.9.1)$$

ahol az integráció mindenütt $-\infty$-től $+\infty$-ig terjed és Z-vel a tört számlálóját jelöltük. Z-t EULER tételével a következőképpen alakíthatjuk át

$$\begin{aligned} 2Z = &\int\int \ldots \int e^{-\frac{u}{kT}} x_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} dx_1 dx_2 \ldots dx_f + \\ &+ \int\int \ldots \int e^{-\frac{u}{kT}} x_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} dx_1 dx_2 \ldots dx_f + \\ &+ \ldots + \int\int \ldots \int e^{-\frac{u}{kT}} x_f \frac{\partial u}{\partial x_f} dx_1 dx_2 \ldots dx_f . \end{aligned} \qquad (20.9.2)$$

Az első integrálban az x_1 szerinti integrálást átalakíthatjuk, ugyanis

$$\int e^{-\frac{u}{kT}} x_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} dx_1 = -kT\left[x_1 e^{-\frac{u}{kT}}\right] + kT \int e^{-\frac{u}{kT}} dx_1 .$$

Mivel a határok $-\infty$ és $+\infty$, továbbá u mint x_1^2 növekszik, a jobboldal első tagja eltűnik és csak a második tag marad meg. Ha ezt visszaírjuk a (9.2) alatti első integrálba, akkor az első integrál $kT\sigma$-val lesz egyenlő. Ha a (9.2) alatti második integrálnál az x_2 szerinti integrációt és így tovább az f-edik integrálnál pedig az x_f szerinti integrációt alakítjuk át hasonló módon, akkor kapjuk, hogy

$$2Z = fkT\sigma . \qquad (20.9.3)$$

Z-t visszahelyettesítve (9.1)-be, nyerjük, hogy

$$U = Nf\frac{kT}{2}. \tag{20.9.4}$$

Ez az *energia ekvipartíció tétele*, mely szerint az összenergia, U egyenlő az összes szabadsági fokok száma, Nf, szorozva $\frac{1}{2}kT$-vel. Tehát mindegyik szabadsági fok, amelynek megfelelő koordináta vagy impulzuskomponens az összenergia kifejezésében kvadratikusan szerepel, középértékben $\bar{u} = \frac{1}{2}kT$ nagyságú energiaértékkel járul hozzá az összenergiához.

Ezt a tételt a fajhőn könnyen kontrollálhatjuk. Ugyanis a termodinamika szerint

$$c_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V, \tag{20.9.5}$$

ahol c_V a fajhő 1 mólra vonatkoztatva állandó térfogaton, U pedig az energia szintén 1 mólra vonatkoztatva, tehát

$$U = Lf\frac{kT}{2}. \tag{20.9.6}$$

Ezt behelyettesítve a fenti formulába, nyerjük, hogy

$$c_V = \frac{1}{2}Lfk = \frac{1}{2}fR, \tag{20.9.7}$$

ahol R a gázállandó.

Ideális gázokra a termodinamika szerint fennáll, hogy

$$c_p = c_V + R, \tag{20.9.8}$$

ahol c_p az 1 mólra vonatkoztatott fajhő állandó nyomáson.

Egyatomos gázok esetében egy rész energiája csak a 3 impulzuskomponenstől függ, tehát $f = 3$, vagyis

$$c_V = \frac{3}{2}R, \qquad c_P = \frac{5}{2}R \tag{20.9.9}$$

és

$$c_p/c_V = 5/3. \tag{20.9.10}$$

Ez az összefüggés egyatomos gázokra a legmélyebb hőmérsékletektől a legmagasabb hőmérsékletekig kísérletileg igazolva van.

A kétatomos gáz molekuláit egy merevnek gondolt súlyzómodellel sematizáljuk. (A valóságban a rendszer nem merev, hanem az atomok egymáshoz képest rezeghetnek. Hogy ezek a rezgések szobahőmérsékleten miért nem járulnak hozzá a fajhőhöz, azt a későbbiekben látni fogjuk.) A merevnek képzelt kétatomos mo-

lekula a tranzlációs energián kívül még rotációs energiával bír. A rotációt is tengely szerinti komponensekre kell bontani. Az atomokat összekötő tengely körüli rotáció azonban nem járul hozzá a kinetikus energiához, mert az erre a tengelyre vonatkozó tehetetlenségi momentum a sematikus modellnél 0, a valóságban igen kicsi. Tehát a rotációból csak 2 szabadsági fok adódik, vagyis a merevnek gondolt kétatomos molekula szabadsági fokainak száma 5. Így

$$c_V = \frac{5R}{2}, \qquad c_p = \frac{7R}{2},$$

$$\frac{c_p}{c_V} = \frac{7}{5}. \tag{20.9.11}$$

Szobahőmérsékleten általában ez az összefüggés is ki van elégítve. Ellenben különösen H_2-nél észlelték, hogy csökkenő hőmérséklettel a fajhő is csökken, mégpedig fokozatosan csökken az egyatomos gáznak megfelelő értékre, ami ellentmond az ekvipartíció tételének.

Olyan molekuláknál, melyek több, mint 2 atomból állnak, a rotációnak 3 szabadsági foka van. Ha tehát a molekulát merevnek tekintjük, akkor

$$c_V = \frac{6R}{2}, \qquad c_p = \frac{8R}{2},$$

$$\frac{c_p}{c_V} = \frac{4}{3}. \tag{20.9.12}$$

Szilárd testeknél az atomok, mint látni fogjuk, az egyensúlyi állapotban kvázielasztikus erőkkel vannak kötve. Tehát szilárd testeknél egy atom nemcsak kinetikus, hanem potenciális energiával is bír. A potenciális energia kis kitérések esetén szintén a koordináták kvadratikus függvénye. Tehát szilárd testek esetében a szabadsági fokok száma atomonként 6, így

$$c_V = \frac{6R}{2} = 3R. \tag{20.9.13}$$

Ez a *Dulong—Petit*-féle törvény. Ez szobahőmérsékleten, mint a tapasztalat mutatja, általában fennáll, ellenben a legkönnyebb szilárd testek (pl. gyémánt) már szobahőmérsékleten eltérést mutatnak ettől a törvénytől. Alacsony hőmérsékleten a szilárd testek specifikus hője általában eltér a *Dulong—Petit*-törvénytől, ugyanis a hőmérséklet süllyedésével a specifikus hő csökken és 0 felé tart. Ez is ellentmondásban van az ekvipartíció tételével. Mindez arra utal, hogy az ekvipartíció tétele csak elegendő magas hőmérsékleten van kielégítve. Ez a körülmény mutatja, hogy a klasszikus statisztika módosításra szorul, amit a kvantumelmélet alapján lehetett keresztülvinni.

10. §. A kvantumstatisztika alapjai

Amint az előző §-ban láttuk, az ekvipartíció tétele a fajhő esetében ellentmond a tapasztalatnak. Teljesen helytelen eredményt kapunk akkor is, ha az ekvipartíció tételét egy fekete test sugárzására alkalmazzuk. Meg kell tehát vizsgálnunk, hogy az ekvipartíció tételének levezetésénél tett feltételezések mennyiben állják meg a helyüket és hogy milyen új tételeket kell alapul vennünk egy olyan statisztika megalkotásához, mely a tapasztalattal minden pontban egyezésben van. E feladatot a kvantumelmélet alapján tudjuk csak megoldani. Bár a kvantumelmélet részletes kidolgozása a következő fejezetek feladata lesz, a kvantumstatisztika alapjául szolgáló tényeket már most előre bocsáthatjuk.

A klasszikus *Maxwell–Boltzmann*-statisztikában a $\Delta\tau$ elemi fáziscellák tetszőlegesen kicsinynek tekinthetők (l. a (7.2) formula előtt mondottakat.). Ez a klaszszikus mechanika szerint nyugodtan megtehető, mert egy tömegpont helye és impulzusa egyidejűleg meghatározható, tehát a tömegpont helyzete a fázistérben tetszőleges pontossággal megadható. A kvantumelmélet tanítása szerint azonban egy atomi részecske helye és impulzusa nem vehet fel tetszőleges pontosságú értéket, hanem a helykoordináta, Δx és a megfelelő irányú impulzuskoordináta, Δp_x közepes hibája kielégíti a *Heisenberg*-féle bizonytalansági relációt,

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim h, \tag{20.10.1}$$

ahol h a *Planck*-féle állandó. Ez azt jelenti, hogy ha pl. egy részecske helykoordinátája élesen meghatározott, tehát Δx nagyon kicsi, akkor Δp_x nagy lesz, így az impulzus értéke elmosódottá válik. Hasonló törvények érvényesek az y- és z-koordinátákra is:

$$\Delta y \Delta p_y \gtrsim h,$$

$$\Delta z \Delta p_z \gtrsim h.$$

Összeszorozva ezeket az egyenlőtlenségeket, a fáziscella nagyságára kapjuk, hogy

$$\Delta\tau = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \gtrsim h^3. \tag{20.10.2}$$

Tehát míg a klasszikus fizikában elvileg semmi nem akadályozza, hogy a mikroállapotot élesen meghatározzuk, azaz a fáziscellát tetszőlegesen kicsire válaszszuk, addig a kvantummechanikai mozgás ezt nem teszi lehetővé, hanem a fáziscella minimális értékére egy határt állapít meg. A kvantummechanika pontosan meghatározza, hogy a $\Delta\tau$ fáziscellák a (10.2) egyenlőtlenség jobboldalán fellépő h^3 értékűnek választandók.

A klasszikus *Maxwell–Boltzmann*-statisztika másik alapfeltevése, hogy a részecskék egymástól elvileg megkülönböztethetők. A W termodinamikai valószínűség meghatározásánál ennek alapján jártunk el, azaz ha két különböző fáziscella egy-egy részecskéjét felcseréltük, azt már az eredetitől különböző mikroállapotnak tekintettük. A természetben ténylegesen előforduló részecskék (elektronok, protonok, neutronok, fotonok, stb.) esetében ez a felfogás tarthatatlannak

bizonyult, nincs egyetlen olyan fizikai jelenség sem, amely segítségével pl. két elektront meg tudnánk egymástól különböztetni. A részecskék megkülönböztethetetlensége (más szóval azonossága) alapvető természettörvénynek bizonyult és ezt a statisztika felépítésekor tekintetbe kell vennünk. A mikroállapotot eszerint már az meghatározza, hogy az egyes fáziscellákba hány részecske jut, de nem kell arra ügyelnünk, hogy melyik részecske melyik fáziscellába kerül, mert az azonos típusú részecskéket elvileg sem lehet egymástól megkülönböztetni. Ez természetesen azzal jár, hogy egy makroállapotot megvalósító mikroállapotok összeszámlálása egészen másképp történik a kvantumstatisztikában, mint a klasszszikus statisztikában.

A harmadik kvantumfizikai törvény, amelyet tekintetbe kell vennünk, *Pauli*-elv néven ismeretes. Röviden a következőről van szó. A természetben előforduló részecskék mindegyikének meghatározott spinje van, az ebből adódó impulzusmomentum mindig egészszámú többszöröse az $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$-nek. A részecskéket két nagy csoportba osztályozzuk. Ha a spin párosszámú többszöröse $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$-nek, akkor egészszámú többszöröse lesz $\frac{h}{2\pi}$-nek; az ilyen részecskéket egész-spinűeknek nevezzük. Ha viszont a spin páratlan többszöröse $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$-nek, akkor feles-spinű részecskéről beszélünk. A *Pauli*-elv a feles-spinű részecskékre vonatkozik és azt mondja ki, hogy egy h^3 nagyságú fáziscellában legfeljebb két feles-spinű részecske tartózkodhat és ezek spinjei feltétlenül ellentétes irányúak. Az egész spinű részecskékre ilyen megkötés nincsen.

11. §. A Bose – Einstein statisztika

Az egész-spinű részecskékre vonatkozó statisztika kidolgozása BOSE és EINSTEIN nevéhez fűződik. Innen származik az az elterjedt elnevezés is, hogy az egész-spinű részecskéket *bozonok*nak szokás nevezni. Az alábbiakban a bozonokra vonatkozó kvantumstatisztikát fogjuk tárgyalni.

Tekintsük az x, y, z, p_x, p_y, p_z koordináták által jellemzett fázisteret és osszuk fel h^3 nagyságú cellákra. Azokat a cellákat, melyekhez ugyanazon energiaérték tartozik, egy energiarétegben foglalhatjuk össze. Az i-edik energiaréteg energiáját $u(i)$-vel, a benne levő h^3-cellák számát Z_i-vel jelöljük. Egy mikroállapotot azzal jellemezhetünk, hogy megadjuk az egyes h^3-cellákba jutó részecskék számát, a makroállapotot pedig az egyes energiarétegekbe jutó részecskék száma, az

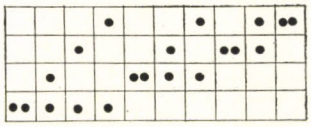
$$N_1, N_2, \ldots, N_i, \ldots \qquad (20.11.1)$$

adatok jellemzik. Első feladatunk a (11.1) makroállapothoz tartozó mikroállapotok összeszámlálása, azaz a W termodinamikai valószínűség megállapítása.

Szorítkozzunk először csak az i-edik energiarétegre és vizsgáljuk meg, hogy az N_i számú részecskét hányféleképp helyezhetjük el a Z_i számú cellában. Ez annyiféleképpen tehető meg, ahány N_i osztályú ismétléses kombinációt tudunk Z_i elemből készíteni. Ezek száma:

$$\binom{N_i + Z_i - 1}{N_i} = \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z_i - 1)!}. \tag{20.11.2}$$

Az 55. ábrán a $Z_i = 4$, $N_i = 2$ esetnek megfelelő mikroállapotokat ábrázoltuk. A



Mikroállapotok sorszáma: 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

55. ábra. Mikroállapotok $Z_i = 4$ és $N_i = 2$ esetén

mikroállapotok száma ebben az esetben $\frac{(2 + 4 - 1)!}{2!\,3!} = 10$ lesz, a (11.1) makroállapothoz tartozó mikroállapotok száma pedig a (11.2) típusú kifejezések szorzata, tehát:

$$W = \prod_i \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z - 1)!}. \tag{20.11.3}$$

A (3.6) alatti *Boltzmann*-összefüggés szerint a rendszer entrópiája $S = k \ln W$, tehát a (11.1) makroállapothoz tartozó entrópia (11.3) alapján a következő lesz:

$$S = k \sum_i [\ln (N_i + Z_i - 1)! - \ln N_i! - \ln (Z_i - 1)!]. \tag{20.11.4}$$

A (3.10) alatti közelítés szerint $\ln n! \approx n(\ln n - 1)$, ha n igen nagy szám. Ennek felhasználásával az entrópiára kapjuk, hogy

$$S = k \sum_i [(N_i + Z_i) \ln (N_i + Z_i) - N_i \ln N_i - Z_i \ln Z_i], \tag{20.11.5}$$

mert Z_i sokkal nagyobb 1-nél és így $Z_i - 1$ helyett Z_i-t írhattunk.

Az egyensúlyi állapotot az entrópia maximális értéke jellemzi, célunk tehát azon $N_1, N_2, \ldots, N_i$ eloszlás meghatározása, melynél S maximális, tehát variációja eltűnik: $\delta S = 0$. Az N_i számok variációjánál azonban tekintettel kell lennünk két mellékfeltételre, nevezetesen arra, hogy az összes részecske száma egy konstans N szám,

$$\sum_i N_i = N \tag{20.11.6}$$

és a rendszer összenergiája pedig egy adott U értékkel egyenlő,

$$\sum_i u(i) N_i = U. \tag{20.11.7}$$

Képezzük a (11.5), (11.6) és (11.7) egyenletek variációit.

$$\delta S = k \sum_i [\ln (N_i + Z_i) - \ln N_i] \, \delta N_i = 0,$$

$$\delta N = \sum_i \delta N_i = 0,$$

$$\delta U = \sum_i u(i) \delta N_i = 0.$$

A *Lagrange*-féle multiplikátor módszerét használva δN kifejezését $(-k\alpha)$-val, δU kifejezését pedig $(-k\beta)$-val szorozzuk és hozzáadjuk δS-hez. Így a következő egyenletet kapjuk

$$\delta(S - k\alpha N - k\beta U) = k \sum_i \left[\ln \frac{N_i + Z_i}{N_i} - \alpha - \beta u(i) \right] \delta N_i = 0 \, . \quad (20.11.8)$$

A δN_i variációk most már egymástól függetlenek lehetnek, ezért mindegyik együtthatójának zérussal kell egyenlőnek lennie.

$$\ln \frac{N_i + Z_i}{N_i} - \alpha - \beta u(i) = 0 \, ,$$

amiből az egyensúlyi állapothoz tartozó N_i kiszámítható:

$$N_i = \frac{Z_i}{e^{\alpha + \beta u(i)} - 1} \, . \quad (20.11.9)$$

Hátra van még az α és β multiplikátorok meghatározása, melyeket a (11.6) és (11.7) mellékfeltételekből kaphatunk meg:

$$\sum_i \frac{Z_i}{e^{\alpha + \beta u(i)} - 1} = N \, , \quad (20.11.10)$$

$$\sum_i \frac{Z_i u(i)}{e^{\alpha + \beta u(i)} - 1} = U \, . \quad (20.11.11)$$

Ez a két egyenlet elvben meghatározza α-t és β-t, mint N és U függvényeit.

Az egyensúlyi állapot entrópiáját (11.9)-nek (11.5)-be való helyettesítésével kapjuk meg:

$$\begin{aligned} S &= k \sum_i \left[(N_i + Z_i) \ln \left(\frac{Z_i}{1 - e^{-\alpha - \beta u(i)}} \right) - N_i \ln \left(\frac{Z_i}{e^{\alpha + \beta u(i)} - 1} \right) - Z_i \ln Z_i \right] \\ &= -k \sum_i [Z_i \ln (1 - e^{-\alpha - \beta u(i)}) + \alpha N_i + \beta u(i) N_i] \\ &= -k \sum_i Z_i \ln (1 - e^{-\alpha - \beta u(i)}) + k\alpha N + k\beta U \, . \end{aligned} \quad (20.11.12)$$

A termodinamikából ismert

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_N = \frac{1}{T} \quad (20.11.13)$$

összefüggés felhasználásával a β multiplikátort kapcsolatba hozhatjuk a T hőmérséklettel. Differenciáljuk (11.12)-t U szerint:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_N = -k \sum_i \frac{Z_i e^{-\alpha-\beta u(i)}}{1-e^{-\alpha-\beta u(i)}} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial U} + u_i \frac{\partial \beta}{\partial U}\right) + kN \frac{\partial \alpha}{\partial U} + kU \frac{\partial \beta}{\partial U} + k\beta .$$

Az első tagban szereplő i-szerinti összegzést a (11.10) és (11.11) egyenletek segítségével könnyen kiszámíthatjuk és láthatjuk, hogy ez az összeg éppen a fenti kifejezésünk második és harmadik tagjának negatívjával egyenlő. Marad tehát, hogy

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_N = k\beta .$$

Összevetve a (11.13) termodinamikai összefüggéssel, a $k\beta = \frac{1}{T}$ egyenletet kapjuk, ebből

$$\beta = \frac{1}{kT} . \tag{20.11.14}$$

A β multiplikátorra tehát ugyanaz az érték adódik, mint a klasszikus statisztikában (l. a (6.15) egyenletet).

A gyakorlatilag fontos esetekben mindig az N részecskeszámot és a T hőmérsékletet ismerjük. Ekkor a (11.9) eloszlásfüggvényt a következő alakban írjuk fel:

$$N_i = \frac{Z_i}{\frac{1}{A} e^{\frac{u(i)}{kT}} - 1} , \tag{20.11.15}$$

ahol bevezettük az $A = e^{-\alpha}$ jelölést. Az A konstanst a (11.10) mellékfeltételből számíthatjuk ki:

$$\sum_i \frac{Z_i}{\frac{1}{A} e^{\frac{u(i)}{kT}} - 1} = N. \tag{20.11.16}$$

Ez az egyenlet egyértelműen meghatározza A-t. Zárt alakban való megadása általában nem lehetséges, ezért A-t csak közelítő módszerekkel tudjuk kiszámítani.

Az A konstans ismeretében a rendszer energiáját (11.11)-ből számíthatjuk:

$$U(N,T) = \sum_i \frac{Z_i u_i}{\frac{1}{A} e^{\frac{u(i)}{kT}} - 1} . \tag{20.11.17}$$

Végül megjegyezzük, hogy az α multiplikátor a részecskeszám állandóságát kifejező mellékfeltétellel került be egyenleteinkbe. Ha eredményeinket olyan rendszerekre alkalmazzuk, ahol a részecskeszám nem állandó, akkor ez a multiplikátor nem lép fel, tehát $\alpha = 0$ és $A = 1$. Ilyen rendszer pl. az üregbe zárt elektromágneses sugárzás, az ún. fotongáz; ugyanis a fotonok állandóan abszorbeálódnak és emittálódnak az üreg falán, tehát számuk ingadozik.

12. §. Az egyatomos Bose-gáz

Alkalmazzuk a *Bose–Einstein*-statisztikát egyatomos ideális gázok esetére. (A 10. §-ban mondottak szerint fel kell tételeznünk, hogy az atomok egész-spinűek.)

Ideális gáz esetében az atomok között nincs semmiféle kölcsönhatás, ezért egy atom energiája a kinetikus energiájával azonos:

$$u = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}. \tag{20.12.1}$$

Az energiakifejezés megállapítása után a következő feladatunk a Z cellaszám kiszámítása lesz. Mivel az u energia csak az impulzus, p abszolút értékétől függ, ezért tekintsünk egy p sugarú és Δp vastagságú gömbréteget az impulzustérben. Ezen gömbrétegen belül az energia állandónak tekinthető. Az impulzus-gömbréteg térfogata $4\pi^2 p^2 \Delta p$-vel egyenlő, a megfelelő fázistérfogatot pedig úgy kapjuk meg, ha ezt még megszorozzuk az x, y, z koordinátáknak megfelelő térfogattal, azaz a gáz V térfogatával. A fázistérfogat tehát $4\pi V p^2 \Delta p$ lesz. Ebben a fázistérfogatban annyi elemi cella van, ahányszor a h^3 cellatérfogat elfér a fenti fázistérfogatban. A cellák száma tehát

$$Z = \frac{4\pi V p^2 \Delta p}{h^3}. \tag{20.12.2}$$

Azon atomok számát, melyek impulzusa p és $p + \Delta p$ közé esik, (11.15)-ből kapjuk meg, ha oda (12.1)-et és (12.2)-t behelyettesítjük

$$\Delta N = \frac{4\pi V}{h^3} \frac{p^2}{\frac{1}{A} e^{\frac{p^2}{2mkT}} - 1} \Delta p. \tag{20.12.3}$$

Ha ezt összegezzük valamennyi impulzus-gömbrétegre, úgy az N atomszámot kell megkapnunk. Mivel a Δp vastagság tetszőlegesen kicsire választható, ezért összegezés helyett integrálásra térhetünk át

$$N = \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^\infty \frac{p^4}{\frac{1}{A} e^{\frac{p^2}{2mkT}} - 1} dp. \tag{20.12.4}$$

Ez az egyenlet lesz az általánosan érvényes (11.16) megfelelője és ebből kell az A konstanst kiszámítani.

Írjuk fel még az energia és az entrópia kifejezését. Az energiát (11.17)-ből számítjuk, felhasználva a (12.1) és (12.2) egyenleteket és az i szerinti összegezés he-

lyett ismét p szerinti integrálást vezetve be

$$U = \frac{4\pi V}{2mh^3} \int_0^\infty \frac{p^4}{\frac{1}{A} e^{\frac{p^2}{2mkT}} - 1} dp . \tag{20.12.5}$$

Az entrópia általános képletét a *Bose–Einstein*-statisztikában (11.12) adja meg. Az egyatomos gáz entrópiájának kiszámításához ismét a (12.1) és (12.2) képleteket használjuk fel, továbbá, tekintetbe vesszük az $A = e^{-\alpha}$ és $\beta = 1/kT$ összefüggéseket. Ily módon kapjuk, hogy

$$S = -k \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^\infty \ln(1 - Ae^{-\frac{p^2}{2mkT}}) p^2 dp + k\alpha N + \frac{1}{T} U . \tag{20.12.6}$$

A (12.4), (12.5) és (12.6) egyenletek képezik az egyatomos *Bose*-gáz termodinamikájának alapjait. Ezek a kifejezések egzaktul pontosak, alkalmazásukat azonban nehézkessé teszi, hogy a bennük fellépő integrálok nem adhatók meg zárt alakban.

A következőkben N, U és S képleteinek közelítő kiértékelésével fogunk foglalkozni. Először az $A \ll 1$ határesetet nézzük. Látni fogjuk, hogy ebben a határesetben eredményeink átmennek a klasszikus *Maxwell–Boltzmann*-statisztika formuláiba. Ha $A \ll 1$, úgy (12.4) nevezőjében az $1/A$-t tartalmazó tag sokkal nagyobb lesz, mint a mellette szereplő (-1), ezért ez utóbbit elhagyjuk. Ezzel a közelítéssel a részecskeszámra kapjuk, hogy

$$N = \frac{4\pi V}{h^3} A \int_0^\infty p^2 e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp .$$

Ha itt bevezetjük az

$$x = \frac{p}{\sqrt{2mkT}} \tag{20.12.7}$$

helyettesítést, akkor írhatjuk, hogy

$$N = \frac{4\pi V}{h^3} A(2mkT)^{3/2} \int_0^\infty x^2 e^{-x^2} dx .$$

Az itt fellépő integrált parciális integrálással átalakíthatjuk egy, a 7. §-ban már kiszámított integrálkifejezéssé. Ilymódon az integrálra a $\frac{\sqrt{\pi}}{4}$ értéket kapjuk és így eredményünk a következő lesz:

$$N = \frac{V}{h^3} A(2\pi mkT)^{3/2} . \tag{20.12.8}$$

Ebből azonnal megkapjuk az A konstans értékét:

$$A = \frac{Nh^3}{V}(2\pi mkT)^{-\frac{3}{2}}. \qquad (20.12.9)$$

A-nak ezt a kifejezését az $A \ll 1$ feltevéssel vezettük le. Természetesen csak akkor használhatjuk ezt a közelítést, ha a számértékek (12.9)-be való helyettesítése valóban igazolja az A-ra tett feltevést. Mindenesetre láthatjuk, hogy A ezen kifejezése arányos az N/V részecskesűrűséggel és fordítva arányos a T hőmérséklet 3/2-ik hatványával. Közelítésünk tehát kis sűrűségek és magas hőmérsékletek esetén érvényes.

Az U energiát a fentiekhez hasonló módszerrel határozzuk meg. (12.5) nevezőjében az $\frac{1}{A}$-t tartalmazó tag mellett elhagyjuk a (-1)-et és írjuk, hogy

$$U = \frac{4\pi V}{2mh^3} A \int_0^\infty p^4 e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp.$$

Ismét a (12.7) helyettesítést alkalmazzuk, ezzel U kifejezése a következőképpen alakul

$$U = \frac{4\pi V}{2mh^3} (2mkT)^{5/2} \int_0^\infty x^4 e^{-x^2} dx.$$

Az integrál értékére parciális integrálással való átalakítás után $\frac{3\pi}{\sqrt{8}}$ adódik. Ha ezt beírjuk U képletébe, úgy az energiára az

$$U = \frac{3V}{4\pi mh^3} A(2\pi mkT)^{3/2}$$

kifejezést kapjuk. Végül, ha felhasználjuk az A konstansra kapott (12.9) eredményünket, úgy

$$U = \frac{3}{2} NkT. \qquad (20.12.10)$$

Ugyanezt az eredményt kaptuk egyatomos gázokra az ekvipartíció tétele alapján is. A *Bose–Einstein*-statisztika tehát határesetként kiadja az ekvipartíció tételét. Közelítésünk a 7. §-ban tárgyalt sebességeloszlási függvényt is visszaadja. (12.3) nevezőjében csak az $\frac{1}{A}$-t tartalmazó tagot tartva meg, kapjuk:

$$\Delta N = \frac{4\pi V}{h^3} A e^{-\frac{p^2}{2mkT}} p^2 \Delta p.$$

Beírva az A konstansra kapott (12.9) kifejezést, ΔN a következő lesz:

$$\Delta N = \frac{4\pi N e^{-\frac{p^2}{2mkT}} p^2}{(2\pi mkT)^{3/2}} \Delta p .$$

Végül a $p = mc$ összefüggés felhasználásával írhatjuk, hogy

$$\frac{\Delta N}{N} = \frac{4c^2 e^{-\frac{mc^2}{2kT}}}{\sqrt{\pi}\left(\frac{2kT}{m}\right)^{3/2}} \Delta c = f(c)\Delta c .$$

Ez teljesen megegyezik a 7. §-ban nyert eredményünkkel.

Térjünk át az entrópia kiszámítására. (12.6)-ban $A \ll 1$ esetén a következő közelítést alkalmazhatjuk:

$$\ln\left(1 - Ae^{-\frac{p^2}{2mkT}}\right) \approx - Ae^{-\frac{p^2}{2mkT}} ,$$

mert $|x| \ll 1$ esetén $\ln(1 - x) \approx -x$ lesz. Ennek figyelembevételével kapjuk, hogy

$$S = k\frac{4\pi V}{h^3} A \int_0^\infty e^{-\frac{p^2}{2mkT}} p^2 dp + k\alpha N + \frac{1}{T} U .$$

Az itt fellépő integrál ugyanaz, mint ami N kifejezésében is fellépett, ezért S első tagja Nk-val lesz egyenlő. Ha még tekintetbe vesszük (12.10)-et, úgy S kifejezése a következő lesz:

$$S = Nk\left(\frac{5}{2} + \alpha\right) . \qquad (20.12.11)$$

Írjuk be ide α képletét. Mivel $A = e^{-\alpha}$, ezért

$$\alpha = -\ln A = \ln\left(\frac{1}{A}\right)$$

lesz és ha A-nak (12.9)-ben megadott értékét felhasználjuk, úgy

$$\alpha = \ln\left[\frac{V}{Nh^3}(2\pi mkT)^{3/2}\right] . \qquad (20.12.12)$$

Ezt az eredményt az entrópia kifejezésébe helyettesítve:

$$S = Nk\left[\frac{5}{2} + \ln\frac{V}{Nh^3}(2\pi mkT)^{3/2}\right]$$

$$= Nk \ln\left[\frac{Ve^{5/2}}{Nh^3}(2\pi mkT)^{3/2}\right] .$$

Ezt a következőképpen is írhatjuk

$$S = Nk\left[\ln V + \frac{3}{2}\ln T - \ln N + b\right], \qquad (20.12.13)$$

ahol

$$b = \frac{5}{2} + \frac{3}{2}\ln\left(\frac{2\pi mk}{h^2}\right). \qquad (20.12.14)$$

Hasonlítsuk össze az entrópiára nyert (12.13) kifejezésünket a fenomenologikus termodinamikának az ideális gázra vonatkozó képletével! Ha (12.13)-at 1 mól mennyiségre alkalmazzuk, úgy $N = L$ lesz, és az R gázállandó, valamint az M molekulasúly

$$R = Lk \text{ és } M = Lm$$

kifejezéseit felhasználva írhatjuk, hogy 1 mól gáz entrópiája

$$S = R\left[\ln\frac{V}{M} + \frac{3}{2}\ln T + b + \ln m\right].$$

Ha a fenomenologikus termodinamika (17.2.9) entrópiakifejezését 1 mól-ra alkalmazzuk és a fajhőre a (16.5.19) szerinti $c_V = \frac{3}{2}\frac{R}{M}$ kifejezést fogadjuk el, úgy a következő kifejezéshez jutunk

$$S = R\left[\ln\frac{V}{M} + \frac{3}{2}\ln T + \frac{M}{R}\sigma\right].$$

E két entrópiakifejezés összehasonlítása lehetőséget ad a σ entrópiakonstans megállapítására. $\frac{M}{R} = \frac{m}{k}$ miatt írhatjuk, hogy

$$\frac{m}{k}\sigma = b + \ln m.$$

Beírva b-nek (12.14) kifejezését, kapjuk, hogy

$$\sigma = \frac{k}{m}\left[\frac{5}{2} + \ln\frac{(2\pi k)^{3/2} m^{5/2}}{h^3}\right]. \qquad (20.12.15)$$

Az entrópiakonstans értékét a fenomenologikus termodinamikában nem tudtuk megadni. A kvantumstatisztika alapján σ kiszámíthatóvá vált és mint látható, tartalmazza a h^3 elemi fáziscella nagyságot, ami a klasszikus fizikában határozatlan érték volt.

Végül írjuk fel a gáz szabad energiájának kifejezését. A termodinamikában megbeszélt $F = U - TS$ kifejezésbe (12.10)-et és (12.13)-at beírva kapjuk, hogy

$$F = NkT\left[\frac{3}{2} + \ln N - \ln V - \frac{3}{2}\ln T - b\right]. \qquad (20.12.16)$$

b képletének behelyettesítése után

$$F = NkT\left[\ln N - \ln V - \frac{3}{2}\ln T - \frac{3}{2}\ln\left(\frac{2\pi mk}{h^2}\right) - 1\right]. \qquad (20.12.17)$$

13. §. Az ideális gáz elfajulása alacsony hőmérsékleteken

Az előző §-ban láttuk, hogy a *Bose–Einstein*-statisztika az $A \ll 1$ közelítésben átmegy a klasszikus *Maxwell–Boltzmann*-statisztikába és így visszaadja az ideális gáztörvényeket. Ez azonban egy szélsőséges határeset. Ha pontosabban számolunk, akkor már az ideális gáztörvényektől eltérő eredményeket kapunk és ezek a pontosabb formulák fogják leírni a gáz viselkedését alacsonyabb hőmérsékleteken.

Az alábbiakban szintén fel fogjuk tételezni, hogy $A < 1$, de az A szerinti sorfejtésnél nem állunk meg az első tagnál, hanem a magasabbrendű tagokat is figyelembe vesszük. Először foglalkozzunk a (12.4) és (12.5) integrálok nevezőjében előforduló kifejezéssel, melyet a következő alakban is felírhatunk:

$$\frac{1}{\frac{1}{A}e^{\frac{p^2}{2mkT}} - 1} = \frac{Ae^{-\frac{p^2}{2mkT}}}{1 - Ae^{-\frac{p^2}{2mkT}}}.$$

Ez a kifejezés $\frac{Z}{1-Z}$ alakú tört, ahol feltevéseink értelmében $0 < Z < 1$. E törtkifejezés hatványsora az elemekből jól ismert,

$$\frac{Z}{1-Z} = \sum_{\nu=1}^{\infty} Z^{\nu},$$

tehát N és U integráljának nevezőjét az alábbi hatványsorok adják meg:

$$\frac{1}{\frac{1}{A}e^{-\frac{p^2}{2mkT}} - 1} = \sum_{\nu=1}^{\infty} A^{\nu}e^{-\frac{\nu p^2}{2mkT}}. \qquad (20.13.1)$$

Írjuk ezt be először az N részecskeszám (12.4) képletébe:

$$N = \frac{4\pi V}{h^3}\sum_{\nu=1}^{\infty} A^{\nu}\int_0^{\infty} e^{-\frac{\nu p^2}{2mkT}} p^2 dp. \qquad (20.13.2)$$

Az integrál kiszámítása az

$$x = \sqrt{\frac{\nu}{2mkT}}\,p$$

helyettesítéssel történik, mellyel kapjuk, hogy

$$\int_0^\infty e^{-\frac{vp^2}{2mkT}} p^2 dp = \left(\frac{2mkT}{v}\right)^{3/2} \int_0^\infty e^{-x^2} x^2 dx .$$

A jobboldalon fellépő integrállal az előző §-ban már találkoztunk és tudjuk, hogy értéke $\frac{\sqrt{\pi}}{4}$-gyel egyenlő. Behelyettesítve (13.2)-be, N-re a következő kifejezés adódik:

$$N = \frac{V}{h^3}(2\pi mkT)^{3/2} \sum_{v=1}^{\infty} \frac{A^v}{v^{3/2}} . \tag{20.13.3}$$

Ha az összegből csak az első, $v = 1$-nek megfelelő tagot tartjuk meg, akkor visszakapjuk az előző (12.8) formulánkat, ami a klasszikus közelítésnek felel meg. Ha az összegből több tagot, tehát A magasabb hatványait is megtartjuk, úgy a klaszszikus statisztikán túlmenő pontosságot érünk el, amivel jellegzetesen kvantummechanikai effektusokat írhatunk le.

A (13.3) formulában fellépő összeg csak az A konstans értékétől függ. Vezessük be a következő jelölést:

$$\phi(A) = \sum_{v=1}^{\infty} \frac{A^v}{v^{3/2}} . \tag{20.13.4}$$

Ezzel a részecskeszám így írható:

$$N = \frac{V}{h^3}(2\pi mkT)^{3/2} \phi(A). \tag{20.13.5}$$

Az energiát hasonló módszerrel számítjuk. (13.1)-et U (12.5) képletébe téve nyerjük

$$U = \frac{4\pi V}{2mh^3} \sum_{v=1}^{\infty} A^v \int_0^\infty e^{-\frac{vp^2}{2mkT}} p^4 dp.$$

Ha ismét alkalmazzuk az

$$x = \sqrt{\frac{v}{2mkT}}\, p$$

helyettesítést, akkor az U képletében fellépő integrál a következőképpen alakul

$$\int_0^\infty e^{-\frac{vp^2}{2mkT}} p^4 dp = \left(\frac{2mkT}{v}\right)^{5/2} \int_0^\infty e^{-x^2} x^4 dx.$$

Az x szerinti integrál értéke az előző § szerint $\frac{3\sqrt{\pi}}{8}$ és ennek figyelembevételé-

vel

$$U = \frac{3VkT}{h^3}(2\pi mkT)^{3/2} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{A^\nu}{\nu^{5/2}}. \tag{20.13.6}$$

Az itt fellépő ν szerinti összeget $\psi(A)$-val jelöljük:

$$\psi(A) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{A^\nu}{\nu^{5/2}}. \tag{20.13.7}$$

Ezzel

$$U = \frac{3VkT}{2h^3}(2\pi mkT)^{3/2}\psi(A),$$

(13.5) tekintetbevételével az energia végső kifejezése a következő lesz

$$U = \frac{3}{2}NkT\,\frac{\psi(A)}{\phi(A)}. \tag{20.13.8}$$

Hasonló módszerrel számítjuk ki az entrópiát is. (12.6) első tagjában szereplő logaritmus hatványsora

$$\ln(1 - Z) = -\sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{Z^\nu}{\nu}$$

alakban írható fel, tehát az entrópiakifejezésben a következő hatványsor fog fellépni:

$$\ln\left(1 - Ae^{-\frac{p^2}{2mkT}}\right) = -\sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{A^\nu}{\nu} e^{-\frac{\nu p^2}{2mkT}}. \tag{20.13.9}$$

(12.6) első tagjában fellépő integrált az előzőekben használt helyettesítéssel tudjuk kiszámítani

$$\int_0^\infty \ln\left(1 - Ae^{-\frac{p^2}{2mkT}}\right) p^2 dp = -\sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{A^\nu}{\nu} \int_0^\infty e^{-\frac{\nu p^2}{2mkT}} p^2 dp =$$

$$= -\sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{A^\nu}{\nu} \left(\frac{2mkT}{\nu}\right)^{3/2} \int_0^\infty e^{-x^2} x^2 dx =$$

$$= -\frac{\sqrt{\pi}}{4}(2mkT)^{3/2} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{A^\nu}{\nu^{5/2}} = -\frac{\sqrt{\pi}}{4}(2mkT)^{3/2}\psi(A).$$

Ezt behelyettesítve (12.6)-ba, kapjuk, hogy

$$S = \frac{kV}{h^3}(2mkT)^{3/2}\psi(A) + k\alpha N + \frac{1}{T}U. \tag{20.13.10}$$

Felhasználva a (13.5) és (13.8) eredményeinket, az entrópiára a következő kifejezés adódik:

$$S = Nk\left(\alpha + \frac{5}{2}\frac{\psi(A)}{\phi(A)}\right),$$

vagy

$$S = -Nk\left(\ln A - \frac{5}{2}\frac{\psi(A)}{\phi(A)}\right). \tag{20.13.11}$$

A gömbölyű zárójeles kifejezés csak az A mennyiség függvénye, melyet viszont adott N, V és T esetén (13.5)-ből kell kiszámítanunk.

Az eddigi tárgyalásunk elvben tetszőleges pontosságúvá tehető, ha a (13.4) és (13.7) összegekben elég sok tagot figyelembe veszünk. A továbbiakban meg fogunk elégedni a másodrendű tagokkal, azaz A-nak harmadik és magasabb hatványait elhagyjuk ϕ és ψ kifejezéséből. A következő közelítést vezetjük tehát be

$$\phi(A) = A + \frac{A^2}{2\sqrt{2}} \quad \text{és} \quad \psi(A) = A + \frac{A^2}{4\sqrt{2}}. \tag{20.13.12}$$

Továbbá

$$\frac{\phi(A)}{\psi(A)} = \frac{A + \frac{A^2}{2\sqrt{2}}}{A + \frac{A^2}{4\sqrt{2}}} = \frac{1 + \frac{A}{2\sqrt{2}}}{1 + \frac{A}{4\sqrt{2}}}.$$

A nevezőt A-szerint sorba fejtve kapjuk

$$\frac{\phi(A)}{\psi(A)} = \left(1 + \frac{A}{2\sqrt{2}}\right)\left(1 - \frac{A}{4\sqrt{2}}\right) = 1 + \frac{A}{4\sqrt{2}}.$$

Helyettesítsünk be az energia és az entrópia kifejezéseibe:

$$U = \frac{3}{2}NkT\left(1 + \frac{A}{4\sqrt{2}}\right),$$

$$S = -Nk\left(\ln A - \frac{5}{2} - \frac{5A}{8\sqrt{2}}\right). \tag{20.13.13}$$

Határozzuk meg, hogy milyen lesz a gáz állapotegyenlete a (13.13) közelítések esetén. Elsősorban képezzük a gáz szabad energiájának kifejezését. A termodinamikában láttuk, hogy

$$F = U - TS.$$

(13.13) alapján a szabad energia kifejezése a következő lesz:

$$F = NkT\left(\ln A - 1 - \frac{A}{4\sqrt{2}}\right). \tag{20.13.14}$$

A termodinamika (18.2.17) egyenlete szerint a gáz nyomása

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V},$$

ahol a differenciálást konstans N és konstans T mellett kell elvégeznünk. Mivel a szabad energia kifejezése a V térfogatot csak az A paraméteren keresztül tartalmazza, ezért írhatjuk, hogy

$$p = -NkT\left(1 - \frac{A}{4\sqrt{2}}\right)\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial V}. \tag{20.13.15}$$

Az A paraméter behelyettesítésénél megelégedhetünk a (12.9) közelítéssel, mely szerint

$$A = \frac{Nh^3}{V(2\pi mkT)^{3/2}}$$

és

$$\frac{\partial A}{\partial V} = -\frac{Nh^3}{V^2(2\pi mkT)^{3/2}} = -\frac{A}{V}.$$

Ennek alapján (13.15) a következő állapotegyenletet szolgáltatja:

$$pV = NkT\left(1 - \frac{Nh^3}{V(2\pi mkT)^{3/2}}\right). \tag{20.13.16}$$

Ez az állapotegyenlet a gömbölyű zárójelben fellépő korrekciós faktor miatt eltér a 8. §-ban megismert $pV = NkT$ ideális gáztörvénytől. Az eltérés annál jelentősebb, minél nagyobb az $\frac{N}{V}$ sűrűség és minél alacsonyabb a T hőmérséklet. A $pV = NkT$ törvénytől való eltérést *gázelfajulás*nak nevezzük. A gázelfajulás mértéke a

$$\lambda = \frac{Nh^3}{V(2\pi mkT)^{3/2}}$$

mennyiség, melyet *elfajulási tényező*nek nevezünk. Minél nagyobb λ, annál nagyobb mértékű lesz a gáz elfajulása. A fenti levezetésnél feltételeztük, hogy az elfajulás kicsi, azaz $\lambda \ll 1$. Nagyobb mértékben elfajult gázoknál a (13.16) állapotegyenletben a gömbölyű zárójel λ magasabb hatványait is tartalmazza.

14. §. A plazma

Nem túlságosan magas hőmérsékleteken az anyag háromféle halmazállapotban, szilárd, cseppfolyós és gáznemű állapotban fordulhat elő. Ekkor az anyag elemi építőköveinek az atomok, ill. molekulák tekinthetők. Igen magas hőmérsékleten az atomok egy részének kinetikus energiája túllépi az atom ionizációs energiájá-

nak értékét és ekkor az atomok ütközésekor ionizáció, vagyis elektronok leválása következik be. Ilyen körülmények között az anyag semleges atomokon kívül pozitív ionokat és elektronokat is fog tartalmazni. Az atomokból, ionokból és elektronokból álló gázkeveréket *plazmá*nak nevezzük és sokszor a negyedik halmazállapotnak szokták tekinteni.

Határozzuk meg, hogy egy adott T hőmérsékleten mekkora lesz az anyag ionizációjának mértéke. Jelöljük a plazma térfogatát V-vel, és a benne levő atomok és pozitív ionok együttes számát N-nel. A semleges atomok száma legyen N_a, akkor az ionok száma $N_i = N - N_a$ lesz. A többszörös ionizáció lehetőségétől eltekintünk, ekkor az elektronok száma nyilván ugyanannyi, mint az ionoké, azaz $N_e = N - N_a$. Az *ionizáció foka* alatt az ionok számának viszonyát értjük az atomok és ionok együttes számához. Ha az ionizációs fokot y-nal jelöljük, úgy

$$y = \frac{N - N_a}{N} = 1 - \frac{N_a}{N}. \tag{20.14.1}$$

Ebből

$$N_a = (1 - y)N \quad \text{és} \quad N_i = N_e = yN. \tag{20.14.2}$$

A plazma F szabad energiája az atomok, ionok és az elektronok szabad energiáiból tevődik össze. Ha ezeket rendre F_a, F_i és F_e-vel jelöljük, úgy

$$F = F_a + F_i + F_e. \tag{20.14.3}$$

Elég magas hőmérsékleten az egyes komponensek szabad energiáira elfogadhatjuk az ideális gázra érvényes (12.16) kifejezést

$$F_a = N_a kT \left[\frac{3}{2} + \ln N_a - \ln V - \frac{3}{2} \ln T - b_a \right],$$

$$F_i = N_i kT \left[\frac{3}{2} + \ln N_i - \ln V - \frac{3}{2} \ln T - b_i \right],$$

$$F_e = N_e kT \left[\frac{3}{2} + \ln N_e - \ln V - \frac{3}{2} \ln T - b_e \right].$$

Az itt fellépő b_a, b_i és b_e entrópiakonstansokat (12.17)-ből kaphatjuk meg, ha abba rendre az m_a atom-, m_i ion- és az m_e elektrontömeget helyettesítjük be.

(14.2) tekintetbevételével a teljes szabad energia:

$$F = NkT \left\{ (1 + y) \left[\frac{3}{2} + \ln N - \ln V - \frac{3}{2} \ln T \right] + (1 - y) \ln(1 - y) + \right.$$

$$\left. + 2y \ln y - (1 - y) b_a - y(b_i + b_e) \right\}. \tag{20.14.4}$$

A termodinamikában megbeszéltek szerint a termikus egyensúly feltétele az, hogy az F szabad energia minimális legyen. Differenciáljuk F-et y szerint és a differen-

ciálhányadost tegyük zérussal egyenlővé

$$\frac{dF}{dy} = NkT\left\{\left[\frac{3}{2} + \ln N - \ln V - \frac{3}{2}\ln T\right] - \ln(1-y) + 2\ln y + 1 + b_a - (b_i + b_e)\right\}.$$

Ebből

$$\ln\frac{y^2}{1-y} = -\left[\frac{5}{2} + \ln N - \ln V - \frac{3}{2}\ln T\right] - b_a + (b_i + b_e).$$

Vagyis

$$\ln\frac{y^2}{1-y} = \ln\left(\frac{VT^{3/2}}{N}\right) - \frac{5}{2} + b_i + b_e - b_a. \tag{20.14.5}$$

A gáz *ionizációs energiájának* azt a munkát nevezzük, amit az N db semleges atomból álló gázon reverzibilisen végeznünk kell ahhoz, hogy minden atomja ionizálódjon, azaz N db iont kapjunk. Az állandó hőmérsékleten végzett reverzibilis munka a szabad energia megváltozásával egyenlő (l. a tizennyolcadik fejezet 1. §-át). Az ionizációs energia a (12.16) szabad energia-képlet szerint a következő lesz:

$$NkT\left[\frac{3}{2} + \ln N - \ln V - \frac{3}{2}\ln T - b_i\right] - NkT\left[\frac{3}{2} + \ln N - \ln V - \frac{3}{2}\ln T - b_a\right] =$$

$$= NkT(b_a - b_i).$$

Az 1 mól gázra vonatkoztatott ionizációs energiát I-vel jelöljük. 1 mól esetén $N = L$, és mivel Lk az R gázállandóval egyenlő, ezért

$$I = RT(b_a - b_i). \tag{20.14.6}$$

Ennek tekintetbevételével a (14.5) egyensúlyi feltétel a következőképpen alakul

$$\ln\frac{y^2}{1-y} = \ln\left(\frac{VT^{3/2}}{N}\right) - \frac{I}{RT} + \left(b_e - \frac{5}{2}\right), \tag{20.14.7}$$

A b_e entrópiakonstansra nyert (12.14) formula felhasználásával kapjuk, hogy

$$\ln\frac{y^2}{1-y} = \ln\left[\frac{V}{N}\frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3}\right] - \frac{I}{RT},$$

vagyis

$$\frac{y^2}{1-y} = \frac{V}{N}\frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3}\, e^{-\frac{I}{RT}}. \tag{20.14.8}$$

Az ideális gáz (8.3) állapotegyenletét az atomok, ionok és elektronok esetére alkal-

mazva kapjuk, hogy az egyes komponensek parciális nyomása:

$$p_a = \frac{N_a kT}{V} = (1-y)\frac{NkT}{V},$$

$$p_i = \frac{N_i kT}{V} = y\frac{NkT}{V},$$

$$p_e = \frac{N_e kT}{V} = y\frac{NkT}{V}.$$

A plazma teljes nyomása

$$p = p_a + p_i + p_e = (1+y)\frac{NkT}{V}. \tag{20.14.9}$$

Ezt felhasználva kapjuk, hogy

$$\frac{y^2}{1-y^2} = \frac{(2\pi m_e)^{3/2}(kT)^{5/2}}{ph^3} e^{-\frac{I}{RT}}. \tag{20.14.10}$$

Ebből az egyenletből a T hőmérsékletű és p nyomású plazma y ionizációs foka kiszámítható. Az ionizáció mértékének meghatározásánál, mint láttuk, lényeges volt a b_e entrópiakonstans konkrét értékének ismerete. A kvantumstatisztika az entrópiakonstans megadásával lényegesen bővíteni tudja a termodinamikai eredmények alkalmazási körét és több olyan jelenség tárgyalását teszi lehetővé, melyre a fenomenologikus termodinamika vagy a klasszikus *Maxwell–Boltzmann*-statisztika keretei között nincs lehetőség.

Végül megemlítjük, hogy a plazmafizikában gyakorlatilag mindig teljesül a

$$T \ll \frac{I}{R}$$

feltétel, amikor is

$$e^{-\frac{I}{RT}} \ll 1.$$

Ilyen esetben az y ionizációs fok is nagyon kicsi lesz és (14.10) baloldalán a nevezőben y^2 elhagyható. Ekkor y-ra a következő kifejezést kapjuk

$$y = \frac{(2\pi m_e)^{3/4}(kT)^{5/4}}{p^{1/2}h^{3/2}} e^{-\frac{I}{2RT}}. \tag{20.14.11}$$

Ez az ún. *Saha*-képlet, melynek igen széles alkalmazási köre van. Ha pl. egy csillag légkörében két különböző ionizációs energiájú atomra sikerül az y ionizációt spektroszkópiailag megállapítani, úgy lehetőség nyílik a p nyomás és a T hőmérséklet meghatározására. A csillagok légkörében uralkodó viszonyokról ezen az úton nyerhetünk ismereteket.

15. §. A hőmérsékleti sugárzás

Alkalmazzuk a *Bose–Einstein*-statisztikát egy V térfogatú üregbe zárt elektromágneses sugárzás esetére. Feltételezzük, hogy az elektromágneses tér és az edény falai között termikus egyensúly alakul ki. Ebben az esetben az üreg belsejében az elektromágneses hullámok rendezetlenül haladnak és a sugárzás teljes energiáját, valamint az energiának a különböző frekvenciák szerinti eloszlását az üreg falának hőmérséklete egyértelműen meghatározza. Az így kialakuló sugárzást *hőmérsékleti sugárzás*nak nevezzük.

A statisztikus fizika törvényei függetlenek attól, hogy milyen elemekből épül fel a rendszer. Az előző eredményeink nemcsak atomokból felépülő gázra, hanem fotonokból felépülő sugárzásra is alkalmazhatók. Mivel a fotonokról tudjuk, hogy egész-spinű részecskék, ezért a fotongázra a *Bose–Einstein*-statisztikát alkalmazzuk. Minthogy a fotonok száma nem állandó (az üreg fala emittál és elnyel fotonokat), ezért az egyensúlyi állapot megállapításánál a (11.6) mellékfeltétel elesik és (11.9)-ben az α *Lagrange*-multiplikátor helyébe zérust teszünk. A β *Lagrange*-multiplikátorra érvényben marad a (11.14) kifejezés, tehát a (11.9) eloszlás fotongáz esetén a következőképpen alakul:

$$N_i = \frac{Z_i}{e^{\frac{u(i)}{kT}} - 1}. \tag{20.15.1}$$

A foton energiájának és impulzusának a sugárzás frekvenciájától való függését a tizenkilencedik fejezet 16. §-ban már megbeszéltük. (19.16.3) és (19.16.5) szerint a foton energiája és impulzusa

$$u = h\nu \quad \text{és} \quad p = \frac{h\nu}{c}. \tag{20.15.2}$$

A p impulzushoz tartozó energiarétegben levő cellák száma (12.2) szerint

$$\dot{Z} = \frac{4\pi V p^2 \Delta p}{h^3} = \frac{4\pi V \nu^2 \Delta \nu}{c^3}. \tag{20.15.3}$$

Tudjuk azonban, hogy egy foton állapotát az impulzusa nem határozza meg egyértelműen, hanem meg kell adnunk a polarizációs állapotát is. Egy adott impulzushoz két, lineárisan független polarizált hullám tartozik, tehát minden impulzushoz két különbözően polarizált foton tartozik. Ezért a (15.1) fotonszámot meg kell kétszereznünk. Ilymódon a ν és $\nu + \Delta\nu$ frekvenciák közé eső fotonok száma a következő lesz:

$$\Delta N = \frac{2Z}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} = \frac{8\pi V}{c^3} \frac{\nu^2}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \Delta\nu. \tag{20.15.4}$$

A ν és $\nu + \Delta\nu$ frekvenciasávba jutó energiát pedig úgy kapjuk meg, ha a ΔN foton-

számot megszorozzuk egyetlen foton $h\nu$ energiájával

$$\Delta U = h\nu \Delta N = \frac{8\pi V h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \Delta \nu . \tag{20.15.5}$$

Az egységnyi térfogatra és egységnyi frekvenciaintervallumra vonatkoztatott energiát frekvenciaeloszlási függvénynek nevezzük

$$\rho(\nu) = \frac{\Delta U}{V \Delta \nu} .$$

(15.5) szerint a frekvenciaeloszlási függvény

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} . \tag{20.15.6}$$

Ez az ún. *Planck*-törvény, melyet PLANCK 1900-ban vezetett le és ez volt az első olyan törvény, mely kívül esett a klasszikus fizika területén. A *Planck*-féle sugárzási törvény teljes egyezésben van a tapasztalattal. A megfigyelt frekvenciaeloszlásnak és a (15.6) formulának egybevetéséből PLANCK meghatározta a *Planck*-állandót és a $h = 6{,}62 \cdot 10^{-27}$ ergs értéket kapta. A ma elfogadott legpontosabb érték:

$$h = 6{,}62517 \cdot 10^{-27} \text{ ergs.} \tag{20.15.7}$$

Az irodalomban a *Planck*-törvényben sokszor a frekvencia helyett a sugárzás hullámhosszát vezetik be. A frekvencia és a hullámhossz összefüggését a

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

képlet adja meg. Ha (15.5)-öt ennek alapján átírjuk, akkor $|\Delta \nu| = \frac{c}{\lambda} \Delta \lambda$ miatt kapjuk, hogy a $\Delta \lambda$ hullámhossz-sávba eső energia

$$\Delta U = \frac{8\pi V h c}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k T}} - 1} \Delta \lambda . \tag{20.15.8}$$

A hullámhossz szerinti eloszlási függvényt ebből megint úgy kapjuk, ha egységnyi térfogatra és egységnyi hullámhossz-intervallumra szorítkozunk

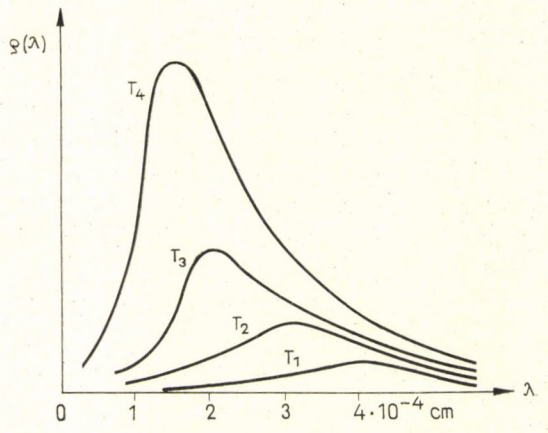
$$\rho(\lambda) = \frac{\Delta U}{V \Delta \lambda} .$$

Tehát

$$\rho(\lambda) = \frac{8\pi h c}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k T}} - 1} . \tag{20.15.9}$$

Ezt a sugárzási törvényt mutatja az 56. ábra néhány hőmérséklet esetére.

Az ábráról látjuk, hogy a ρ eloszlási függvénynek egy bizonyos λ_m-nél maximuma van; magasabb hőmérsékleten a maximum kisebb hullámhossznál fekszik, mint alacsonyabb hőmérsékleten. A hőmérséklet növekedtével tehát az energiaeloszlás maximuma a vöröstől a kék felé tolódik el. WIEN azt találta, hogy a λ_m hullámhossz fordítva arányos a T hőmérséklettel. Ezt a *Wien*-féle eltolódási tör-



56. ábra. A hőmérsékleti sugárzás energiaeloszlása hullámhosszak szerint négy különböző hőmérsékletre

vényt a (15.9) *Planck*-formulából könnyen levezethetjük. A függvény maximumát a

$$\frac{d\rho(\lambda)}{d\lambda} = 0$$

szélsőértékfeltételből lehet meghatározni. Ha ide behelyettesítjük a (15.9) eloszlási függvényt, úgy a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{d}{d\lambda}\,\frac{8\pi hc}{\lambda^5}\,\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1} = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\left[\frac{1}{(e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1)^2}\,\frac{hc}{\lambda^2 kT}\,e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - \frac{5}{\lambda}\,\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1}\right] = 0\,.$$

Ezt az egyenletet megszorozzuk $\dfrac{\lambda^6}{8\pi hc}\left(e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1\right)$-gyel

$$\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1}\,\frac{hc}{\lambda kT}\,e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 5 = 0\,. \qquad (20.15.10)$$

Ebből az egyenletből lehet a maximumhelyhez tartozó λ_m-et kiszámítani. Célszerű lesz bevezetni az

$$x = \frac{hc}{\lambda_m kT} \qquad (20.15.11)$$

jelölést. Ezzel (15.10) a következő transzcendens egyenletet adja:

$$\frac{xe^x}{e^x - 1} = 5. \tag{20.15.12}$$

Ezen egyenletnek egyetlen megoldása van, nevezetesen

$$x = 4{,}965\ldots$$

Ennek felhasználásával (15.11)-ből λ_m-re adódik, hogy

$$\lambda_m = \frac{hc}{xkT} = \frac{hc}{4{,}965k}\frac{1}{T} = \frac{B}{T}. \tag{20.15.13}$$

Kiadódott tehát a *Wien*-törvény, mely szerint λ_m fordítva arányos a T hőmérséklettel, sőt ezen túlmenően a B arányossági tényezőt is sikerült elméletileg meghatároznunk:

$$B = \frac{hc}{4{,}965k} = 0{,}288 \text{ cm fok}^{-1}. \tag{20.15.14}$$

Ez az érték teljes egyezésben van a tapasztalatilag bevezetett *Wien*-törvénnyel.

A (15.9) *Planck*-törvényből kiszámíthatjuk a hőmérsékleti sugárzás teljes energiáját. A $\Delta U = \rho(\lambda)V\Delta\lambda$ energiákat integrálva valamennyi hullámhosszra kapjuk, hogy

$$U = V\int_0^\infty \rho(\lambda)d\lambda. \tag{20.15.15}$$

Beírva ide a (15.9) *Planck*-formulát, az energiára a következő integrálkifejezés adódik:

$$U = 8\pi hcV\int_0^\infty \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}\frac{d\lambda}{\lambda^5}.$$

Ha bevezetjük az $x = hc/\lambda kT$ helyettesítést, úgy

$$U = \frac{8\pi(kT)^4}{(hc)^3}V\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1}dx = aVT^4. \tag{20.15.16}$$

A hőmérsékleti sugárzás energiája tehát arányos az üreg V térfogatával és a T hőmérséklet negyedik hatványával. Ez a *Stefan–Boltzmann*-törvény. (15.16)-ból kiadódik a *Stefan–Boltzmann*-állandó értéke is:

$$a = \frac{8\pi k^4}{h^3c^3}\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1}dx. \tag{20.15.17}$$

Az itt fellépő integrál kiszámítása céljából az integrandust

$$\frac{x^3}{e^x - 1} = x^3 \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}}$$

alakban írjuk fel, a törtkifejezést pedig egy mértani sorral állíthatjuk elő

$$x^3 \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = x^3 (e^{-x} + e^{-2x} + e^{-3x} + \ldots) = x^3 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}$$

Ezzel a (15.17) képletben előforduló integrál a következő lesz:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} x^3 e^{-nx} dx . \qquad (20.15.18)$$

Parciális integrálással elemi úton meggyőződhetünk arról, hogy

$$\int_0^{\infty} x^3 e^{-nx} dx = \frac{6}{n^4},$$

tehát

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = 6 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} . \qquad (20.15.19)$$

Hátra van még a jobboldalon szereplő végtelen sor összegének meghatározása. E célból tekintsük a következő *Fourier*-sort

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^4} \cos(n\pi x).$$

Ennek összege a $-1 \leq x \leq 1$ intervallumban a következő polinommal egyenlő:

$$-\frac{\pi^4}{48} \left(x^4 - 2x^2 + \frac{7}{15} \right).$$

Ha $x = 1$-et írunk, úgy az eredmény $\sum_{n}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}$ lesz, melyet (15.19)-be téve, kapjuk, hogy

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15} . \qquad (20.15.20)$$

Ezzel a *Stefan–Boltzmann*-állandóra a következő érték adódik:

$$a = \frac{8\pi^5 k^4}{16 h^3 c^3} = 7{,}65 \cdot 10^{-15} \frac{\text{erg}}{\text{fok}^4 \, \text{cm}^3} . \qquad (20.15.21)$$

Megjegyezzük, hogy a (12.13) alatti $\lambda_m = B/T$ *Wien*-törvényt és a (15.16) szerinti $U = aVT^4$ törvényeket a klasszikus termodinamika alapján is le lehet vezetni, a klasszikus tárgyalásmódnál azonban a B és a konstansok értéke határozatlan marad. A *Bose–Einstein*-statisztika nagy érdeme, hogy a *Wien*-féle és a *Stefan–Boltzmann*-állandókat elméletileg meg tudta adni. Látjuk azt is, hogy B a h/k, az a *Stefan–Boltzmann*-állandó pedig a k^4/h^3 mennyiséget tartalmazza. Ezért a B és a állandók empirikus értékeiből a k *Boltzmann*-állandót és a h *Planck*-állandót ki lehet számítani. Az így kapott eredmények megegyeznek k-ra és h-ra korábban kapott értékekkel.

Foglalkoznunk kell még a hőmérsékleti sugárzás entrópiájának meghatározásával. A *Bose–Einstein*-statisztika általános érvényű entrópiaformuláját (11.12) alatt írtuk fel. Hőmérsékleti sugárzás, azaz fotongáz esetén ebben az $u = hv$ és az $\alpha = 0$ helyettesítéseket kell elvégeznünk, továbbá a cellaszám helyébe (15.3)-at helyettesítjük. Figyelembe véve még, hogy az i szerinti összegezésnél nemcsak a fotonok impulzusaira, hanem a két lehetséges polarizációs állapotra is összegeznünk kell, az entrópiára kapjuk, hogy

$$S = -k\frac{8\pi V}{c^3}\int_0^\infty \ln\left(1 - e^{-\frac{hv}{kT}}\right)v^2\,dv + \frac{1}{T}U, \qquad (20.15.22)$$

ahol tekintetbe vettük a $\beta = 1/kT$ összefüggést is. Az integrál kiszámításához alkalmazzuk az $x = hv/kT$ helyettesítést, ezzel

$$S = -\frac{8\pi V k^4 T^3}{h^3 c^3}\int_0^\infty \ln\left(1 - e^{-x}\right)x^2\,dx + \frac{1}{T}U.$$

Az első tagban fellépő integrál egyszerű parciális integrálással átalakítható a (15.20) integrállá:

$$\int_0^\infty \ln\left(1 - e^{-x}\right)x^2 dx = -\frac{1}{3}\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1}\,dx = -\frac{\pi^4}{45}. \qquad (20.15.23)$$

Ezzel az entrópia a következő lesz:

$$S = \frac{8\pi^5 k^4}{45h^3c^3}VT^3 + \frac{1}{T}U = \frac{1}{3}aVT^3 + \frac{1}{T}U,$$

ahol a ismét a (15.21) *Stefan–Boltzmann*-állandót jelöli. Felhasználjuk még a hőmérsékleti sugárzás (15.16) energiakifejezését és ezzel az entrópiára a következő végeredményt kapjuk:

$$S = \frac{4}{3}aVT^3. \qquad (20.15.24)$$

Az entrópia ismeretében képezhetjük a sugárzási tér szabad energiájának kifejezését. (15.16) és (15.24) felhasználásával kapjuk:

$$F = U - TS = -\frac{1}{3} aVT^4. \tag{20.15.25}$$

A hőmérsékleti sugárzás nyomását a termodinamika törvénye alapján számíthatjuk ki, ahol a V szerinti deriválásnál a T hőmérséklet konstansnak tekintendő.

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{1}{3} aT^4. \tag{20.15.26}$$

A sugárnyomás tehát egyharmada az

$$\frac{U}{V} = aT^4$$

energiasűrűségnek.

16. §. Anyag és sugárzás hőmérsékleti egyensúlya

A tapasztalat szerint a nehezebb atommagok mellett elrepülő fotonok bizonyos valószínűséggel elektron-pozitron párrá alakulnak át:

$$\gamma \rightarrow e^+ + e^-.$$

Megfigyelhető a fordított reakció, az elektron-pozitron párnak egy vagy több fotonná való átalakulása. Ha az elektron és a pozitron szabadon mozog, akkor egy fotonra történő szétsugárzás lehetetlen, mivel ezt a folyamatot az energia és impulzus megmaradásának törvénye tiltja. Szabad pár szétsugárzásához legalább két foton szükséges:

$$e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma.$$

Ha azonban az elektron valamely atom elektronfelhőjében kötve van, úgy a pozitronnal való ütközés egyetlen fotonná való szétsugárzására is vezethet.

Ha a nyugalmi tömeggel rendelkező részecskék elektromágneses sugárzássá alakulhatnak át és viszont, akkor felvetődik a kérdés, hogy mikor van egyensúlyban egymással az anyag és a hőmérsékleti sugárzás.

Az alábbiakban azzal az egyszerű esettel fogunk foglalkozni, amikor a rendszerünk csupa egyforma részecskéből álló gázból és hőmérsékleti sugárzásból tevődik össze. Természetesen fel kell tételeznünk, hogy a részecskék átalakulhatnak sugárzássá és viszont. (A természetben előforduló részecskék közül ilyen pl. a semleges π° pion.) De tárgyalásunk minden nehézség nélkül általánosítható elektron-pozitron gázból és sugárzásból álló rendszerre vagy általában többféle részecskéből és sugárzásból álló rendszerre, ahol a részecskékből sugárzás keletkezhet és viszont.

Rendszerünk tehát N számú részecskéből álló gázt tartalmaz, az egyes részecskék tömege m. E gáz szabad energiáját (12.17) adja meg, de mivel a részecskéknek sugárzássá alakulásánál az mc^2 nyugalmi energiájuk is a sugárzási tér energiájává alakul, ezért (12.17)-et ki kell egészítenünk a részecskegáz Nmc^2 nyugalmi energiájával. A gáz szabad energiája tehát

$$F_g = Nmc^2 + NkT\left[\ln N - \ln V - \frac{3}{2}\ln T - \frac{3}{2}\ln\left(\frac{2\pi mk}{h^2}\right) - 1\right]. \quad (20.16.1)$$

A rendszerben levő hőmérsékleti sugárzás szabad energiáját (15.25) alapján írjuk fel:

$$F_s = -\frac{1}{3}aVT^4. \quad (20.16.2)$$

A részecskegázból és a hőmérsékleti sugárzásból álló rendszer teljes szabad energiája a fenti két szabad energia összege lesz: $F = F_g + F_s$. Tehát

$$F = Nmc^2 + NkT\left[\ln N - \ln V - \frac{3}{2}\ln T - \frac{3}{2}\ln\left(\frac{2\pi mk}{h^2}\right) - 1\right] - \frac{1}{3}aVT^4. \quad (20.16.3)$$

Adott V és T esetén a hőmérsékleti egyensúly feltétele az, hogy az F szabad energia minimális legyen. A hőmérsékleti egyensúlyhoz tartozó N részecskeszámot tehát a

$$\frac{\partial F}{\partial N} = 0$$

egyenletből határozhatjuk meg, mely (16.3) szerint a következő lesz:

$$\frac{\partial F}{\partial N} = mc^2 + kT\left[\ln N - \ln V - \frac{3}{2}\ln T - \frac{3}{2}\ln\left(\frac{2\pi mk}{h^2}\right)\right] = 0.$$

Ebből

$$N = \left(\frac{2\pi mk}{h^2}\right)^{3/2} VT^{3/2}e^{-\frac{mc^2}{kT}}. \quad (20.16.4)$$

A gáz anyagsűrűségére pedig kapjuk, hogy

$$\rho_g = \frac{Nm}{V} = m\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{mc^2}{kT}}.$$

Az R gázállandóra és az M molekulasúlyra vonatkozó

$$R = Lk \text{ és } M = Lm$$

képletek felhasználásával a gázsűrűség kifejezése

$$\rho_g = \frac{M}{L^4h^3}(2\pi MRT)^{3/2}e^{-\frac{Mc^2}{RT}}. \quad (20.16.5)$$

A hőmérsékleti sugárzás energiasűrűsége (15.16) alapján $U/V = aT^4$ lesz. Ha ezt elosztjuk c^2-tel, úgy megkapjuk a sugárzás tömegsűrűségét:

$$\rho_s = \frac{aT^4}{c^2} = \frac{8\pi^2 k^4}{15\,h^3 c^5}\,T^4 . \qquad (20.16.6)$$

E képletek alapján kiszámíthatjuk, hogy $T \approx 10^9$ K° alatti hőmérsékleteken a ρ_s sugárzási sűrűség sokkal nagyobb, mint a ρ_g gázsűrűség. Hőmérsékleti egyensúly esetén tehát az anyag túlnyomó többsége sugárzássá alakul át. A π°-mezonok vagy az e^+, e^- párok esetén ez valóban megfigyelhető. A közönséges atomok sugárzássá való átalakulását egy külön természettörvény, a nukleonok számának és az elektromos töltésnek megmaradási törvénye tiltja meg. De minden részecskerendszernél (magok, atomok, molekulák) megfigyelhető, hogy az egyensúlyi állapot a legkisebb tömeghez, tehát nyugalmi energiához tartozik. Gerjesztett rendszerek az energiafeleslegüket sugárzás formájában bocsátják ki.

Egészen más a helyzet a $T > 10^9$ K° hőmérsékletek esetén, itt már a hőmérsékleti egyensúlynál a ρ_g anyagsűrűség túlszárnyalja a sugárzás ρ_s sűrűségét. Ilyen viszonyok mellett tehát a hőmérsékleti sugárzás spontán módon anyaggá alakul. Ilyen magas hőmérsékletek viszont a természetben csak igen ritkán, kivételes körülmények között jönnek létre, pl. szupernova és hipernova robbanások alkalmával.

Végül kiemeljük, hogy a (16.5) egyensúlyi sűrűség kiszámítását az tette lehetővé, hogy a kvantumstatisztika a b entrópiakonstans értékét egyértelműen megadja. Az anyag és sugárzás hőmérsékleti egyensúlyának vizsgálatára a klasszikus *Maxwell–Boltzmann*-statisztika keretei között nincs lehetőség.

17. §. A Fermi–Dirac statisztika

A feles spinű részecskékre vonatkozó statisztikát először FERMI dolgozta ki 1926-ban, majd tőle függetlenül DIRAC is. Ezt a statisztikát követő részecskéket fermionoknak szokás nevezni. A 10. §-ban megbeszéltük, hogy a fermionok esetében a fázistér minden h^3 köbtartalmú cellájába legfeljebb két elektron kerülhet. (*Pauli*-elv.) Emiatt egy makroállapothoz tartozó mikroállapotok száma lényegesen kevesebb, mint a *Bose–Einstein* statisztikában.

Az eloszlásfüggvény meghatározásánál ugyanazt a gondolatmenetet követjük, mint a *Bose–Einstein*-statisztikában. A fázisteret tehát ismét felbontjuk h^3 cellákra és az ugyanazon energiaértékhez tartozó cellákat egy energiarétegbe foglaljuk össze. Az i-edik energiaréteghez tartozó energia legyen $u(i)$. E rétegben levő h^3 cellák számát Z_i-vel jelöljük, a *Pauli*-elv miatt az i-edik rétegben legfeljebb $2Z_i$ részecskét helyezhetünk el. A részecskerendszer mikroállapotát az egyes h^3 cellákba jutó részecskék számával, a makroállapotot pedig az egyes energiarétegekben levő részecskék számával adhatjuk meg. Ha az i-edik energiarétegben levő részecskék szá-

mát N_i-vel jelöljük, úgy a makroállapotot az

$$N_1, N_2, \ldots, N_i, \ldots . \tag{20.17.1}$$

eloszlás segítségével jellemezzük.

Mivel az i-edik rétegben összesen $2Z_i$ részecske részére van hely, ezért az N_i számú részecskét az i-edik rétegbe

$$\binom{2Z_i}{N_i} = \frac{(2Z_i)!}{N_i!(2Z_i - N_i)!} \tag{20.17.2}$$

féle módon helyezhetjük el. A (17.1) makroállapotot megvalósító mikroállapotok száma pedig a (17.2) alatti kifejezések szorzata lesz. A termodinamikai valószínűség tehát

$$W = \prod_i \frac{(2Z_i)!}{N_i!(2Z_i - N_i)!} . \tag{20.17.3}$$

A (3.6) *Boltzmann*-összefüggés alapján felírhatjuk a fermionrendszer entrópiáját:

$$S = k \ln W = k\Sigma[\ln (2Z_i)! - \ln N_i! - \ln (2Z_i - N_i)!] . \tag{20.17.4}$$

Mivel Z_i és N_i igen nagy számok, ezért felhasználhatjuk a (3.10) alatti közelítő formulát

$$S = k\sum [2Z_i \ln (2Z_i) - N_i \ln N_i - (2Z_i - N_i) \ln (2Z_i - N_i)]. \tag{20.17.5}$$

Termodinamikai egyensúly esetén S értéke maximális lesz. Ebből a feltételből meghatározhatjuk az egyensúlyi $N_1, N_2, \ldots, N_i, \ldots$ eloszlást. A maximum keresésekor ismét tekintettel kell lennünk két mellékfeltételre, mert az összes részecske száma, N, és a rendszer teljes energiája, U, adott értékek

$$\sum_i N_i = N \quad \text{és} \quad \sum_i u(i)N_i = U. \tag{20.17.6}$$

Írjuk fel a (17.5) es (17.6) kifejezések variációit:

$$\delta S = k\sum_i [-\ln N_i + \ln (2Z_i - N_i)]\delta N_i ,$$

$$\delta N = \sum_i \delta N_i ,$$

$$\delta U = \sum_i u(i)\delta N_i .$$

Az egyensúlyi állapot meghatározására ismét a *Lagrange*-féle multiplikátoros módszert használjuk. A

$$\delta(S - k\alpha N - k\beta U) = 0$$

variációs feltételt részletesen kiírva kapjuk, hogy

$$k\sum_i [-\ln N_i + \ln (2Z_i - N_i) - \alpha - \beta u(i)]\delta N_i = 0. \tag{20.17.7}$$

Mivel ez az egyenlet csak úgy teljesülhet tetszőlegesen δN_i variációk esetén, ha mindegyik δN_i együtthatója zérus, ezért

$$-\ln N_i + \ln (2Z_i - N_i) - \alpha - \beta u(i) = 0.$$

Ebből

$$\frac{2Z_i - N_i}{N_i} = e^{\alpha + \beta u(i)},$$

tehát

$$N_i = \frac{2Z_i}{e^{\alpha + \beta u(i)} + 1}. \tag{20.17.8}$$

Érdemes ezt az eredményt összehasonlítani a *Bose–Einstein*-statisztika (11.9) formulájával. A hasonlóság megállapítható, de két lényeges eltérést tapasztalunk. Az egyik az, hogy (17.8) számlálójában fellép egy 2-es faktor. Ennek oka nyilván az, hogy minden h^3 fáziscellába 2 részecske kerülhet (ellentétes spinnel), míg a *Bose–Einstein*-statisztikában a spinnel nem számoltunk. A másik lényeges eltérés a nevezőben levő 1-es előjelében van, ami a *Bose–Einstein*-statisztikában mínusz, a *Fermi–Dirac*-statisztikában plusz. Ez a különbség a *Pauli*-elvből származó korlátozás miatt lép fel, emiatt ugyanis a *Fermi–Dirac*-statisztikában egy adott makroállapotnál kevesebb-féleképpen helyezhetjük el a részecskéket a fáziscellákba, mint a *Bose–Einstein*-statisztikában.

A következő feladat az α és β multiplikátorok kiszámítása, melyhez a (17.6) mellékfeltételeket kell felhasználnunk.

$$\sum_i \frac{2Z_i}{e^{\alpha + \beta u(i)} + 1} = N, \tag{20.17.9}$$

$$\sum_i \frac{2Z_i}{e^{\alpha + \beta u(i)} + 1} u(i) = U. \tag{20.17.10}$$

E képletekből α és β, mint N és U függvényei meghatározhatók.

Az egyensúlyi állapot entrópiáját (17.8)-nak (17.5)-be való visszahelyettesítésével kaphatjuk meg.

$$S = k \sum_i \left[2Z_i \ln (2Z_i) - N_i \ln \frac{2Z_i}{e^{\alpha + \beta u(i)} + 1} - (2Z_i - N_i) \ln \frac{2Z_i}{1 + e^{-\alpha - \beta u(i)}} \right] =$$

$$= k \sum_i \left[N_i \ln (e^{\alpha + \beta u(i)} + 1) + (2Z_i - N_i) \ln (1 + e^{-\alpha - \beta u(i)}) \right] =$$

$$= k \sum_i \left[2Z_i \ln (1 + e^{-\alpha - \beta u(i)}) + \alpha N_i + \beta N_i u(i) \right].$$

Az utolsó két tag i szerinti összegezésének eredményét (17.6) segítségével írhatjuk fel. Ezért:

$$S = k \sum_i 2Z_i \ln (1 + e^{-\alpha - \beta u(i)}) + \ln \alpha N + k\beta U. \tag{20.17.11}$$

A fermionrendszer hőmérsékletét a termodinamika

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_N = \frac{1}{T}$$

összefüggése alapján számítjuk ki. (17.11)-et U szerint differenciáljuk:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_N = k\sum_i \frac{2Z_i e^{-\alpha-\beta u(i)}}{1+e^{-\alpha-\beta u(i)}}\left(-\frac{\partial\alpha}{\partial U} - u(i)\frac{\partial\beta}{\partial U}\right) + kN\frac{\partial\alpha}{\partial U} + kU\frac{\partial\beta}{\partial U} + k\beta.$$

Az első tagban épp a (17.9) és (17.10) képletek i-szerinti összegezései fordulnak elő. Ezek tekintetbevételével látjuk, hogy a fenti kifejezés első három tagjának algebrai összege éppen zérus lesz, tehát marad, hogy

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_N = k\beta = \frac{1}{T},$$

vagyis

$$\beta = \frac{1}{kT}. \tag{20.17.12}$$

A β multiplikátorra tehát ugyanaz az eredmény adódott, mint a klasszikus *Maxwell–Boltzmann*-statisztikában és a *Bose–Einstein*-statisztikában.

Írjuk fel egy adott T hőmérséklet esetén a *Fermi–Dirac*-statisztika alapegyenleteit. Az $A = e^{-\alpha}$ jelölés bevezetésével a (17.8) eloszlásfüggvény a következő lesz:

$$N_i = \frac{2Z_i}{\frac{1}{A}e^{\frac{u(i)}{kT}}+1}. \tag{20.17.13}$$

Az A konstanst a (17.9) mellékfeltétel határozza meg:

$$\sum_i \frac{2Z_i}{\frac{1}{A}e^{\frac{u(i)}{kT}}+1} = N, \tag{20.17.14}$$

de miként a *Bose–Einstein*-statisztikában, itt is általában valamilyen közelítő módszerre vagyunk utalva, mert (17.14)-ből A-t nem lehet zárt alakban kifejezni.

A rendszer energiáját a (17.10), entrópiáját pedig a (17.11) képlet alapján kapjuk meg

$$U(N,T) = \sum_i \frac{2Z_i}{\frac{1}{A}e^{\frac{u(i)}{kT}}+1} u(i), \tag{20.17.15}$$

$$S(N,T) = k\sum_i 2Z_i \ln\left(1 + A\,e^{-\frac{u(i)}{kT}}\right) - kN\ln A + \frac{1}{T}U(N,T). \tag{20.17.16}$$

18. §. Az elektrongáz

Alkalmazzuk az előző § eredményeit egy V térfogatú edénybe zárt elektrongáz esetére. Az elektronok elektrosztatikus kölcsönhatását most teljesen figyelmen kívül hagyjuk, tárgyalásunk tehát az ideális elektrongáz esetére vonatkozik. Az elektronok energiája ez esetben a kinetikus energiájukkal azonos, tehát

$$u = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}. \tag{20.18.1}$$

Éppen úgy, mint a *Bose*-gázok esetében, az energiarétegek most is a p sugarú és Δp vastagságú impulzus-gömbrétegek lesznek. A cellaszám (12.2)-vel lesz azonos:

$$Z = \frac{4\pi V p^2 \Delta p}{h^3}.$$

A p impulzus helyett az u energiát vezetjük be az elektron mozgásállapotának jellemzésére. (18.1) szerint

$$p^2 \Delta p = \frac{1}{2}(2m)^{3/2} u^{1/2} \Delta u,$$

tehát az u és $u + \Delta u$ energiák közé eső cellák száma:

$$Z = \frac{2\pi V (2m)^{3/2} u^{1/2} \Delta u}{h^3}. \tag{20.18.2}$$

Ha (18.1)-et és (18.2)-t beírjuk (17.13)-ba, úgy megkapjuk az elektronok energia szerinti eloszlásfüggvényét. Az A paraméter helyett célszerű lesz most bevezetni a

$$\mu = -\alpha kT = kT \ln A \tag{20.18.3}$$

mennyiséget. Ezzel az eloszlásfüggvényre a következő kifejezés adódik:

$$\Delta N = \frac{4\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \frac{u^{1/2}}{e^{\frac{u-\mu}{kT}} + 1} \Delta u. \tag{20.18.4}$$

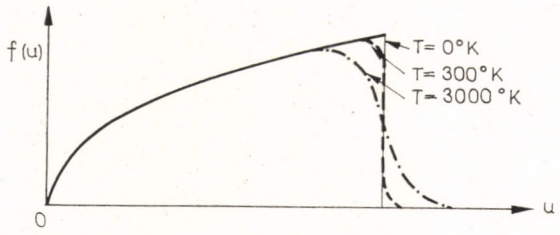
Ez a *Fermi–Dirac* energiaeloszlás. A benne szereplő μ konstanst (17.14) alapján az $N = \Sigma \Delta N$ elektronszámmal hozhatjuk kapcsolatba. Összegezés helyett u szerinti integrálásra térve át, kapjuk, hogy

$$\frac{4\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{u^{1/2}}{e^{\frac{u-\mu}{kT}} + 1} du = N. \tag{20.18.5}$$

Az egységnyi térfogatra és egységnyi energiaintervallumra vonatkoztatott

$$f(u) = \frac{\Delta N}{V \Delta u} = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \frac{u^{1/2}}{e^{\frac{u-\mu}{kT}} + 1}$$

eloszlásfüggvényt a 57. ábra szemlélteti:



57. ábra. A *Fermi—Dirac* statisztika energiaeloszlási függvénye

Az elektrongáz energiájára és entrópiájára (17.15) ill. (17.16) alapján a következő kifejezések adódnak:

$$U = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{u^{3/2}}{e^{\frac{u-\mu}{kT}} + 1} du, \tag{20.18.6}$$

$$S = \frac{4\pi V k(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \ln\left(1 + e^{-\frac{u-\mu}{kT}}\right) u^{1/2} du + \frac{1}{T}(U - \mu N). \tag{20.18.7}$$

Az entrópiakifejezésben fellépő integrált parciális integrálással átalakítjuk:

$$\int_0^\infty \ln\left(1 + e^{-\frac{u-\mu}{kT}}\right) u^{1/2} du = \frac{2}{3} \frac{1}{kT} \int_0^\infty \frac{u^{3/2}}{e^{\frac{u-\mu}{kT}} + 1} du.$$

Eszerint (18.7) első tagja $\frac{2U}{3T}$-vel lesz egyenlő és így az entrópiára kapjuk, hogy

$$S = \frac{1}{T}\left(\frac{5}{3}U - \mu N\right). \tag{20.18.8}$$

Az elektrongáz szabad energiáját az $F = U - TS$ szabály alapján képezzük. Ha S-nek (18.8) kifejezését használjuk, úgy F-re az

$$F = -\frac{2}{3}U + \mu N \tag{20.18.9}$$

eredmény adódik.

Végül határozzuk meg az elektrongáz nyomását. A termodinamika (18.2.17) egyenlete szerint a nyomás

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V},$$

ahol a differenciálást konstans N és T mellett kell elvégeznünk. (18.9) alapján nyerjük, hogy

$$p = \frac{2}{3}\frac{\partial U}{\partial V} - N\frac{\partial \mu}{\partial V}. \tag{20.18.10}$$

(18.6)-ot V szerint differenciálva kapjuk:

$$\frac{\partial U}{\partial V} = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3}\int_0^\infty \frac{u^{3/2}}{e^{\frac{u-\mu}{kT}}+1}\,du + \\ + \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3 kT}\frac{\partial \mu}{\partial V}\int_0^\infty \frac{u^{3/2}e^{\frac{u-\mu}{kT}}}{\left(e^{\frac{u-\mu}{kT}}+1\right)^2}\,du. \tag{20.18.11}$$

Az első tagban ugyanaz az integrál lép fel, mint U (18.6) kifejezésében, ezért az első tag U/V-vel lesz egyenlő. A második tag meghatározása céljából hajtsunk végre parciális integrálást (18.5)-ben.

$$N = \frac{2}{3}\frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3 kT}\int_0^\infty \frac{u^{3/2}e^{\frac{u-\mu}{kT}}}{\left(e^{\frac{u-\mu}{kT}}+1\right)^2}\,du.$$

Ezeket figyelembe véve $\frac{\partial U}{\partial V}$-re a következő kifejezést kapjuk:

$$\frac{\partial U}{\partial V} = \frac{U}{V} + \frac{3}{2}N\frac{\partial \mu}{\partial V}.$$

Végül ezt (18.10)-be téve a nyomás képletét kapjuk meg:

$$p = \frac{2}{3}\frac{U}{V}.$$

A nyomás tehát az U/V energiasűrűség $\frac{2}{3}$-ával egyenlő.

19. §. Az elektrongáz viselkedése extrém körülmények között

Az előző §-ban kidolgoztuk az elektrongáz statisztikus mechanikáját. Az ott elért eredmények egzaktul érvényesek bármilyen T hőmérsékleten és bármekkora N/V elektronsűrűség mellett. A jelen §-ban ezeket az eredményeket fogjuk alkalmazni az igen alacsony és az igen magas hőmérsékletek esetére.

Az abszolút nulla hőfokú elektrongáz. Vizsgáljuk meg először az elektrongáz viselkedését $T = 0$ esetén, vagyis a hőmérséklet abszolút nulla pontján. Az elektronok energiaeloszlását leíró (18.4) formulában szerepel a *Fermi–Dirac*-statisztikára jellemző

$$\frac{1}{e^{\frac{u-\mu}{kT}}+1} \tag{20.19.1}$$

tényező. Mindenekelőtt e tényező viselkedését kell megnéznünk $T = 0$ esetén. Legyen a μ paraméternek $T = 0$-hoz tartozó értéke u_F.

$$\mu(T=0) = u_F. \tag{20.19.2}$$

$T = 0$ esetén az $(u - \mu)/kT$ mennyiség végtelenhez tart, mégpedig

$$\frac{u-\mu}{kT} \to +\infty, \quad \text{ha} \quad u > u_F,$$

$$\frac{u-\mu}{kT} \to -\infty, \quad \text{ha} \quad u < u_F.$$

Ezért $T = 0$ esetén

$$e^{\frac{u-\mu}{kT}} \to +\infty, \quad \text{ha} \quad u > u_F,$$

$$e^{\frac{u-\mu}{kT}} \to 0, \quad \text{ha} \quad u < u_F.$$

Ennek alapján már felírhatjuk a (19.1) tényező viselkedését a $T = 0$ határesetben

$$\frac{1}{e^{\frac{u-\mu}{kT}}+1} \to 0, \quad \text{ha} \quad u > u_F,$$

$$\frac{1}{e^{\frac{u-\mu}{kT}}+1} \to 1, \quad \text{ha} \quad u < u_F. \tag{20.19.3}$$

Ezt (18.4)-be téve, megkapjuk a zérus hőmérséklethez tartozó eloszlásfüggvényt

$$\Delta N = 0, \quad \text{ha} \quad u > u_F,$$

$$\Delta N = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} u^{1/2} du, \quad \text{ha} \quad u < u_F. \tag{20.19.4}$$

Az $f(u) = \Delta N/V\Delta u$ eloszlásfüggvényt a 49. ábrán a kihúzott vonal ábrázolja.

A (19.2)-vel definiált u_F paramétert (18.5)-ből kell kiszámítanunk. Figyelembe véve (19.3)-at, kapjuk, hogy

$$\frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3}\int_0^{u_F} u^{1/2}du = \frac{8\pi V(2mu_F)^{3/2}}{3h^3} = N.$$

Ebből

$$u_F = \frac{1}{8}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\frac{h^2}{m}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}. \tag{20.19.5}$$

A (19.4) eloszlásfüggvény mutatja, hogy u_F-nél nagyobb u energiájú elektron nem fordul elő a zérus hőmérsékletű elektrongázban. u_F tehát az előforduló maximális elektronenergia. (19.5)-ből látjuk, hogy ez a maximális energia az N/V elektronsűrűségtől függ, mégpedig annak 2/3-ik hatványával arányos.

Az elektrongáz teljes energiáját (18.6) alapján számítjuk ki, ismét figyelembe véve azt, hogy az integrandus nevezője $T = 0$ esetén (19.3) szerint viselkedik. A zérus hőmérsékletű elektrongáz energiáját U_0-lal jelölve írhatjuk, hogy

$$U_0 = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3}\int_0^{u_F} u^{3/2}du = \frac{8\pi V(2m)^{3/2}u_F^{5/2}}{5h^3}.$$

Ha ide behelyettesítjük az u_F-re nyert (19.5) kifejezésünket, úgy az elektrongáz energiájára a következő kifejezés adódik:

$$U_0 = \frac{3}{40}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\frac{h^2}{m}\frac{N^{5/3}}{V^{2/3}} = \kappa_F\frac{N^{5/3}}{V^{2/3}}. \tag{20.19.6}$$

Itt bevezettük a κ_F univerzális állandót, melynek értéke

$$\kappa_F = \frac{3}{40}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\frac{h^2}{m}. \tag{20.19.7}$$

Az elektrongáz energiasűrűsége

$$\frac{U_0}{V} = \kappa_F\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3}, \tag{20.19.8}$$

az $\frac{N}{V}$ elektronsűrűség $\frac{5}{3}$-ik hatványával arányos, az arányossági tényező κ_F. Az egy elektronra jutó átlagos energia pedig

$$\frac{U_0}{N} = \kappa_F\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \tag{20.19.9}$$

lesz. Beírva ide κ_F kifejezését és összehasonlítva (19.5)-tel, láthatjuk, hogy

$$\frac{U_0}{N} = \frac{3}{5}u_F, \tag{20.19.10}$$

tehát az átlagos energia $\frac{3}{5}$ = 0,6-szorosa a maximálisan előforduló energiának. Végül felírjuk a zérus hőmérsékletű elektrongáz nyomását. Az általánosan érvényes (18.12) törvény szerint a nyomás az energiasűrűség kétharmada. Ez érvényes zérus hőmérsékleten is, tehát

$$p = \frac{2}{3}\frac{U_0}{V} = \frac{2}{3}\kappa_F\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3}. \tag{20.19.11}$$

Konstans N mellett tehát a zérus hőmérsékletű elektrongáz a

$$pV^{5/3} = \text{konst.} \tag{20.19.12}$$

politrop állapotegyenletnek tesz eleget.

A fenti eredmények mutatják, hogy a zérus hőmérsékletű elektrongáz viselkedése gyökeresen különbözik attól, amit a klasszikus *Maxwell–Boltzmann*-statisztika alapján várnánk. (9.4) és (8.3) szerint ugyanis a klasszikus elektrongázra az

$$U = \frac{3}{2}NkT \quad \text{és} \quad p = \frac{NkT}{V}$$

törvények érvényesek. $T = 0$ esetén a klasszikus törvények $U = 0$ és $p = 0$ eredményre vezetnek. A (19.6) energiát és (19.11) nyomást az elektrongáz zérusponti energiájának, ill. *zérusponti nyomás*nak nevezzük. E mennyiségek felléptét az elektrongáz „erős elfajulásának" nevezzük. Eredetük a klasszikus tárgyalásmódtól teljesen idegen *Pauli*-elvre vezethető vissza.

Az igen alacsony hőmérsékletű elektrongáz. Most foglalkozzunk a zérustól különböző, de igen alacsony hőmérsékletű elektrongázzal. Igen alacsony hőmérsékletűnek akkor tekintjük az elektrongázt, ha $kT \ll \mu$, tehát ha

$$\frac{\mu}{kT} \gg 1. \tag{20.19.13}$$

Tekintsük elsősorban az

$$I = \int_0^\infty \frac{g(u)}{e^{\frac{u-\mu}{kT}} + 1}\, du \tag{20.19.14}$$

típusú integrálokat. Ilyen integrálok lépnek fel az egzaktul érvényes (18.5) és (18.6) formulákban; az első esetben $g(u) = u^{1/2}$, a másodikban $g(u) = u^{3/2}$. A (19.14) integrál meghatározása céljából integráljunk először 0-tól μ-ig, majd μ-től ∞-ig.

$$I = \int_0^\mu \frac{g(u)}{e^{\frac{u-\mu}{kT}} + 1}\, du + \int_\mu^\infty \frac{g(u)}{e^{\frac{u-\mu}{kT}} + 1}\, du.$$

Az első integrálban az integrandust átalakítjuk az

$$\frac{1}{e^{\frac{u-\mu}{kT}}+1} = 1 - \frac{1}{e^{-\frac{u-\mu}{kT}}+1}$$

összefüggés segítségével.

$$I = \int_0^{\mu} g(u)du - \int_0^{\mu} \frac{g(u)}{e^{-\frac{u-\mu}{kT}}+1}\,du + \int_{\mu}^{\infty} \frac{g(u)}{e^{\frac{u-\mu}{kT}}+1}\,du .$$

Az u integrációs változó helyett a második integrálban a $z = -\dfrac{u-\mu}{kT}$, a harmadikban pedig a $z = \dfrac{u-\mu}{kT}$ változót vezetjük be. E helyettesítések elvégzése után

$$I = \int_0^{\mu} g(u)du - kT \int_0^{\frac{\mu}{kT}} \frac{g(\mu - kTz)}{e^z+1}\,dz + kT \int_0^{\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{e^z+1}\,dz .$$

A második integrálban a felső határt, a (19.13) feltétel miatt, $+\infty$-nel helyettesítjük. Az így elkövetett hiba exponenciálisan kicsi lesz. Kapjuk, hogy

$$I = \int_0^{\mu} g(u)du + kT \int_0^{\infty} \frac{g(\mu + kTz) - g(\mu - kTz)}{e^z+1}\,dz .$$

Fejtsük sorba az integrandus számlálóját z hatványai szerint és integráljunk tagonként

$$I = \int_0^{\mu} g(u)du + 2(kT)^2 g'(u) \int_0^{\infty} \frac{z}{e^z+1}\,dz + \frac{1}{3}(kT)^4 g'''(u) \int_0^{\infty} \frac{z^3}{e^z+1}\,dz + \ldots \qquad (20.19.15)$$

Az itt fellépő z szerinti integrálok a matematikai szakirodalomból ismert

$$\int_0^{\infty} \frac{z^{p-1}}{e^z+1}\,dz = (1 - 2^{1-p})\xi(p)\,(p-1)! \qquad (20.19.16)$$

képlet segítségével számíthatók ki, melyben $\xi(p)$ az ún. *Riemann*-függvény,

$$\xi(p) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p} .$$

Minket elsősorban a páros p-k esete érdekel, amikor $p = 2n$, ahol n egész szám. Ekkor (19.16)-ból kapjuk, hogy

$$\int_0^\infty \frac{z^{2n-1}}{e^z + 1}\, dz = \frac{2^{2n-1} - 1}{2n}\, \pi^{2n} B_n, \tag{20.19.17}$$

ahol B_n az n-edik *Bernoulli*-féle szám. Az első néhány *Bernoulli*-szám értéke a következő:

$$B_1 = \frac{1}{6}, \qquad B_2 = \frac{1}{30}, \qquad B_3 = \frac{1}{42}, \qquad B_4 = \frac{1}{30}.$$

(19.17)-et a (19.15) sorfejtésbe téve, a keresett I integrálra kapjuk, hogy

$$\int_0^\infty \frac{g(u)}{e^{\frac{u-\mu}{kT}} + 1}\, du = \int_0^\mu g(u)du + \frac{\pi^2}{6} g'(u)(kT)^2 + \frac{7\pi^4}{360} g'''(u)(kT)^4 + \ldots \tag{20.19.18}$$

A keresett integrált tehát T^2 hatványai szerint haladó sor alakjában állítottuk elő.

Alkalmazzuk ezt a sorfejtést az egzakt (18.5) formulában. $g(u) = u^{1/2}$ helyettesítés után nyerjük, hogy

$$\frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \left(\frac{2}{3} \mu^{3/2} + \frac{\pi^2}{12} \frac{(kT)^2}{\mu^{1/2}} + \ldots \right) = N.$$

Ebből az egyenletből a μ paraméter értéke kiszámítható. Ismét felhasználva a (19.13) egyenlőtlenséget, μ-re a következő formulát kapjuk:

$$\mu = u_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu F} \right)^2 + \ldots \right], \tag{20.19.19}$$

ahol u_F ismét a (19.5) alatti mennyiséget jelöli. μ értéke $T = 0$-nál átmegy u_F-be, ami megfelel (19.2)-nek. Alacsony hőmérsékleteken μ négyzetesen függ T-től.

Az alacsony hőmérsékletű elektrongáz energiáját (18.6) alapján számítjuk, felhasználva a (19.18) sorfejtést $g(u) = u^{3/2}$ helyettesítéssel

$$U = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \left(\frac{2}{5} \mu^{5/2} + \frac{\pi^2}{4} \mu^{1/2} (kT)^2 + \ldots \right)$$

$$= \frac{8\pi V(2m)^{3/2}}{5h^3} \mu^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 + \ldots \right].$$

Felhasználva a μ-re nyert (19.19) eredményünket és elhanyagolva $\left(\frac{kT}{\mu} \right)^2$ magasabb

hatványait, kapjuk, hogy

$$U = U_0\left[1 - \frac{5\pi^2}{24}\left(\frac{kT}{u_F}\right)^2\right]\left[1 + \frac{5\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{u_F}\right)^2\right],$$

vagyis

$$U = U_0\left[1 + \frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{u_F}\right)^2 + \ldots\right], \tag{20.19.20}$$

ahol U_0 a (19.6) zérusponti energiát jelöli. Megállapíthatjuk, hogy alacsony hőmérsékleteken U négyzetesen függ T-től és $T = 0$ esetén átmegy U_0-ba.

A következő feladatunk az entrópia és a szabad energia meghatározása. A (19.19) és (19.20) sorfejtéseket az egzaktul érvényes (18.8) és (18.9) formulákba téve, a következő eredményre jutunk:

$$S = N\frac{\pi^2 k^2}{2u_F}T, \tag{20.19.21}$$

$$F = U_0\left[1 - \frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{u_F}\right)^2\right]. \tag{20.19.22}$$

Láthatjuk, hogy $T = 0$ esetén az entrópia zérus lesz, megegyezésben a termodinamika harmadik főtételével .A szabad energia $T = 0$ esetén az U_0 zérusponti energiába megy át, igen alacsony hőmérsékleteken pedig négyzetesen függ T-től. T^2 együtthatója éppen negatívja az U energiakifejezésben szereplő T^2 együtthatójának.

Végül felírjuk az elektrongáz állapotegyenletét. A (18.12) egzakt formulába behelyettesítve az U energia (19.20) közelítését, kapjuk, hogy

$$p = \frac{2}{3}\frac{U_0}{V}\left(1 + \frac{5\pi^2}{12}\frac{(kT)^2}{u_F^2}\right).$$

Ha ide U_0-nak (19.6), valamint u_F-nek (19.5) képleteit beírjuk, úgy a következő állapotegyenlet adódik:

$$p = \frac{2}{3}\kappa_F\left[\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} + \frac{3\pi^2}{20\kappa_F^2}(kT)^2\left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}\right]. \tag{20.19.23}$$

Az igen magas hőmérsékletű elektrongáz. Most vizsgáljuk meg az elektrongáz viselkedését az

$$A = e^{\frac{\mu}{kT}} \ll 1 \tag{20.19.24}$$

határesetben. A *Fermi—Dirac*-statisztikára jellemző

$$\frac{1}{e^{\frac{u-\mu}{kT}} + 1} = \frac{1}{\frac{1}{A}e^{\frac{u}{kT}} + 1} = \frac{Ae^{-\frac{\mu}{kT}}}{1 + Ae^{-\frac{u}{kT}}} \tag{20.19.25}$$

tényezőt fejtsük mértani sorba A hatványai szerint

$$\frac{1}{e^{\frac{u-\mu}{kT}}+1} = \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu-1} A^{\nu} e^{-\frac{\nu u}{kT}}. \tag{20.19.26}$$

Írjuk be ezt a sorfejtést N-nek (18.5) alatti kifejezésébe:

$$\frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu-1} A^{\nu} \int_0^{\infty} u^{1/2} e^{-\frac{\nu u}{kT}} du = N. \tag{20.19.27}$$

Az itt fellépő integrált az

$$u = \frac{kT}{\nu} x^2$$

helyettesítéssel tudjuk kiszámítani

$$\int_0^{\infty} u^{1/2} e^{-\frac{\nu u}{kT}} du = 2\left(\frac{kT}{\nu}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{kT}{\nu}\right)^{3/2}.$$

Ezt (19.27)-be téve kapjuk, hogy

$$\frac{2V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu-1} \frac{A^{\nu}}{\nu^{3/2}} = N. \tag{20.19.28}$$

Az $A \ll 1$ feltétel miatt az itt fellépő végtelen sornak elegendő az első néhány tagját figyelembe venni. Ha csak az első tagot tartjuk meg, úgy

$$\frac{2V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} A = N,$$

amiből A-ra kapjuk, hogy

$$A = \frac{Nh^3}{2V(2\pi mkT)^{3/2}}. \tag{20.19.29}$$

Láthatjuk, hogy az így nyert A akkor teljesíti az $A \ll 1$ feltételt, ha az N/V elektronsűrűség kicsi és a T hőmérséklet nagy.

Szükségünk lesz A pontosabb alakjára is, ezért meghatározzuk annak második közelítését. Ha (19.28)-ban az első két tagot tartjuk meg, úgy

$$\frac{2V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3}\left(A - \frac{A^2}{2\sqrt{2}}\right) = N.$$

Ebből:

$$A = \frac{Nh^3}{2V(2\pi mkT)^{3/2}} + \frac{A^2}{2\sqrt{2}}.$$

A jobboldalon fellépő A^2-es tagban használjuk fel a (19.29) első közelítést:

$$A = \frac{Nh^3}{2V(2\pi mkT)^{3/2}} \left(1 + \frac{Nh^3}{2V(4\pi mkT)^{3/2}}\right). \qquad (20.19.30)$$

Ezek után határozzuk meg az elektrongáz energiáját. (19.26)-ot az energia (18.6) képletébe téve kapjuk:

$$U = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu-1} A^{\nu} \int_0^{\infty} u^{3/2} e^{-\frac{\nu u}{kT}} du .$$

Ismét alkalmazva az $u = \frac{kT}{\nu} x^2$ helyettesítést, az integrál értékét ki tudjuk számítani

$$\int_0^{\infty} u^{3/2} e^{-\frac{\nu u}{kT}} du = 2 \left(\frac{kT}{\nu}\right)^{5/2} \int_0^{\infty} x^4 e^{-x^2} dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{kT}{\nu}\right)^{5/2} .$$

Ezzel az U energia kifejezése a következő lesz:

$$U = \frac{3V(2\pi m)^{3/2}(kT)^{5/2}}{h^3} \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu-1} \frac{A^{\nu}}{\nu^{5/2}}. \qquad (20.19.31)$$

Ismét megelégszünk a második közelítéssel, tehát a végtelen sorból csak az első két tagot tartjuk meg

$$U = \frac{3V(2\pi m)^{3/2}(kT)^{5/2}}{h^3} \left(A - \frac{A^2}{4\sqrt{2}}\right).$$

Az A-ban elsőfokú tagnál a (19.30) közelítést használjuk, az A^2-es tagnál viszont megelégedhetünk a (19.29) első közelítéssel is

$$U = \frac{3}{2} NkT \left(1 + \frac{Nh^3}{4\pi(4\pi mkT)^{3/2}}\right). \qquad (20.19.32)$$

A klasszikus *Maxwell–Boltzmann* statisztika szerint $U = \frac{3}{2} NkT$. Az itt fellépő gömbölyű zárójel jelzi a klasszikus statisztikától való eltérést, melyet magas hőmérséklet, tehát

$$\frac{Nh^3}{2V(2\pi mkT)^{3/2}} \ll 1$$

esetén „gyenge elfajulás"-nak nevezünk.

Az egzaktul érvényes (18.12) képlet alapján felírhatjuk a gyengén elfajult elektrongáz állapotegyenletét. (19.32) felhasználásával kapjuk, hogy

$$p = \frac{NkT}{V} \left(1 + \frac{Nh^3}{4V(4\pi mkT)^{3/2}}\right). \qquad (20.19.33)$$

Ez ismét a gömbölyű zárójelben levő korrekciós tényezőben különbözik a

$$p = \frac{NkT}{V}$$

ideális gáztörvénytől.

20. §. Az elektrongáz fajhője

A 9. §-ban láttuk, hogy a szilárd testek mólhőjét a (9.13) *Dulong–Petit* törvény adja meg, mely szerint

$$c_V = 3R. \tag{20.20.1}$$

E törvény levezetésénél a szilárd testet kvázielasztikusan kötött atomokból gondoltuk felépítve. Más azonban a helyzet a fémekben, ahol a kvázielasztikusan kötött fémionok között vezetési elektronok mozognak. Ha a fém mólhőjét az ekvipartíció tétele alapján akarnánk meghatározni, akkor (9.7) szerint minden szabadsági fok $\frac{1}{2}R$-rel járulna hozzá a mólhőhöz. Az ionok 6 szabadsági foka a *Dulong–Petit* törvénynek megfelelő $3R$ mólhőre vezet, de az ionokkal hőmérsékleti egyensúlyban levő elektrongáz, mivel a szabadon mozgó elektron szabadsági foka 3, még $\frac{3}{2}R$ mólhőt adna, ezért a klasszikus statisztika szerint a fémek mólhője

$$c_V = \frac{9}{2}R \tag{20.20.2}$$

lenne. A tapasztalat viszont a (20.1) *Doulong-Petit* szabályt erősíti meg.

Az ellentmondás rögtön megszűnik, ha az elektrongázt nem a klasszikus, hanem a *Fermi–Dirac*-statisztikával tárgyaljuk. Fémekben egy kb. $\sim 3 \cdot 10^{-8}$ cm sugarú gömbre jut egy vezetési elektron, az elektronsűrűség tehát N/vz $1{,}3 \cdot 10^{22}$ cm^{-3}. Ha ezt az értéket helyettesítjük be (19.5)-be, úgy $u_F \approx 10^{-11}$ erg nagyságrendű értéket kapunk. Mivel például $T = 1000$ K° esetén $kT \approx 1{,}4 \cdot 10^{-13}$ erg, ezért fémekben normális körülmények között fennáll a

$$kT \ll u_F \tag{20.20.3}$$

egyenlőtlenség, ami mutatja, hogy a fémekben levő elektrongáz erősen elfajult. Ezért energiáját nem lehet az ekvipartíció tételének megfelelő $U = \frac{3}{2}NkT$ képlet alapján számítani, hanem az erősen elfajult esetre vonatkozó (19.20) formulát kell használnunk. (19.10) alapján ezt a következőképpen írhatjuk fel

$$U = \frac{3}{5}Nu_F\left[1 + \frac{5\pi^2}{12}\frac{(kT)^2}{u_F^2}\right]. \tag{20.20.4}$$

Egy mólnyi anyag esetén $N = L$. Az állandó térfogaton vett mólhőt (20.4)-ből T szerinti differenciálással kapjuk. Az elektronoktól származó mólhő tehát

$$c_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\pi^2 L k^2 T}{2u_F} = \frac{\pi^2}{2} R \frac{kT}{u_F}. \qquad (20.20.5)$$

Behelyettesítve az előbb említett $kT \approx 1{,}4 \cdot 10^{-13}$ erg és $u_F \approx 10^{-11}$ erg adatokat, az elektrongáz mólhőjére

$$c_V = 4{,}5 \cdot 10^{-2} \cdot \frac{3}{2} R$$

érték adódik, azaz 0,045-szerese a klasszikus $\frac{3}{2} R$ értéknek. A *Fermi–Dirac*-statisztika tehát az elektrongázra nagyságrendekkel kisebb mólhőt ad, mint a klasszikus statisztika. Most már érthető, hogy a fémek fajhőjében normális hőmérsékleteken miért nem szerepel az elektronok szabadsági foka és miért érvényes a *Dulong–Petit*-törvény.

21. §. A relativisztikusan elfajult elektrongáz

A (19.5) képlet mutatja, hogy az abszolút zérus hőmérsékletű elektrongázban az előforduló maximális elektronenergia az N/V elektronsűrűség 2/3-ik hatványával arányos. Ha az elektronsűrűség igen nagy, akkor az u_F maximális kinetikus energia már az elektron mc^2 nyugalmi energiájának nagyságrendjébe eshet és ekkor feltétlenül a relativisztikus mechanika törvényei szerint kell számolnunk.

A zérus hőmérsékletű, relativisztikusan elfajult elektrongáz elméletét a nemrelativisztikus elektrongázhoz hasonló módon építjük fel, az egyetlen lényeges különbség, hogy most a p impulzusú elektron energiája (18.1) helyett a relativisztikus

$$u = \sqrt{(mc^2)^2 + (cp)^2} \qquad (20.21.1)$$

kifejezés lesz. Ha a (12.2) alatti

$$Z = \frac{4\pi V p^2 \Delta p}{h^3}$$

cellaszámot a p impulzus helyett az u energiával fejezzük ki, akkor (21.1) alapján a következő kifejezést kapjuk:

$$Z = \frac{4\pi V u \sqrt{u^2 - (mc^2)^2}}{h^3 c^3} \Delta u. \qquad (20.21.2)$$

Az elektronok eloszlásfüggvényét $T = 0$ esetén igen könnyen felírhatjuk. A 19. §-ban már láttuk, hogy abszolút zérus hőmérsékleten egy bizonyos u_F értékig minden cella két (ellentétes spinű) elektronnal van betöltve, az u_F energiaérték

feletti cellák pedig üresek. (19.4) relativisztikus megfelelője a következő lesz:

$$\Delta N = 0\,, \qquad \text{ha} \quad u > u_F\,,$$
$$\Delta N = \frac{8\pi V u\sqrt{u^2-(mc^2)^2}}{h^3c^3}\,\Delta u\,, \qquad \text{ha} \quad mc^2 < u < u_F\,. \tag{20.21.3}$$

Ha összegezünk minden energiarétegre, úgy az N elektronszámot kapjuk. Természetesen az összegezés helyett u szerinti integrálásra térhetünk át, mert Δu tetszőlegesen kicsinyre választható:

$$N = \frac{8\pi V}{h^3c^3}\int_{mc^2}^{u_F} u\sqrt{u^2-(mc^2)^2}\,du = \frac{8\pi V m^3c^3}{3h^3}\left[\left(\frac{u_F}{mc^2}\right)^2-1\right]^{3/2}. \tag{20.21.4}$$

Ebből kiszámíthatjuk az u_F maximális elektronenergiát, mint az N/V elektronsűrűség függvényét:

$$u_F = mc^2\sqrt{1+\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\frac{h^2}{m^2c^2}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}}\,. \tag{20.21.5}$$

Az elektrongáz energiáját úgy kapjuk meg, ha az egyes Δu energiahéjakban levő elektronok ΔN számát megszorozzuk az u energiával és összegezünk minden energiahéjra. (21.3) alapján írhatjuk, hogy

$$U_0 = \frac{8\pi V}{h^3c^3}\int_{mc^2}^{u_F} u^2\sqrt{u^2-(mc^2)^2}\,du\,.$$

Vezessük be az $x = u/mc^2$ integrációs változót. Ezzel az energia a következő lesz:

$$U_0 = \frac{8\pi V m^4c^5}{h^3}\int_1^{\frac{u_F}{mc^2}} x^2\sqrt{x^2-1}\,dx = \frac{8\pi V m^4c^5}{h^3}f\left(\frac{u_F}{mc^2}\right). \tag{20.21.6}$$

Az itt fellépő

$$f(z) = \int_1^z x^2\sqrt{x^2-1}\,dx \tag{20.21.7}$$

integrál elemi függvényekkel zárt alakban kifejezhető:

$$f(z) = \frac{1}{8}\left[z(2z^2-1)\sqrt{z^2-1} - \ln(z+\sqrt{z^2-1})\right]. \tag{20.21.8}$$

(21.5) és (21.6) kombinálásával megkaphatjuk az elektrongáz U_0/V energiasűrűségét mint az N/V elektronsűrűség függvényét. Nézzük meg ennek az összefüggésnek aszimptotikus viselkedését az igen kicsi és az igen nagy elektronsűrűségek esetén.

ben. Igen kis sűrűség esetén (21.5)-öt sorba fejthetjük $\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$ hatványai szerint és kapjuk, hogy

$$u_F = mc^2\left[1 + \frac{1}{8}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\frac{h^2}{m^2c^2}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} - \frac{1}{128}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{4/3}\frac{h^4}{m^4c^4}\left(\frac{N}{V}\right)^{4/3} + \ldots\right]. \quad (20.21.9)$$

Látjuk, hogy u_F/mc^2 csak korrekciós tagokban tér el a + 1 értéktől. Ezért meg kell határoznunk a (21.8) alatti $f(z)$ függvény viselkedését a $z \to +1$ határesetben. Elemi számítással kapjuk, hogy $f(z)$ aszimptotikus viselkedését a következő sor írja le:

$$f(z) = \frac{2\sqrt{2}}{3}(z-1)^{3/2} + \frac{9\sqrt{2}}{10}(z-1)^{5/2} + \ldots \quad (20.21.10)$$

(21.9)-et (21.10)-be téve és N/V hatványai szerint rendezve, az energiakifejezésben fellépő f függvényérték sorbafejtett alakját kapjuk meg

$$f\left(\frac{u_F}{mc^2}\right) = \frac{h^3}{8\pi m^3c^3}\frac{N}{V} + \frac{3}{320\pi}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\frac{h^5}{m^5c^5}\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} + \ldots \quad (20.21.11)$$

Ezt behelyettesítve (21.6)-ba, megkapjuk a kis sűrűségek esetére érvényes energiaformulát. V-vel való osztás után az eredmény a következő lesz:

$$\frac{U_0}{V} = mc^2\frac{N}{V} + \kappa_F\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} + \ldots, \quad (20.21.12)$$

ahol κ_F-fel ismét a (19.7) alatti univerzális állandót jelöltük. A sor első tagjának jelentése nyilvánvaló: ez adja az elektrongáz nyugalmi energiájának sűrűségét, hiszen egyetlen elektron nyugalmi energiája mc^2 és az egységnyi térfogatra N/V elektron jut. Mivel (21.1) tartalmazza az elektron nyugalmi energiáját is, ezért ennek a tagnak a fellépte természetes. A (21.12) sor második tagja pontosan megegyezik (19.8)-cal. A nyugalmi energiától való eltérés, tehát a kinetikus energia, a kis sűrűség határesetében átmegy a nemrelativisztikus formulába. Ez azért természetes, mert kis sűrűségek esetén a maximális kinetikus energia is kicsiny, ezért a relativisztikus korrekciók elhanyagolhatókká válnak.

Most vizsgáljuk meg az igen nagy sűrűségek határesetét. Ha N/V nagyon nagy, úgy (21.5) négyzetgyökjeles kifejezésében a + 1-es tag elhanyagolható lesz az $(N/V)^{2/3}$-nal arányos tag mellett. Tehát

$$u_F = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} hc\left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}. \quad (20.21.13)$$

Igen nagy sűrűség tehát igen nagy u_F-re vezet. A (21.8) alatti függvény viselkedését a $z \to +\infty$ esetben a következő formula írja le:

$$f(z) = \frac{z^4}{4}. \quad (20.21.14)$$

Ha ezeket az aszimptotikus formulákat behelyettesítjük (21.6)-ba, úgy az energiasűrűségre kapjuk, hogy

$$\frac{U_0}{V} = \frac{3}{8}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} hc\left(\frac{N}{V}\right) = \kappa_R \left(\frac{N}{V}\right)^{4/3}, \tag{20.21.15}$$

ahol

$$\kappa_R = \frac{3}{8}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} hc.$$

Igen nagy sűrűségek esetén az energiasűrűség az elektronsűrűség $\frac{4}{3}$-ik hatványával lesz arányos. Érdekes, hogy (21.5)-ben nem lép fel az m elektrontömeg. Ez azzal magyarázható, hogy az energia túlnyomóan nagy része olyan nagy impulzusú elektronoktól származik, melyeknél a (21.1) energiaformulában az mc^2 nyugalmi energia elhanyagolható cp mellett és így az

$$u = cp \tag{20.21.16}$$

extrém relativisztikus közelítés használható. Ha az elektrongáz számításánál (21.16)-ot vesszük alapul, akkor pontosan a (21.15) eredményre jutunk. Mivel a (21.16) extrém relativisztikus energiakifejezés már nem tartalmazza az tömeget, így érthető, hogy az U_0/V energiasűrűség képletében sem fog az fellépni.

Hátra van még az elektrongáz nyomásának meghatározása. A nyomást általában a termodinamika

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V}$$

formulájából számíthatjuk, ahol az F szabad energiát konstans N és konstans T mellett kell a V térfogat szerint differenciálni. A $T = 0$ abszolút zérus hőmérsékleten azonban a szabad energia egyenlő az U_0 energiával, hiszen általában $F = U - TS$ és $T \to 0$ esetén $\rho \to 0$, a termodinamika harmadik főtétele szerint. Tehát abszolút zérus hőmérsékleten a nyomás

$$p = -\frac{\partial U_0}{\partial V}$$

lesz, ahol a differenciálást konstans N mellett kell elvégezni. Ha a (21.6) energiakifejezést V szerint differenciáljuk, úgy a nyomásra kapjuk, hogy

$$p = \frac{8\pi m^4 c^5}{3h^3} g\left(\frac{u_F}{mc^2}\right), \tag{20.21.17}$$

ahol g a következő függvényt jelöli

$$g(z) = z(z^2-1)^{3/2} - f(z) = \frac{1}{8}\left[z(2z^2-5)\sqrt{z^2-1} + 3\ln\left(z + \sqrt{z^2-1}\right)\right]. \tag{20.21.18}$$

(21.5) és (21.17) kombinálásával a nyomást mint az N/V elektronsűrűség függvényét állíthatjuk elő. Ez az összefüggés lesz a relativisztikusan elfajult elektrongáz állapotegyenlete. Ennek a nyomás-sűrűség összefüggésnek fontos szerepe van az ún. fehér törpe csillagok belső szerkezetének tanulmányozásánál.

Írjuk fel a (21.18) alatti $g(z)$ függvény aszimptotikus viselkedését a $z \to +1$ és a $z \to +\infty$ határesetekben:

$$g(z) \approx \frac{4\sqrt{2}}{5}(z-1)^{5/2}, \quad \text{ha} \quad z \to +1, \tag{20.21.19}$$

$$g(z) \approx \frac{z^4}{4}, \quad \text{ha} \quad z \to +\infty. \tag{20.21.20}$$

Az igen kis sűrűségű elektrongáz nyomását úgy kapjuk meg, ha a (21.9) sorfejtésből az első el nem tűnő tagot írjuk (21.19) argumentumába. Kis sűrűségek esetén tehát

$$g\left(\frac{u_F}{mc^2}\right) = \frac{3}{160\pi}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\frac{h^5}{m^5c^5}\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3}.$$

Ebből a nyomás:

$$p = \frac{1}{20}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\frac{h^2}{m}\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} = \frac{2}{3}\kappa_F\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3}. \tag{20.21.21}$$

Alacsony sűrűségekre tehát visszakapjuk a nemrelativisztikus (19.11) nyomásformulát. Igen nagy sűrűségek esetében pedig u_F-et (21.13)-ból vehetjük és ezt használjuk fel (21.20) argumentumában. A nagysűrűségű elektrongáz esetén tehát:

$$g\left(\frac{u_F}{mc^2}\right) = \frac{3}{64\pi}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}\frac{h^4}{m^4c^4}\left(\frac{N}{V}\right)^{4/3}.$$

Ezt téve a nyomás képletébe, kapjuk, hogy

$$p = \frac{1}{8}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}hc\left(\frac{N}{V}\right)^{4/3} = \frac{1}{3}\kappa_R\left(\frac{N}{V}\right)^{4/3}. \tag{20.21.22}$$

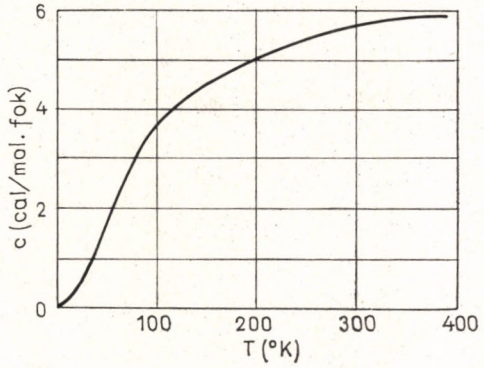
Az igen nagy sűrűségű, tehát extrém relativisztikus elektrongáz nyomása az $\frac{N}{V}$ sűrűség $\frac{4}{3}$-ik hatványával arányos.

22. §. A szilárd testek fajhője

A 9. §-ban ismertettük a szilárd testek fajhőjének a klasszikus statisztikán alapuló elméletét. Eredményül a (9.13) *Dulong–Petit*-szabályt kaptuk, mely szerint a szilárd anyag mólhője az anyagi minőségtől és a hőmérséklettől független

$$3R \approx 6 \text{ cal/mólfok}$$

érték. Említettük, hogy alacsony hőmérsékleteken a mólhő eltér a *Dulong–Petit*-féle értéktől és zérus felé tart. Ezt a jelenséget illusztrálja az 58. ábra, mely a fémes réz mólhőjét ábrázolja a hőmérséklet függvényében. A *Dulong–Petit*-szabály elégtelenségét csak a kvantumstatisztikára alapozott fajhőelmélettel lehet megmagyarázni. A következőkben ezt az elméletet fogjuk ismertetni.



58. ábra. Szilárd testek fajhője a hőmérséklet függvényében

A szilárd anyag fajhője két részből tevődik össze. Az első rész a kristályban elhelyezkedő részecskék rezgésétől származik, a másik rész csak a fémek esetében lép fel és a vezetési elektronok fajhőjével egyenlő. A vezetési elektronokkal a 20. §-ban már foglalkoztunk, most a rácsrezgésektől származó fajhőt fogjuk meghatározni, ami tulajdonképpen a teljes fajhő döntő részét szolgáltatja.

A *Dulong–Petit*-szabály elégtelenségének fizikai okára első ízben EINSTEIN mutatott rá. A kristályrács – szabadsági fokok szempontjából – éppen úgy oszcillátorok halmazának tekinthető, mint az elektromágneses tér. EINSTEIN feltételezte, hogy egy ν frekvenciás rácsrezgés energiája csak $h\nu$ energiakvantumokból állhat. Egy-egy ilyen energiakvantumot „megszemélyesítve" hangkvantumnak, vagy *fonon*nak nevezzük. Egy fonon energiája tehát

$$u = h\nu. \tag{20.22.1}$$

A fononok a *Bose–Einstein*-statisztikát követik, tehát a fononrendszer energiáját a (11.17) általános képlet alapján számíthatjuk. De mivel a fononok száma nem állandó, ezért a *Bose–Einstein*-statisztika felépítésénél bevezetett α *Lagrange*-multiplikátor értéke zérus, és a (11.17)-ben szereplő

$$A = e^{-\alpha} = 1$$

lesz. A T hőmérsékletű kristálynak a rácsrezgésektől származó energiája tehát

$$U(T) = \sum \frac{Z_i h\nu_i}{e^{\frac{h\nu_i}{kT}} - 1}.$$

Az i-szerinti összegezés az egyes energiarétegekre vonatkozik. Mivel egy fonon energiáját a ν frekvenciája (22.1) értelmében egyértelműen meghatározza, ezért az i-szerinti összegezésről áttérhetünk a ν szerinti integrálásra. A Z_i cellaszám helyébe ekkor természetesen a tizenkilencedik fejezetben bevezetett $Z(\nu)$ frekvenciaeloszlási függvény kerül. Tehát

$$U(T) = \int_0^\infty \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} Z(\nu) d\nu . \tag{20.22.2}$$

Az állandó térfogathoz tartozó hőkapacitást a

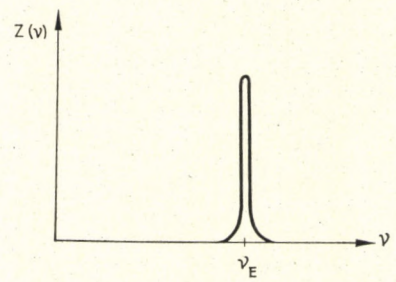
$$C_V = \frac{dU}{dT}$$

formulából kapjuk

$$C_V(T) = k \int_0^\infty \frac{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 e^{\frac{h\nu}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1\right)^2} Z(\nu) d\nu . \tag{20.22.3}$$

A frekvenciaeloszlási függvény birtokában a hőkapacitás egy egyszerű integrál segítségével kiszámítható. Ha a fenti képletet egy mól anyagra alkalmazzuk, akkor megkapjuk a mólhőt, mint a hőmérséklet függvényét. A tizenkilencedik fejezet 27. §-ban ismertetett módon számított $Z(\nu)$-vel a tapasztalattal nagyon jól egyező mólhőt kapunk. A mólhőnek ily módon való számítását BORN és KÁRMÁN végezték el.

Az alábbiakban a mólhőnek két leegyszerűsített számítását ismertetjük. Elsőnek az *Einstein*-modellt kell említenünk, történelmileg ez volt az első olyan mólhőkifejezés, mely a kvantumstatisztika alapján nyert levezetést. EINSTEIN abból a – meglehetősen durva – leegyszerűsítő feltevésből indult ki, hogy a kristály valamennyi rácsfrekvenciája egy közös ν_E értékkel egyenlő, vagy legalábbis annak közvetlen környezetébe esik. ν_E az anyagi minőségre jellemző állandó. Ebben az esetben $Z(\nu)$ csak ν_E környékén fog eltérni a zérus értéktől (59. ábra). Ekkor



59. ábra. Az *Einstein*-féle frekvenciaeloszlási függvény

(22.3)-ban a $Z(\nu)$ előtti törtkifejezésben ν helyébe ν_E-t írhatunk és a törtet kiemelhetjük az integráljel elé

$$c_V(T) = k \frac{\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 e^{\frac{\Theta}{T}}}{\left(e^{\frac{\Theta}{T}} - 1\right)^2} \int_0^\infty Z(\nu) d\nu ,$$

ahol $\Theta = h\nu_E/k$. Mivel $Z(\nu)$ eleget tesz a (25.11) normálási feltételnek, és mivel egy mól anyag esetén a független koordináták száma $f = 3L$, ezért az *Einstein*-féle mólhőképlet a következő lesz:

$$c_V(T) = 3R \frac{\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 e^{\frac{\Theta}{T}}}{\left(e^{\frac{\Theta}{T}} - 1\right)^2} , \qquad (20.22.4)$$

ahol figyelembe vettük, hogy $kL = R$. Ez a mólhőkifejezés kvalitatíve számot ad a mólhő hőmérséklet függéséről. Igen magas hőmérséklet, $T \gg \Theta$ esetén (22.4)-et sorbafejthetjük $\frac{\Theta}{T}$ hatványai szerint és ekkor kapjuk, hogy

$$c_V(T) = 3R \left(1 + \frac{\Theta}{2T} + \ldots\right). \qquad (20.22.5)$$

Láthatjuk tehát, hogy ha $\frac{\Theta}{T} \ll 1$, úgy a mólhő aszimptótikusan átmegy a $c_V = 3R$ *Dulong–Petit* szabályba. Ez általában már szobahőmérsékleten bekövetkezik. Természetesen (22.5) alkalmazhatósága függ az anyagi minőségre jellemző Θ konstanstól is. Egy extrém példa a gyémánt esete, ahol az igen nagy keménység miatt a rácsfrekvenciák is igen nagyok, $\nu_E \simeq 4 \cdot 10^{13}\ \mathrm{s}^{-1}$ nagyságrendűek. Ebből

$$\Theta = \frac{h\nu_E}{k} \simeq 2 \cdot 10^3\ \mathrm{K}^\circ$$

adódik és szobahőmérsékleten $T = 290\ \mathrm{K}^\circ$. Tehát gyémántnál szobahőmérsékleten semmiképpen sem áll fenn a $T \gg \Theta$ egyenlőtlenség, következésképpen a gyémánt esetében még szobahőmérsékleten is erős anomáliát tapasztalunk a *Dulong-Petit*-törvény szempontjából.

Alacsony hőmérsékleten, $T \ll \Theta$ esetén, (22.4) a következő közelítő képlettel helyettesíthető:

$$c_V(T) = 3R \left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 e^{-\frac{\Theta}{T}} . \qquad (20.22.6)$$

Ebből látszik, hogy $T \to 0$ esetén c_V igen gyorsan zérushoz tart. Az *Einstein*-féle mólhőképlet tehát számot ad a mólhő eltűnéséről alacsony hőmérsékleteken.

Mindazonáltal, az *Einstein*-féle fajhőelmélet nem egyezik meg teljesen a tapasztalattal. Az alacsony hőmérsékletekre érvényes (22.6) formulában a mólhő zérussá válását az $e^{-\frac{\Theta}{T}}$ exponenciális tényező írja le. A tapasztalat szerint azonban a mólhő $T \to 0$ esetén nem exponenciálisan, hanem T^3-szerűen tűnik el. A hibát nyilván az okozza, hogy az *Einstein*-elmélet túlságosan leegyszerűsítve a tényeket, az összes rácsfrekvenciát egyenlőnek vette.

A tapasztalattal sokkal jobban egyező mólhőképletet kapunk, ha a $Z(\nu)$ frekvenciaeloszlást a *Debye*-féle közelítő formulából vesszük. Ez, mint láttuk, figyelembe veszi az akusztikus rácsrezgések frekvenciáinak a hullámhossztól való függését. (19.28.41)-et (22.3)-ba téve és $N = L$-et írva, azaz egy mólra szorítkozva, kapjuk, hogy

$$c_V(T) = \frac{9R}{\nu_D^3} \int_0^{\nu_D} \frac{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)^2 e^{\frac{h\nu}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1\right)^2} \nu^2 d\nu , \tag{20.22.7}$$

vagy bevezetve a

$$\Theta = \frac{h\nu_D}{k}$$

karakterisztikus hőmérsékletet és az $x = \frac{h\nu}{kT}$ integrációs változót, írhatjuk, hogy

$$c_V(T) = 9R \left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx . \tag{20.22.8}$$

Ez a formula kvantitatíve sokkal jobb egyezésben van a tapasztalattal, mint a (22.4) *Einstein*-féle formula. Érdekes megvizsgálni a fenti *Debye*-féle fajhőkifejezést igen magas és igen alacsony hőmérsékleteken. Ha T magas, azaz $T \gg 0$, akkor (22.8)-ban az integrál felső határa igen kis szám lesz, ekkor az integrandust sorbafejthetjük x hatványai szerint és elég az első néhány tagot megtartani. Mivel

$$\frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} = x^2 \left(1 - \frac{1}{12} x^2 + \ldots\right),$$

ezért (22.8) integrálása a következő eredményt adja:

$$c_V(T) = 3R \left(1 - \frac{1}{20}\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 + \ldots\right). \tag{20.22.9}$$

Látjuk, hogy $T \to \infty$ esetén a *Debye*-féle mólhőkifejezés átmegy a *Dulong–Petit*-szabály képletébe:

$$c_V(T) \to 3R, \text{ ha } T \to \infty. \tag{20.22.10}$$

(22.9) azt is mutatja, hogy a *Debye*-féle mólhő $\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2$-szerint simul a $3R$ aszimptotikus értékhez, tehát gyorsabban, mint az *Einstein*-féle mólhő, mert annak aszimptotikus viselkedését, amint (22.5)-ből látjuk, Θ/T írja le.

Igen alacsony hőmérsékleten $T \ll \Theta$, ekkor (22.8) integráljában a felső határ helyébe $+\infty$-t írhatunk, tehát

$$c_V(T) = 9R\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}\, dx \qquad (20.22.11)$$

lesz. Az itt fellépő integrált parciális integrálással átalakítjuk:

$$\int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}\, dx = 4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1}\, dx .$$

A jobboldalon fellépő integrál értékét a 15. §-ban már kiszámítottuk. (15.20) alapján kapjuk, hogy

$$\int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}\, dx = \frac{4\pi^4}{15} .$$

Ezt beírva (22.11)-be, az alacsony hőmérsékletekre vonatkozó mólhő végleges formulája a következő lesz:

$$c_V(T) = \frac{12\pi^4}{5} R\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 = 233{,}8\, R\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 . \qquad (20.22.12)$$

A *Debye*-féle fajhőkifejezés tehát az abszolút zérus fok közelében T^3-szerűen viselkedik, ami teljes összhangban van a tapasztalati adatokkal.

Végül röviden megemlítjük, hogy rendkívül magas hőmérsékleteken a mólhő ismét eltér a *Dulong–Petit*-szabály adta $3R$ értéktől. Ennek a jelenségnek BORN és BRÓDY szerint az a magyarázata, hogy nagyon magas hőmérsékleteken a kristályrács rezgései már nem tekinthetők harmonikus rezgéseknek, és ekkor a (22.1) törvény érvényét veszti. BORN és BRÓDY kidolgozták az anharmonikus effektusokat is figyelembe vevő mólhőelméletet, de ezzel itt nem foglalkozunk.

ÖTÖDIK RÉSZ

KVANTUMMECHANIKA

HUSZONEGYEDIK FEJEZET

A BOHR-FÉLE ATOMELMÉLET

1. §. A hidrogénatom Bohr-féle elmélete

A *Rutherford*-féle atommodell, amelyet RUTHERFORD az α-részek szóródásának értelmezésére állított fel, továbbá EINSTEIN foton-hipotézise voltak főbb vonásaiban azok az alapok, amelyekre BOHR elméletét felépítette és amelyekkel mi már az előzőkben röviden megismerkedtünk.

BOHR közvetlenül RUTHERFORD modelljéből indult ki, amely szerint az atom elektronjai bolygók módjára keringenek a mag körül. Itt azonban azonnal egy nehézség lép fel. Ha ugyanis az elektronok keringenek a mag körül, akkor a klaszszikus elektrodinamika szerint az atomnak elektromágneses sugárzást kellene kibocsátania, mert a mag és a keringő elektronok rendszere általában változó elektromos momentummal bír, ami különösen egy elektron esetében nyilvánvaló. Az atom elektromágneses sugárzása következtében az elektronok veszítenének energiájukból és bizonyos idő múlva spirális pályán mozogva, beleesnének a magba. Tehát a klasszikus elmélet szerint RUTHERFORD modellje instabilis, ezért mélyreható módosításra szorult és ezt BOHR adta meg. BOHR feltevése szerint az elektronok csak bizonyos meghatározott pályákon keringhetnek a mag körül. Ellentétben az elektrodinamikával, BOHR feltételezte, hogy az elektronok ilyen pályákon való keringése közben az atom nem sugároz. Az egyes pályákon az elektron energiájának egészen meghatározott értéke van és az elektron csakis az ilyen stacionárius pályáknak megfelelő energiaértékeket veheti fel, amelyek között, hasonlóképpen, mint az egyes pályák között, nincs folytonos átmenet. Az atom energiáját tehát csakis ugrásszerűen változtathatja, miközben egyik elektronja az egyik lehetséges pályáról átmegy egy másikra. Ebből egyúttal következik, hogy az atom nem vehet fel, vagyis nem abszorbeálhat tetszőleges, hanem csakis egészen meghatározott energiamennyiségeket. Így pl. az atom csak olyan fényt képes abszorbeálni, amelynél az egyes fotonok energiája, $h\nu$, megegyezik az atom két energiaállapotának különbségével, amidőn a foton energiája az atom energiáját emeli oly módon, hogy az atomnak egy megfelelő energiájú elektronját egy a $h\nu$-nek megfelelő magasabb energianívóba emeli. Az ellenkező folyamatnál, midőn az atom egyik elektronja egy magasabb energiaállapotból átmegy egy alacsonyabba, az atom a két energiaállapot közti különbséget egy $h\nu$ energiakvantum alakjában sugározza ki mint elektromágneses sugárzást.

Mindezt a következő egyenlettel fejezzük ki:

$$E_n - E_s = h\nu, \tag{21.1.1}$$

ahonnan az atom által elnyelt, ill. kisugárzott fény frekvenciájára, vagy hullámszámára a következő kifejezést nyerjük:

$$\nu = \frac{E_n - E_s}{h}, \qquad \bar{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{E_n - E_s}{hc}. \tag{21.1.2}$$

Az (1.1) egyenletet, amely az egész elméletben alapvető fontosságú, nevezzük *Bohr-féle frekvenciafeltételnek*. Ezzel már a *Franck–Hertz*-kísérletek tárgyalásánál is találkoztunk.

BOHR elméletét legelőször a legegyszerűbb atomra, a H-atomra dolgozta ki, amelynél a mag körül 1 elektron kering. Itt nagyon egyszerűen kaphatjuk az egyes lehetséges pályákat és energiaértékeket. Az elektront a közte és az atommag között működő elektrosztatikus vonzóerő köti az atommaghoz. Ha csak körpályákra szorítkozunk és r-rel jelöljük a pálya sugarát, akkor ennek az erőnek abszolút értéke $\frac{e^2}{r^2}$, ahol e a pozitív elemi töltés. Ezzel az erővel ellentétes irányú az elektronra ható centrifugális erő, melynek abszolút értéke $\frac{m_0 v^2}{r}$, ahol m_0 jelenti az elektron tömegét, v a sebességét. Egy stacionárius pályán ennek a két erőnek nagyságra nézve egyenlőnek kell lennie, tehát nyerjük, hogy

$$\frac{e^2}{r^2} = \frac{m_0 v^2}{r}. \tag{21.1.3}$$

Az elektron pályájának és energiájának kiszámítására szükségünk van még egy egyenletre. Ezt szolgáltatja az ún. *Bohr-féle kvantumfeltétel*, amely megszabja, hogy melyek a lehetséges pályák és energiák H esetében. Ez a feltétel egy önkényes megszorítást tartalmaz, amelyet máshonnan levezetni nem lehet és amely körpályák esetében azt mondja ki, hogy az impulzusmomentum (mely körpályák esetében $m_0 v r$-rel egyenlő) csakis $\frac{h}{2\pi}$-nek egész számú sokszorosaival lehet egyenlő, tehát

$$m_0 v r = n \frac{h}{2\pi}, \tag{21.1.4}$$

ahol n egész szám. Ezt az egész számot *kvantumszámnak* nevezzük (n a zérus értéket nem veheti fel).

A kvantumfeltétel általánosabban is megfogalmazható, éspedig a következő alakban

$$\oint p_i dq_i = n_i h, \tag{21.1.5}$$

$$(i = 1, 2, \ldots, f)$$

ahol a q_i-k a rendszer általános koordinátái, a p_i-k pedig az általános impulzusok.

Ezek definíciója a következő:

$$p_i = \frac{\partial E_k}{\partial \dot{q}_i},$$

ahol E_k a kinetikus energia. Általában annyi ilyen kvantumfeltétel van, amennyi az általános koordináták száma. Körpályák esetében általános koordináta gyanánt a ϕ azimutot kell tekintenünk. Mivel körpályák esetében $E_k = \frac{1}{2} m_0 r^2 \dot{\phi}^2$, nyerjük, hogy $p = m_0 r^2 \dot{\phi} = m_0 r v$ (ugyanis $r\dot{\phi} = v$). Körpályák esetében a kvantumfeltétel általános alakja tehát a következő eredményt szolgáltatja

$$\oint p dq = m_0 v r \oint d\phi = 2\pi m_0 r v = nh, \tag{21.1.6}$$

ami megegyezik (1.4)-gyel.

Az (1.3) és (1.4) egyenletek segítségével kiszámíthatjuk az egyes körpályák sugarát és a nekik megfelelő sebességet. (1.4)-et négyzetre emelve és (1.3)-mal szorozva nyerjük, hogy

$$m_0^2 r^2 v^2 \frac{e^2}{r^2} = n^2 \frac{h^2}{4\pi^2} \frac{m_0 v^2}{r}. \tag{21.1.7}$$

Ebből következik, hogy az egyes körpályák sugara

$$r_n = \frac{h^2}{4\pi^2 m_0 e^2} n^2, \tag{21.1.8}$$

ahol az egyes n-ekhez tartozó sugarakat az n indexszel különböztetjük meg egymástól. r_n-nek ezt az értékét (1.4)-be helyettesítve, nyerjük az elektron sebességét az n-edik pályán:

$$v_n = \frac{2\pi e^2}{h} \frac{1}{n}. \tag{21.1.9}$$

Az egymás után következő pályák sugarai tehát úgy aránylanak egymáshoz, mint a megfelelő egész számok négyzetei, az egyes pályáknak megfelelő elektronsebességek pedig, mint a megfelelő egész számok reciprokjai. A legbelső pálya sugara, amely $n = 1$-nek felel meg,

$$r_1 = \frac{h^2}{4\pi^2 m_0 e^2} = 0{,}529 \cdot 10^{-8}\,\text{cm}. \tag{21.1.10}$$

Ezen a pályán az elektron sebessége $v_1 = \frac{2\pi e^2}{h} = 2{,}2 \cdot 10^8\,\text{cms}^{-1}$.

Bennünket főképpen az elektron energiája érdekel, amely a potenciális és kinetikus energiából tevődik össze:

$$E = -\frac{e^2}{r} + \frac{1}{2} m_0 v^2. \tag{21.1.11}$$

Az (1.3) egyenletből következik, ha $\frac{r}{2}$-vel szorzunk, hogy

$$\frac{1}{2}\frac{e^2}{r} = \frac{1}{2} m_0 v^2 .$$

Ezt felhasználva, (1.11)-ből nyerjük, hogy

$$E = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{r} . \tag{21.1.12}$$

r-nek megfelelő értékeit (1.8)-ból beírva és a megfelelő energiaértékeket is indexszel látva el, arra az eredményre jutunk, hogy

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^2}\frac{1}{n^2} . \tag{21.1.13}$$

Ez a formula szolgáltatja a H-atom lehetséges energiaértékeit, amelyek a különböző sugarú pályáknak felelnek meg. A *Bohr*-féle frekvenciafeltétel alapján ezzel a formulával azt nyerjük, hogy midőn az elektron az n kvantumszámú pályáról átugrik egy alacsonyabb, s kvantumszámú pályára, a kisugárzott fény hullámszáma

$$\bar{\nu} = \frac{E_n - E_s}{hc} = \frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^3 c}\left(\frac{1}{s^2} - \frac{1}{n^2}\right) . \tag{21.1.14}$$

Az atomi állandók értékét beírva azt találták, hogy a $\frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^3 c}$ faktor kisebb eltéréstől eltekintve, amelyre rögtön rátérünk, megegyezik a kísérletileg talált *Rydberg*-állandóval. Tehát a BOHR által levezetett (1.14) formula megegyezik a kísérleti formulákkal, vagyis R számára a következő formulát nyerjük

$$R = \frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^3 c} , \tag{21.1.15}$$

amely csak atomi állandókat tartalmaz. Tehát BOHRnak a H-atomról alkotott elmélete meg tudta magyarázni a H spektrumát és értelmezni tudta a termeket. Az egyes szerieszeket (1.14)-ből úgy kapjuk, hogy s helyébe az 1, 2, 3, 4 egész számok egyikét írjuk, n pedig csakis az egyes s értékeknél nagyobb egész számokkal lehet egyenlő, ami megfelel annak, hogy pl. fényemissziónál az atomban levő elektron magasabb energiájú állapotból alacsonyabb energiájú állapotba megy át. A legmélyebb energiájú állapot $n = 1$-nek felel meg, midőn, mint láttuk, a pálya sugara a legkisebb. Ezt az állapotot nevezzük a H alapállapotának. Az elektron, vagyis az atom energiája ebben az állapotban, mint (1.13)-ból látható, $E_1 = -Rhc = -13{,}54$ eV. Ennek az energiának abszolút értékét nevezzük a H-atom *ionizációs energiájának*, mert ekkora energiára van szükség, hogy az alapállapotban levő elektront az atom kötelékéből eltávolítsuk, vagyis az atomot ionizáljuk.

Ezt az elméletet egyszerűen lehet átvinni arra az esetre, amikor a mag töltése általában $+Ze$ és ekörül 1 elektron kering. Ez az eset áll fenn pl. az egyszer ionizált He-nál, a kétszer ionizált Li-nál stb. A számítás éppen így végezhető el, az energiaformulában és $\bar{\nu}$ kifejezésében ekkor a Z^2 faktor lép fel, aminek megfelelően a spektrumvonalak az ultraibolya felé tolódnak el. Természetesen az r_n- és v_n-re levezetett formulák is módosulnak.

Említettük, hogy az elméletileg levezetett R faktor és a kísérleti R faktor között egy kis eltérés mutatkozott. A *Bohr*-elmélet igen nagy sikere volt, hogy ezt egyszerűen tudta értelmezni. Eddigi számításainkban ugyanis a magot nyugvónak tekintettük, pontosabb számításokban azonban figyelembe kell venni, hogy a mag is mozog, mégpedig az elektron és a mag a rendszer nyugvó súlypontja körül kering. A számítás igen egyszerűen végezhető el és arra az eredményre vezet, hogy R helyébe a következő faktor lép:

$$\frac{R}{1+\frac{m_0}{M}}, \tag{21.1.16}$$

ahol m_0 az elektron, M pedig a mag tömege. Így pl. a H *Rydberg*-állandója

$$R_{\mathrm{H}}=\frac{R}{1+\frac{m_0}{M_{\mathrm{H}}}},$$

az egyszeresen ionizált He-é pedig

$$R_{\mathrm{He}}=\frac{R}{1+\frac{m_0}{M_{\mathrm{He}}}}.$$

Ha a mag mozgását figyelembe vesszük, akkor a spektrumvonalak hullámszámainak formuláiba R helyébe $\dfrac{R}{1+\frac{m_0}{M}}$ lép. A mérések ezt teljes mértékben igazolják.

Míg csak körpályákra szorítkozunk, addig a H-nál egy kvantumállapot jellemzésére egy kvantumszám elegendő, ha azonban az elektron számára ellipszispályákat is megengedünk, amelyeknek egyik gyújtópontjában van a mag, akkor, mint SOMMERFELD kimutatta, két kvantumfeltétel és ennek megfelelően két kvantumszám lép fel. Ekkor ugyanis az elektron helyzetét két koordináta, az azimut, ϕ, és az elektronnak a magtól való távolsága, r jellemzi. Ha a megfelelő általános impulzusokat p_ϕ-vel és p_r-rel jelöljük, akkor a kvantumfeltételek a következőképpen írhatók

$$\oint p_\phi d\phi = kh, \tag{21.1.17}$$

$$\oint p_r dr = n_r h, \tag{21.1.18}$$

ahol k és n_r egész számok, mégpedig k az ún. *azimutális*, n_r pedig a *radiális kvantumszám*. Az integrációt ki kell terjeszteni az elektronnak egy teljes körülfutására. Az (1.17) egyenlet azt adja, hogy az impulzusmomentum abszolút értéke $\frac{h}{2\pi}$ egész-számú sokszorosa, vagyis az impulzusmomentum abszolút értéke $k\frac{h}{2\pi}$. Ezekre a kvantumszámokra a következő kikötés áll fenn: az n_r radiális kvantumszám nullától kezdve vehet fel egész számú értékeket, beleértve a nullát is, a k azimutális kvantumszám ellenben a nulla értéket nem veheti fel. Hogy a tapasztalattal megegyezésben maradjunk, szükségesnek bizonyult k helyett az ún. mellékkvantumszámot, l-et bevezetni, amely k-nál 1-gyel kisebb egész szám, vagyis $k = l + 1$, tehát l a nulla értéket is felveheti. A tapasztalat szerint az impulzusmomentum abszolút értéke nem $k\frac{h}{2\pi}$, hanem $l\frac{h}{2\pi}$.

Az

$$n = n_r + k = n_r + l + 1 \tag{21.1.19}$$

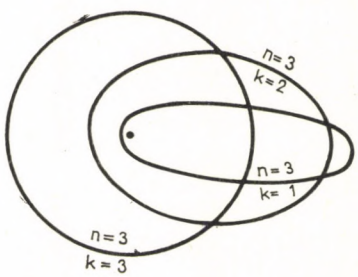
összeget nevezzük *főkvantumszám*nak. Megadott n főkvantumszámnál k legnagyobb értéke n, míg l legnagyobb értéke $n-1$.

Az (1.17) és (1.18) kavntumfeltételek körpálya esetén az (1.6) egyenletre redukálódnak; ugyanis körpálya esetén $p_r = 0$, tehát csak az (1.17) marad meg. Körpálya esetén tehát $k = n$.

Az elektron ellipszispályájának fél nagytengelyére, a-ra és fél kistengelyére, b-re Ze magtöltés esetén a következő formulák adódnak:

$$a = \frac{n^2}{Z} a_H, \qquad b = \frac{nk}{Z} a_H, \tag{21.1.20}$$

ahol a_H a legbelső H-pálya (körpálya) rádiusza. Ezekből a formulákból is látható, hogy $k = n$ esetén az elektronpálya kör. Ha $k \neq n$, akkor a pálya ellipszis, amely annál nyúltabb, minél kisebb k értéke az n-hez képest. A 60. ábrán feltüntettük az $n = 3$, $k = 1$; $n = 3$, $k = 2$ és $n = 3$, $k = 3$ kvantumszámoknak megfelelő pályákat. Az ugyanazon főkvantumszámhoz tartozó ellipszisek nagy-

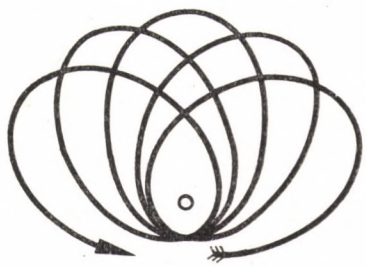


60. ábra. Bohr-féle elektronpályák a H-atomban $n = 3$ főkvantumszám esetén

tengelyeinek hossza egymással egyenlő és egyenlő a megfelelő körpálya átmérőjével.

Ki lehet mutatni, hogy H-nál ellipszispályák esetén, ameddig nem számolunk relativisztikusan, az energia csak $n = n_r + k$-tól függ, ami azt jelenti, hogy ugyanazokat az energianívókat kapjuk, mint körpályák esetén.

Az eddigi fejtegetéseink nem adnak számot a spektrum ún. finom struktúrájáról, amelyről eddig nem beszéltünk és amely abban áll, hogy nagyon erős felbontású spektroszkópban a H-spektrum egyes vonalai egymáshoz nagyon közel eső vonalakra bomlanak fel. Ezt SOMMERFELD értelmezni tudta azáltal, hogy a relativisztikus mechanika alapján végezte el a számításokat. Ez azt eredményezte, hogy az elektron ellipszispályái a gyújtópont körül forognak, vagyis az elektron a 61. ábrán látható pályán mozog. Az energiára pedig azt a fontos eredményt kapta, hogy az most már nemcsak $n = n_r + l + 1$-től függ, hanem külön l-től is,



61. ábra. A H-atom egyik elektronpályája a relativisztikus Bohr—Sommerfeld elmélet szerint

tehát az egyes energianívók, amelyek az előbbi számításban összeestek, felbomlanak és eredményezik a spektrum finom struktúráját. Ez a *Sommerfeld*-féle elmélet azonban hiányos. A H-spektrum finom struktúrájának szigorú tárgyalása DIRAC kvantummechanikai elmélete alapján lehetséges (l. a 26. fejezetet).

2. §. A Moseley-törvény

Egy Z rendszámú atom, amely összes elektronjait egy kivételével elvesztette, színképvonalakat emittálna, amelyek hullámszámai, ha a mag mozgásától eltekintünk, a következő formulával állíthatók elő

$$\bar{\nu} = RZ^2 \left(\frac{1}{s^2} - \frac{1}{n^2} \right). \qquad (21.2.1)$$

A Z^2 faktor azt eredményezi, hogy a vonalak már $Z = 30$ esetében a spektrum *Röntgen*-részébe esnek. Közel 30-szoros vagy még többszörös ionokat kísérletileg előállítani nem tudunk. A *Röntgen*-színképben azonban találunk vonalakat,

melyek hullámszámai a fenti képlettel analóg és abból levezethető formulával állíthatók elő.

Ennek a formulának levezetéséhez meg kell említenünk, hogy a magasabb rendszámú atomok elektronjai, mint azt rövidesen részletesen látni fogjuk, nem helyezkednek el mind a legmélyebb energiájú, vagyis az $n = 1$-nek megfelelő kvantumállapotban, hanem különböző kvantumállapotokra oszlanak el. Az egyenlő főkvantumszámú kvantumállapotokban levő elektronok csoportokat alkotnak, ún. héjakban rendeződnek. Ezeket a héjakat K, L, M, N, ... héjaknak szokás nevezni, a magtól való átlagos távolságuk a felírt sorrendben fokozatosan növekszik és rendre az $n = 1, 2, 3, 4, \ldots$ főkvantumszámú kvantumállapotokban levő elektronokat foglalják magukba.

Ha az atom nagy energiájú foton- vagy elektronütközés hatására egy belső héjban levő elektront veszít, akkor helyére egy magasabb energiájú elektron egy másik héjból átmehet, miközben az atom sugároz, magas rendszám esetén *Röntgen*-fényt emittál. Ha az elektronok kölcsönhatásától eltekintenénk, akkor az így keletkezett *Röntgen*-vonal hullámszámát a fenti formula állítaná elő. A valóságban azonban az atom belső elektronjai a mag elektrosztatikus hatását csökkentik, így mindegyik héjra bevezethetünk egy Z_n állandót, amely erről a csökkenésről számot ad olymódon, hogy az illető héjban a mag elektrosztatikus potenciálja nem $\frac{Ze}{r}$, hanem $\frac{(Z - Z_n)e}{r}$. Ennek megfelelően az n főkvantumszámnak megfelelő kvantumállapotban levő elektron energiája

$$E = (Z - Z_n)^2 \frac{Rhc}{n^2}. \tag{21.2.2}$$

Az egész okoskodás azért bír jelentőséggel, mert Z_n a Z-től nagymértékben függetlennek bizonyult. A K és L héjakra Z_n-et 1-gyel tehetjük egyenlővé és így nyerjük, hogy az L héjból a K héjba történő átmenetnek megfelelő vonal hullámszáma

$$\bar{\nu} = (Z - 1)^2 R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2}\right) = \frac{3}{4}(Z - 1)^2 R. \tag{21.2.3}$$

Ez a híres *Moseley-féle törvény*, amely szerint az ún. K_α vonal hullámszáma $(Z-1)^2$-nel arányos. Ennek a törvénynek az elemek $Z = 4$-től $Z = 92$-ig nagy pontossággal eleget tesznek. Leginkább a közepes Z-vel bíró elemekre teljesül a törvény, mert Z_n kismértékben mégis függ Z-től. A *Moseley*-féle törvény segítségével rögtön meg lehet adni egy elem rendszámát, ha ismeretes az elem K_α vonalának hullámszáma. A *Röntgen*-spektrumokkal itt nem foglalkozunk, csak megemlítjük, hogy elméletük bonyolult.

3. §. Alkáli- és hasonló atomok spektrumai

A H-atomra vonatkozó *Bohr*-elméletet a kvantumfeltételekből kiindulva komplikáltabb atomokra is ki lehet terjeszteni, így elsősorban alkáli-atomokra, amelyeknél az egyik legkülső elektron lényegesen gyengébben van kötve, mint a többi.

Erre az elektronra, amely általában a magtól nagyobb távolságban tartózkodik, mint a többi, a mag és a többi elektron tere hat. A magtól elegendő nagy távolságban a mag és a belső elektronok együttes hatása csaknem olyan, mint egy pontszerű töltés, vagyis mint egy H-mag elektromos hatása, aminek megfelelően ezeknek az állapotoknak megfelelő termek szinte teljesen megegyeznek a H-termekkel. Ha ellenben a legkülső, ún. *valenciaelektron* közelebb jut a maghoz, esetleg behatol a belső elektronok közé, akkor a mag és a belső elektronok együttes tere eltér egy pontszerű töltés terétől. Ennek megfelelően ezeknek az állapotoknak megfelelő termek nagyobb mértékben térnek el a H-termektől. RYDBERG az alkáli-atomok termjeit első közelítésben a következő alakban állította elő

$$T = \frac{R}{(n + \delta_1)^2}, \tag{21.3.1}$$

RITZ pedig második közelítésben a következő alakot adta meg

$$T = \frac{R}{\left(n + \delta_1 + \frac{\delta_2}{n^2}\right)^2}, \tag{21.3.2}$$

ahol δ_1 és δ_2 az ún. *Rydberg-* illetve *Ritz*-féle korrekciók, amelyek csak k-tól, illetve l-től függenek. A termek tehát különböznek a H-termektől, mert a nevezőben már nem egy egész számnak, n-nek négyzete áll, hanem $n+\delta_1$ és $n+\delta_1+\frac{\delta_2}{n^2}$ négyzete, amelyek már nem egész számok. Az alkáliák termjeit gyakran a következő alakban is írják: $\frac{R}{n^{*2}}$, ahol n^{*2}-tel jelölik a fenti kifejezés nevezőjét. n^*-ot szokás *effektív kvantumszám*nak nevezni, ez azonban már nem egész szám. A *Bohr*-elmélet alapján δ_1-et és δ_2-t meg lehetett határozni és az eredmények általában jól egyeztek a tapasztalattal. Hogy az alkálitermek nem egyeznek meg teljesen a H-termekkel, annak két oka van. Először, mint már említettük, azokban az állapotokban, amelyekben a valencia-elektron a maghoz közel jut, a tér nem *Coulomb*-szerű, másodszor pedig a valencia-elektron akkor is, ha a magtól távolabb van, a magból és a belső elektronokból álló rendszert, vagyis az alkáli-iont polarizálja. Ez azt jelenti, hogy a valencia-elektron a pozitív mag és a negatív elektronok rendszerét kissé széthúzza, mert a magot vonzza, az elektronokat pedig taszítja, vagyis egy elektromos dipólus lép fel, amelynek hatását szintén figyelembe kell venni.

Az alkáli-termek, mint a fenti kifejezésekből látható, már nem csak $n = n_r + l + 1$-től, hanem külön l-től is függenek (mert δ_1 és δ_2 l függvénye). Az egyes l értékeknek megfelelő termeket csoportokba, illetve sorozatokba foglaljuk, amelyek tagjai n-ben különböznek. Az $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$-nak megfelelő termeket $S, P, D, F, \ldots$ termeknek nevezzük, a főkvantumszámot pedig, vagyis n-et, a term jele elé írjuk. Az S termsorozat tagjai tehát például a következők: $1S$, $2S$, $3S$, . . ., mint ahogy ezt már röviden említettük.

Az alkáliákhoz hasonló termek lépnek fel a periodikus rendszerben balról jobbra haladva az egyszeresen ionizált földalkáliáknál, a kétszeresen ionizált alkáli-földfémeknél és így tovább. Ezek az ionok hasonló szerkezetűek, mint az alkáli-atomok, csakhogy ezeknél a magnak és a belső elektronoknak a lazábban kötött külső elektronra gyakorolt erőtere rendre egy kétszeresen, háromszorosan stb. töltött ion terével írható le, aminek megfelelően a termek rendre 2^2, 3^2, ... tényezővel szorzódnak. Ezeket a termeket is értelmezni lehetett a *Bohr*-féle elmélettel, sőt az elméletet bonyolultabb atomokra is ki lehetett terjeszteni.

4. §. A korrespondencia-elv

Térjünk vissza ismét a H-atomra és állapítsuk meg azt a frekvenciát, amely az m főkvantumszámú állapotból az n főkvantumszámú állapotba való átmenetnek felel meg, ha $m-n \ll n$. Ekkor

$$\nu = Rc\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) = Rc\,\frac{m^2-n^2}{m^2n^2} = Rc\,\frac{(m+n)(m-n)}{m^2n^2} \approx$$

$$\approx Rc\,\frac{2}{n^3}(m-n), \tag{21.4.1}$$

feltételünk értelmében ugyanis $m \approx n$.

Ezek után határozzuk meg a klasszikus frekvenciákat az n főkvantumszámú pályán

$$\nu = \frac{v_n}{2\pi r_n} = \frac{\dfrac{2\pi e^2}{h}\dfrac{1}{n}}{\dfrac{h^2}{2\pi m_0 e^2}n^2} = \frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^3}\,\frac{2}{n^3} = Rc\,\frac{2}{n^3}. \tag{21.4.2}$$

Ennek a formulának az előzővel való összehasonlításából látjuk, hogy nagy kvantumszámok esetében az $m-n = 1$ kvantumugrás frekvenciája megegyezik a klasszikus frekvenciával, az $m-n = 2$ kvantumugrásnak megfelelő frekvencia pedig a klasszikus frekvencia kétszeresébe megy át és így tovább. Tehát a kvantumelméleti és klasszikus frekvenciák között egy asszimptotikus összefüggés áll fenn. Ez egy általános törvényszerűségnek, az ún. *Bohr-féle korrespondencia-elv*nek speciális esete, amely szerint általában a kvantumelméleti törvények határesetben a megfelelő klasszikus mechanikai törvényekbe mennek át. A korrespondencia-elv a kvantumelméletben igen fontosnak bizonyul, így pl. ennek az elvnek alapján lehet megállapítani az egyes kvantumugrásoknak megfelelő vonalak intenzitását, illetve a megfelelő sugarak polarizációját.

Ugyancsak a korrespondencia-elv alapján értelmezni lehet azt, hogy egyes kvantumugrások nem lépnek fel, vagyis számot lehet adni arról, hogy ezeknek a kvantumugrásoknak megfelelő vonalak nem lépnek fel a spektrumban. Így bizonyos, ún. kiválasztási szabályokat lehetett megállapítani, amelyek meghatározzák,

hogy milyen kvantumállapotok között lehetségesek átmenetek. Így meg lehetett állapítani, hogy csak oly termek kombinálódhatnak egymással, amelyeknél az l mellékkvantumszám megváltozása $\Delta l = \pm 1$, más kombináció nem lehetséges. Tehát például egy S term egy P termmel kombinálódhat, de nem kombinálódhat egy másik S termmel vagy egy D termmel. Az n főkvantumszámra nem áll fenn kiválasztási szabály, tehát tetszőleges főkvantumszámú, de egyébként megengedett állapotok között lehet átmenet. Két másik kiválasztási szabállyal még a későbbiek folyamán fogunk megismerkedni. (l. 22. fejezet 11. §.)

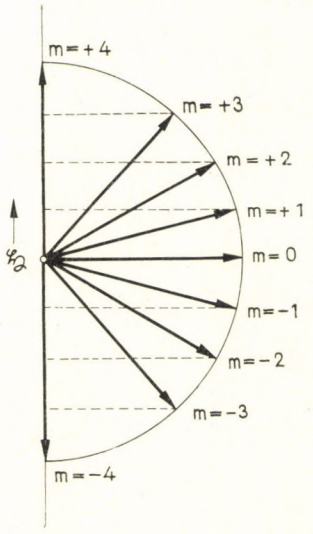
5. §. A Stark- és Zeeman-effektus

A *Stark*- és *Zeeman*-effektussal itt csak egészen röviden foglalkozunk. Ha egy atomot elektromos térbe helyezünk, akkor spektrumvonalai általában több vonalra bomlanak fel, vagy eltolódnak. Ez a *Stark*-effektus. Az elmélet erről számot tud adni, ugyanis a külső elektromos térben az egyes termek megváltoznak és az esetleg összeeső termek több, egymástól különböző termre bomlanak fel, ami az egyes vonalak felbomlásához vezet, egyes vonalak eltolódása pedig a megfelelő termek megváltozásának következménye. A külső tér a vonalak intenzitására is kihatással van. Ugyanis, mint a korrespondencia-elv alapján az elméletből következik, a külső tér azt eredményezi, hogy egyes, a kiválasztási szabályoknak meg nem felelő, ún. tiltott átmenetek is lehetségessé válnak, ami számot ad az erős elektromos terekben emittáló atomok spektrumában a tiltott vonalakról.

A *Zeeman*-effektusnak, amely az atomok szerkezetének megismerésében különösen fontos szerepet játszik, következő az alapja. Ha az emittáló atomokat mágneses térbe helyezzük, akkor azok spektrumában a vonalak több vonalra bomlanak fel. Az effektus magyarázata egészen hasonló a *Stark*-effektushoz, vagyis a mágneses tér hatására az eredetileg összeeső termek általában felbomlanak, ami a vonalak felbomlásához vezet. Ezzel az effektussal a későbbiekben foglalkozunk részletesebben és itt csak a következő, az atomszerkezetre nagyon fontos eredményt adjuk meg.

Mint az atomoknak mágneses térben való viselkedéséből kitűnt, az atomban az elektron keringéséből származó impulzusmomentumnak, vagyis röviden a pályamomentumnak a mágneses tér irányába eső komponense csak meghatározott értéket ve hetfel, mégpedig $\frac{h}{2\pi}$-nek csak egész számú sokszorosa, m-szerese lehet. m-et nevezzük *mágneses kvantumszám*nak. Így például az $l = 4$ mellékkvantumszámnak megfelelő állapotban az elektron impulzusmomentuma csakis a 62. ábrán feltüntetett irányokba állhat be a külső mágneses térhez, vagyis l-nek a mágneses tér irányába eső vetületei csak 4, 3, 2, 1, 0, -1, -2, -3, -4 lehetnek. Tehát a vetület ebben az esetben összesen $2 \cdot 4 + 1 = 9$ értéket vehet fel. Általában egy l mellékkvantumszámhoz az m mágneses kvantumszámnak l, $l-1, \ldots,$ $1, 0, -1, \ldots -(l-1)$, $-l$, vagyis összesen $2l + 1$ számú értéke tartozik. A mágneses kvantumszám tehát negatív is lehet. Mint már láttuk, az elektronnak egy

N pályamomentumához, vagyis keringéséből származó impulzusmomentumához $-\frac{e}{2m_0c}$ N mágneses momentum tartozik. A mágneses kvantumszám tehát megadja, hogy ennek a mágneses momentumnak a mágneses tér irányába eső komponense $\frac{e}{2m_0c}\frac{h}{2\pi}$-nek, vagyis 1 *Bohr*-féle magnetonnak hányszorosa.



62. ábra. Az impulzusmomentum lehetséges beállásai $l = 4$ esetén

A korrespondencia elvből az m-re is le lehet vezetni egy kiválasztási szabályt, amely szerint csak olyan állapotok között lehetséges átmenet, amelyeknél m változása

$$\Delta m = 0, \pm 1 . \tag{21.5.1}$$

Mivel az elektron pályamomentuma a pálya síkjára merőleges, a fenti eredmény szemléletesen annyit jelent, hogy az elektron pályasíkja csak meghatározott irányokba állhat be a mágneses tér irányához képest.

6. §. Spinkvantumszám, belső kvantumszám

Az egyes kvantumállapotok teljes jellemzésére még egy kvantumszámot kell bevezetnünk. Mint már említettük, GOUDSMIT és UHLENBECK azt a rendkívül termékenynek bizonyult hipotézist tették, hogy az elektronnak is van impulzusmomentuma, melynek nagysága azonban nem $\frac{h}{2\pi}$-nek egész számú sokszorosa, hanem $\frac{h}{2\pi}$-nek $\pm\frac{1}{2}$-szerese, vagyis $\pm\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$ nagyságú. Ezt a $\pm\frac{1}{2}$ kvantumszá-

mot nevezzük *spinkvantumszám*nak, szokásos jele m_s. Mint tudjuk, a spinnek egy $\frac{eh}{4\pi m_0 c}$ nagyságú mágneses momentum felel meg. Egy kvantumállapot teljes jellemzésére tehát az n, l, m és m_s kvantumszámok szükségesek.

A spinnel többek között értelmezni lehetett a termek multiplicitását, mégpedig a következőképpen. A spin, illetve több elektron esetében ezek eredője, az atom pályamomentumához viszonyítva csak meghatározott irányokba állhat be. A spinmomentumoknak és a pálya-impulzusmomentumoknak megfelelő mágneses momentumok kölcsönhatása miatt a különböző irányoknak különböző energiaértékek felelnek meg. Ez a termek több, egymáshoz közel fekvő értékre való felbomlásához vezet és eredményezi a vonalak multiplett struktúráját.

Az irodalomban az említett kvantumszámokon kívül szerepel még az ún. *belső kvantumszám*, amelyet j-vel szokás jelölni. j az atom *teljes impulzusmomentumát* adja, amely a pályamomentum és a spinmomentum eredője; j egész vagy feles szám. Egy kvantumállapotot a fenti 4 kvantumszám teljesen jellemez, úgyhogy j-t ezekhez nem szükséges hozzávennünk. Megemlítjük, hogy a kvantumállapotok jellemzésére más kvantumszámokat is használhatunk, mégpedig: n, l, j és m_j-t, ahol m_j egy másik mágneses kvantumszám. Az atomnak teljes impulzusmomentuma, j ugyanis csak úgy állhat be egy külső mágneses térhez, hogy a tér irányába eső komponense $\frac{h}{2\pi}$-nek m_j-szerese lehet, ahol m_j csak egész vagy feles számú értékeket vehet fel, a nullát csak egész számú j esetében. j-re a következő kiválasztási szabályok állnak fenn: $\Delta j = 0, \pm 1$, kivéve a $0 \rightarrow 0$ átmenetet.

7. §. A hiperfinom struktúra

Amint az előzőkben láttuk, az elektronspinnel értelmezni lehetett a termek, illetve a spektrumvonalak multiplicitását.

A spektrumvonalak a közönséges multiplettstruktúrán kívül még egy másik struktúrát is mutatnak, az ún. *hiperfinom struktúrát*, amely szintén a vonalak felhasadásában áll, a felhasadás, illetve felbontás azonban lényegesen kisebb, mint a közönséges multiplettfelbontás és csak igen nagy felbontó képességű spektroszkóppal figyelhető meg.

A hiperfinom struktúrának két oka van. Az egyik az izotópia. Mint tudjuk, sok elem különböző súlyú ún. *izotóp* keveréke. Mint már a H esetében láttuk, a pontos tárgyalásnál figyelembe kell venni, hogy az elektron nem a nyugvó mag körül kering, hanem az elektron és a mag közös súlypontjuk körül keringenek, aminek következtében a mag tömege a spektrumvonalak hullámszámainak formulájában fellép. Izotóp atomok esetében ez a körülmény azt eredményezi, hogy a spektrumvonalak felbomlanak. Ugyancsak befolyásolja a vonalak frekvenciáit az is, hogy a különböző izotópokban a magok szerkezete különböző.

A hiperfinom struktúra másik oka az, hogy a magoknak is van mágneses momentumuk és spinjük. A mag mágneses momentumának nagyságrendje 1 mag-

magneton, amely kereken 1800-szor kisebb, mint egy *Bohr*-féle magneton. A magspin, teljesen hasonlóan az elektronspinhez, azt eredményezi, hogy a spektrumvonalak még egyszer felbomlanak, de mivel a magspinnek megfelelő mágneses momentum lényegesen kisebb, mint egy *Bohr*-féle magneton, a megfelelő felbontás is lényegesen kisebb.

8. §. A többelektronkonfigurációk energiatermjei és azok szimbólumai

A következőkben röviden azzal foglalkozunk, hogy több elektron esetében hogyan kell összetenni az impulzusmomentumokat, ill. a nekik megfelelő mágneses momentumokat és ennek alapján megállapítjuk, hogy milyen kvantumállapotok, ill. termek lehetségesek. Évégből foglalkozzunk egy 2-elektron rendszerrel, amelynek kapcsán könnyen megérthetjük a fennálló törvényszerűségeket. Ahelyett, hogy impulzusmomentumok összetevésével foglalkoznánk, a megfelelő kvantumszámokat tesszük össze, amit tehetünk, mert a kvantumszámok az impulzusmomentumokat, ill. mágnesesmomentumokat egyértelműen jellemzik. Legyen adva tehát 2 elektron, az egyik mellékkvantumszáma legyen l_1, spinkvantumszáma $m_{s1} = \pm \frac{1}{2}$, a másik megfelelő kvantumszámai pedig l_2 és $m_{s2} = \pm \frac{1}{2}$. Az impulzusmomentumokat, ill. kvantumszámokat többféleképpen lehet összetenni, mi a következőkben csak az ún. normális vagy *Russel—Saunders*-kapcsolással foglalkozunk. Eszerint l_1 és l_2 egy L eredővé teendő össze, ugyanígy m_{s1} és m_{s2} egy S eredővé, a végső eredőt pedig L és S összetételéből nyerjük. A mellékkvantumszámok összetevésére az a szabály, hogy azokat mint vektorokat kell összetenni, amelyek eredőjének abszolút értéke azonban csak egész szám lehet. Tehát L maximális értéke $l_1 + l_2$, minimális értéke (ha $l_1 > l_2$) $l_1 - l_2$. Negatív értékeket itt nem vehetünk fel, ezeknek itt nem volna értelmük, mert a pozitív és negatív irányokat nincs mihez viszonyítani. Ha tehát pl. $l_1 = 3$ és $l_2 = 2$, akkor $L = 5, 4, 3, 2, 1$. A spinek egymáshoz antiparallel vagy parallel állhatnak be. Az antiparallel esetben $S = 0$, a parallel esetben $S = 1$. Ebben az utóbbi esetben S háromféleképpen állhat be L-hez képest, vagy parallel, vagy merőlegesen, vagy antiparallel. Ez a végső eredő szolgáltatja J-t. Ha pl. $L = 3$, akkor az $S = 1$ esetben $J = 4, 3, 2$. Ha $S = 1$, akkor triplett termrendszert kapunk, ha $S = 0$, akkor pedig, mivel spinfelbontás nincs, a termrendszer szingulett.

Az $L = 0, 1, 2, \ldots$-nek megfelelően a termeket $S, P, D, \ldots$-vel jelöljük. A szimbólum elé írjuk a term multiplicitását. Az egyes multiplett-termek megkülönböztetésére pedig a jobb alsó sarokba írjuk a belső kvantumszámot, J-t. Így pl. az előző példában a következő termeket kaptuk: ${}^3F_4$, ${}^3F_3$, ${}^3F_2$ és ${}^1F_3$; ha pedig még a főkvantumszámot (amely a fenti példában nem szerepelt) is kiírjuk, akkor egy termszimbólum pl. a következő alakú: $3^2P_{1/2}$. Megemlítjük még, hogy az $L = 0$-nak megfelelő, vagyis S-termek mindig szingulettek, mert itt az elektronspin, vagy azok eredője nem tud valamihez viszonyítva kvantálva beállni.

9. §. A Pauli-elv. A periódusos rendszer felépítése a Pauli-elv alapján

Az elektron egyes kvantumállapotait az atomban az n, l, m és m_s kvantumszámok teljesen meghatározzák. Az l különböző értékeinek, $l = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$-nek megfelelő kvantumállapotokat, ill. az ezekben az állapotokban levő elektronokat $s, p, d, f, g, \ldots$ betűkkel szokás jelölni. Így pl. beszélünk $4s$ kvantumállapotról, ill. elektronokról. A megfelelő főkvantumszámot, n-t a betűk elé írjuk. Példánkban tehát $n = 4$, $l = 0$, vagy $2p$ elektron esetén $n = 2$, $l = 1$.

Könnyen megállapíthatjuk, hogy egy megadott főkvantumszámhoz hány $s, p, d, f, \ldots$ állapot tartozik. Láttuk, hogy mindegyik l-hez m-nek $2l + 1$ értéke tartozik, amelyek mindegyikének egy-egy állapot felel meg. Mindegyik állapot azonban megkettőződik m_s két lehetséges értéke miatt. Így tehát egy l-hez tartozó összes állapotok száma $2(2l + 1)$. Megadott főkvantumszám esetén tehát az $s, p, d, f, \ldots$ állapotok száma 2, 6, 10, 14, 18, ... Egy megadott n főkvantumszámhoz tartozó összes lehetséges állapotokat, vagyis az összes lehetséges l értékeknek megfelelő állapotokat megkapjuk, ha $2(2l + 1)$-et l összes értékére szummázzuk. l összes lehetséges értékei megadott n esetén $0, 1, 2, 3, \ldots, n - 1$. Mivel továbbá

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2, \tag{21.9.1}$$

nyerjük, hogy egy megadott n főkvantumszámhoz tartozó összes kvantumállapotok száma $2n^2$. Tehát az $n = 1, 2, 3, 4 \ldots$ értékeknek megfelelő összes kvantumállapotok száma rendre 2, 8, 18, 32, 50, ...

Az atomszerkezet szempontjából rendkívül fontos, hogy az elektronok hogyan oszlanak el az egyes kvantumállapotokra. Erre PAULI elve ad felvilágosítást, amely az egész fizikában alapvető fontosságúnak bizonyult. Eszerint egy atomban nem lehet két vagy több olyan elektron, amelynek mind a 4 kvantumszáma megegyezne, vagyis megadott 4 kvantumszámmal jellemzett kvantumállapot csak egy elektronnal lehet betöltve. Ennek az elvnek segítségével felépíthetjük a periódusos rendszert. Egy alapállapotban levő atomot úgy gondolhatunk felépítve a magból és az elektronokból, hogy az elektronok először a legmélyebb energiájú kvantumállapotokat töltik be, majd szukcesszíve a magasabb energiájúakat. A legegyszerűbb atom a H-atom, amely egy egyszeresen töltött H-magból (protonból) és egy elektronból áll, amelynek megfelelő legmélyebb energiájú állapot $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$, $m_s = \pm \frac{1}{2}$, de hogy melyik m_s értékről van szó, az bizonytalan. A H elektronja az alapállapotban tehát egy $1s$ pályán helyezkedik el. A következő elem a He, amely egy kétszeresen töltött He-magból és két elektronból áll, amelyek az $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$, $m_s = +\frac{1}{2}$ és az $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$, $m_s = -\frac{1}{2}$ kvantumállapotokat foglalják el, tehát a két elektron az $n = 1$ főkvantumszámnak megfelelő két $1s$ állapotot foglalja el. Ezzel az $n = 1$ főkvantumszámnak

Az atomok kvantumállapotainak betöltési számai. (STONER táblázata)

Periódus	Rendszám	Elem	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	6s	6p	6d	7s
I.	1	H	1																
	2	He	2																
II.	3	Li	2	1															
	4	Be	2	2															
	5	B	2	2	1														
	6	C	2	2	2														
	7	N	2	2	3														
	8	O	2	2	4														
	9	F	2	2	5														
	10	Ne	2	2	6														
III.	11	Na	2	2	6	1													
	12	Mg	2	2	6	2													
	13	Al	2	2	6	2	1												
	14	Si	2	2	6	2	2												
	15	P	2	2	6	2	3												
	16	S	2	2	6	2	4												
	17	Cl	2	2	6	2	5												
	18	A	2	2	6	2	6												
IV.	19	K	2	2	6	2	6		1										
	20	Ca	2	2	6	2	6		2										
	21	Sc	2	2	6	2	6	1	2										
	22	Ti	2	2	6	2	6	2	2										
	23	V	2	2	6	2	6	3	2										
	24	Cr	2	2	6	2	6	5	1										
	25	Mn	2	2	6	2	6	5	2										
	26	Fe	2	2	6	2	6	6	2										
	27	Co	2	2	6	2	6	7	2										
	28	Ni	2	2	6	2	6	8	2										
	29	Cu	2	2	6	2	6	10	1										
	30	Zn	2	2	6	2	6	10	2										
	31	Ga	2	2	6	2	6	10	2	1									
	32	Ge	2	2	6	2	6	10	2	2									
	33	As	2	2	6	2	6	10	2	3									
	34	Se	2	2	6	2	6	10	2	4									
	35	Br	2	2	6	2	6	10	2	5									
	36	Kr	2	2	6	2	6	10	2	6									
V.	37	Rb	2	2	6	2	6	10	2	6			1						
	38	Sr	2	2	6	2	6	10	2	6			2						
	39	Y	2	2	6	2	6	10	2	6	1		2						
	40	Zr	2	2	6	2	6	10	2	6	2		2						
	41	Nb	2	2	6	2	6	10	2	6	4		1						
	42	Mo	2	2	6	2	6	10	2	6	5		1						
	43	Tc	2	2	6	2	6	10	2	6	6		1						
	44	Ru	2	2	6	2	6	10	2	6	7		1						
	45	Rh	2	2	6	2	6	10	2	6	8		1						
	46	Pd	2	2	6	2	6	10	2	6	10								

Periódus	Rendszám	Elem	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	6s	6p	6d	7s
	47	Ag	2	2	6	2	6	10	2	6	10		1						
	48	Cd	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2						
	49	In	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	1					
V.	50	Sn	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	2					
	51	Sb	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	3					
	52	Te	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	4					
	53	J	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	5					
	54	Xe	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6					
	55	Cs	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6		1			
	56	Ba	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6		2			
	57	La	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6	1	2			
	58	Ce	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1	2	6	1	2			
	59	Pr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2	6	1	2			
	60	Nd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	3	2	6	1	2			
	61	Pm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	4	2	6	1	2			
	62	Sm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	5	2	6	1	2			
	63	Eu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	6	2	6	1	2			
	64	Gd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6	1	2			
	65	Tb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	8	2	6	1	2			
	66	Dy	2	2	6	2	6	10	2	6	10	9	2	6	1	2			
	67	Ho	2	2	6	2	6	10	2	6	10	10	2	6	1	2			
	68	Er	2	2	6	2	6	10	2	6	10	11	2	6	1	2			
	69	Tu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	12	2	6	1	2			
	70	Yb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	13	2	6	1	2			
VI.	71	Lu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	1	2			
	72	Hf	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	2	2			
	73	Ta	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	3	2			
	74	W	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	4	2			
	75	Re	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	5	2			
	76	Os	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	6	2			
	77	Ir	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	7	2			
	78	Pt	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	9	1			
	79	Au	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	1			
	80	Hg	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2			
	81	Tl	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	1		
	82	Pb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	2		
	83	Bi	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	3		
	84	Po	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	4		
	85	At	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	5		
	86	Rn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6		
	87	Fr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6		1
	88	Ra	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6		2
	89	Ac	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6	1	2
VII.	90	Th	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6	2	2
	91	Pa	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6	3	2
	92	U	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	6	4	2

megfelelő állapotok meg is teltek. A következő 8 elemnél Li-tól Ne-ig sorjában betelnek az $n = 2$-nek megfelelő állapotok, mégpedig először a $2s$, majd a $2p$ állapotok, úgyhogy pl. a Ne-nak két $1s$, két $2s$ és hat $2p$ elektronja van. A következő 8 elemnél Na-tól A-ig szukcesszíve a $3s$ és $3p$ állapotok lesznek betöltve. A következő periódusban álló 18 elemnél K-tól Kr-ig a tíz $3d$, a két $4s$ és hat $4p$ állapot telik meg. Mégpedig érdekes, hogy a K legkülső elektronja nem $3d$ állapotban van kötve, mint az eddigiek szerint várnánk, hanem $4s$ állapotban. A $3d$ állapotok betöltése Sc-nál kezdődik és Cu-nál fejeződik be, míg a $4p$ állapotok betöltése Ga-nál kezdődik és Kr-nál nyer befejezést. Az itt tapasztalt jelenség, amely szerint a d állapotok (vagyis általában a magas mellékkvantumszámnak megfelelő állapotok) csak utólag telnek meg, a további felépítés során megismétlődik. A periódusos rendszer következő, ismét 18 elemet tartalmazó periódusában Rb-tól Xe-ig az $5s$, $5p$ és $4d$-nek megfelelő 18 állapot telik meg. A következő 32 elemet tartalmazó periódusban Cs-tól Rn-ig pedig a $6s$, $6p$, $4f$ és $5d$-nek megfelelő 32 állapot lesz megtöltve. A tizennégy $4f$ állapot szintén csak utólag lesz betöltve, mégpedig a 14 ritka földfémnél, amelyeknél szukcesszíve egy-egy $4f$ állapot telik meg. A periodikus rendszer hátralevő 6 eleménél a $7s$ és $6d$ állapotok telnek meg részben. Az atomok kvantumállapotainak betöltési számait a *Stoner*-táblázat foglalja össze. (220. oldal.)

Így tehát fel lehet építeni a periodikus rendszert. Az egyes periódusokban levő elemek számát a 2, 8, 18, 32, ... számokat is egyszerűen lehet értelmezni. Ezek az egyes n főkvantumszámokhoz tartozó összes lehetséges állapotok számát jelentik, amelyre a fentiekből $2n^2$ adódott. Ebben a formulában n helyébe 1, 2, 3, 4, ... értékeket írva, az egyes periódusokban levő elemek számát kapjuk.

10. §. Az elemek kémiai viselkedésének értelmezése az atomszerkezet alapján. Néhány megjegyzés a kémiai kötésre vonatkozóan

Egy elem kémiai viselkedésére az atom külső elektronjai mérvadók, a legtöbb kémiai jelenségnél ugyanis, pl. a kémiai kötésnél, szinte csak ezek játszanak szerepet. Ez magyarázza meg pl. a ritka földfémek kémiailag hasonló viselkedését, ezeknél ugyanis a külső elektronok elrendezése ugyanaz, mert mint említettük, a belső $4f$ állapotok telnek meg.

A nemesgázokat, amelyek az egyes periódusok végén állnak, jellemzi, hogy a legkülső 8 elektron két s és hat p állapotot tölt be (kivéve a He-ot, ahol p állapot $n = 1$ lévén, nincs), amelyek ugyanazon főkvantumszámhoz tartoznak, vagyis a 8 külső elektron a lehetséges s és p állapotokat mind betölti. Azt szoktuk mondani, hogy a nemesgázoknak egy lezárt (s, p) elektronhéjuk van. Ez az elektronkonfiguráció nagyon stabilis és ez magyarázza meg a nemesgázok kémiai inaktivitását. Ezt az oszlopot követik az egyvegyértékű alkáli fémek, amelyeknek a stabilis nemesgázszerű elektronkonfigurációjukon kívül még egy, mégpedig egy s-elektronjuk van. Az ezt követő oszlop a kétvegyértékű alkáli földfémeket tartalmazza, amelyeknél a nemesgázszerű elektronkonfiguráción kívül 2 elektron kering. Végül

eljutunk a halogénekhez, amelyeknek maximális vegyértékük 7 és amelyeknek 7 külső elektronjuk van, vagyis egy elektronjuk hiányzik a következő nemesgázszerű konfiguráció kialakításához. Amint látjuk, a vegyérték a külső elektronok számától függ, amit az ún. spin-valenciaelmélet értelmezni is tudott.

Az elemeknek éppen ezek a külső elektronjai játszanak szerepet a kémiai kötésnél. A kémiai kötés egyik fajtáját, az ún. *heteropoláris-* vagy *ionkötést* az előbbiek alapján értelmezhetjük. Amint említettük, a nemesgázok elektronkonfigurációja nagyon stabilis, így érthető, hogy a természetben ez a konfiguráció igyekszik kialakulni, amit az ionkötésnél a periodikus rendszer első oszlopaiban álló elemek atomjai fölös elektronjaik leadásával, a nemes gázok előtt álló oszlopokban levő elemek atomjai pedig elektronok felvételével valósítanak meg. Így pl. az NaCl molekula egyszeresen töltött pozitív Na-ionból és egyszeresen töltött negatív Cl-ionból van felépítve. Az Na ugyanis lazán kötött külső elektronját könnyen leadja, miáltal elektronkonfigurációja a Ne-éhoz lesz hasonló, a Cl pedig könnyen vesz fel egy elektront, ezáltal elektronkonfigurációja az A-atoméhoz válik hasonlóvá. A molekula összetartó erőit az ellentétes töltésű ionok vonzása magyarázza meg. Ugyanigy magyarázhatjuk az ionkristályok, pl. az NaCl vagy a KCl kötését, amely a molekulától a kötés lényegét illetően nem különbözik és mint egy óriásmolekula fogható fel. Teljesen hasonlóan értelmezzük pl. az MgO kristály összetartó erőit, amely kétszeresen töltött pozitív Mg- és kétszeresen töltött negatív O-ionokból áll. Itt az Mg 2 legkülső elektronját az O veszi fel.

De létezik az anyagoknak egy másik csoportja, melyeknek kötését nem lehet így értelmezni. Ilyenek pl. a H-, O-, vagy N-gázok molekulái: a H_2, O_2, N_2 molekulák, vagy pl. a gyémántkristály, amely szénatomokból épül fel. Itt az egyes alkatrészek, amelyekből a molekulák vagy kristályok felépülnek, neutrálisak. A kötésnek ezt a fajtáját *homöopoláris-*, ill. *valenciakötés*nek nevezik. Ezt a kötést a *Bohr*-féle elmélettel értelmezni nem lehetett, a homöopoláris kötést csak a hullámmechanika alapján lehetett megmagyarázni.

A teljesség kedvéért itt megemlítjük a kémiai kötésnek két másik faját: a *fémes kötés*t és a *van der Waals-* (vagy polarizációs) *kötés*t. A fémes kötésen, mint neve is mutatja, a fémek atomjai között működő összetartó erőket értjük, tehát ebbe a kötési típusba sorolható az összes fém, mint pl. az alkálifémek, Cu, Ag, Au vagy Fe. A *van der Waals*-kötés aránylag laza kötés, amelyet bizonyos fajta polarizációs erők idéznek elő, amelyek neutrális atomok vagy molekulák között is fellépnek. Ebbe a kötési típusba tartoznak pl. a szilárd nemes gázok. Sem a fémes kötést, sem a *van der Waals*-kötést a *Bohr*-féle elmélettel nem lehetett megmagyarázni, mindkettőt csak a hullámmechanika alapján lehetett értelmezni.

11. §. A sávos spektrumok elemeinek rövid összefoglalása

A sávos spektrumokat a molekulák emittálják. Ezek a spektrumok is vonalakból állnak, de a vonalak oly közel esnek egymáshoz, hogy nem nagyon erős felbontású spektroszkópban a vonalak összefolynak egy-egy sávvá és innen ered ezeknek a

spektrumoknak elnevezése. A vonalak száma ezekben a spektrumokban rendkívül nagy.

A sávos spektrumok elméletét igen komplikálja az a tény, hogy egy molekula nemcsak az elektronok energiáját tartalmazza, hanem még tartalmaz ún. oszcillációs energiát is, amely a molekula atomjainak egymáshoz képest történő oszcillációjából származik és ezenkívül rotációs energiát, amely a molekula bizonyos tengelyek körüli rotációjából adódik.

Egy kétatomos molekulát egy súlyzómodellel sematizálhatunk. Egy ilyen molekulában a két atom, ill. atommag egymáshoz képest rezeghet, oszcillálhat, továbbá a molekula a magokat összekötő egyenesre merőleges tengely körül rotálhat. A rotációból és az oszcillációból származó energiákon kívül természetesen rendelkezik a molekula elektronenergiával is.

A tisztán rotációból származó energiát kétatomos molekula esetében könnyen kiszámíthatjuk. Ha a tehetetlenségi momentum Θ, és az állandó szögsebesség $\dot{\phi}$, akkor

$$E = E_{kin} = \frac{1}{2}\Theta\dot{\phi}^2 . \tag{21.11.1}$$

A ϕ-hez kanonikusan konjugált impulzus $p_\phi = \frac{\partial E_{kin}}{\partial \dot{\phi}} = \Theta\dot{\phi}$. Alkalmazva a kvantumfeltételt, kapjuk, hogy

$$\oint p_\phi d\phi = 2\pi\Theta\dot{\phi} = mh, \tag{21.11.2}$$

$$\dot{\phi} = \frac{mh}{2\pi\Theta}, \tag{21.11.3}$$

ahol m egész szám, az ún. rotációs kvantumszám. $\dot{\phi}$ kifejezését (11.1)-be helyettesítve és az m kvantumszámú állapotnak megfelelő energiát E_m-mel jelölve nyerjük hogy

$$E_m = \frac{m^2h^2}{8\pi^2\Theta}. \tag{21.11.4}$$

Érdekes, hogy a spektrumok tanulmányozása arra az eredményre vezetett, hogy E_m-ben m^2 helyébe $m(m+1)$-et kell írni és ugyanerre az eredményre vezet, mint látni fogjuk, a kvantummechanika is.

Az oszcillációból származó energiát, ha harmonikus rezgéseket tételezünk fel, azonnal felírhatjuk, mert a kétatomos molekula egy lineáris oszcillátor. Ha a rezgés frekvenciáját ν_0-lal jelöljük, akkor az oszcillációs energia

$$E_n = nh\nu_0, \tag{21.11.5}$$

ahol n az *oszcillációs kvantumszám*. Ezt itt egésznek tételezzük fel, a kvantummechanika viszont n számára feles értékeket szolgáltat. A spektrumvonalakra nézve azonban egész vagy feles n-ek ugyanazt az eredményt adják.

Ha az elektronenergiát E_{el}-lel jelöljük, akkor a teljes energiára nyerjük, hogy

$$E = E_{el} + nhv_0 + \frac{m(m+1)h^2}{8\pi^2\Theta} . \qquad (21.11.6)$$

E_{el} adja az energia zömét, nagyságra nézve utána nhv_0 következik, a legkisebb a rotációs energia. A vonalak frekvenciáit megint a *Bohr*-féle frekvenciafeltételből nyerjük. n-re a $\Delta n = \pm 1$ és m-re a $\Delta m = \pm 1$ kiválasztási szabályok állnak fenn. Az egész elmélet általában sokkal bonyolultabb, mint a vonalas spektrumoké. Itt csak az alapjait láttuk, részletesen nem foglalkozhatunk vele.

HUSZONKETTEDIK FEJEZET

A HULLÁMMECHANIKA ALAPJAI

1. §. Általános áttekintés

Jóllehet a *Bohr*-féle elmélet igen sok atomi jelenségről számot tudott adni, az elmélet mégis lényeges módosításokra szorult. A *Bohr*-féle elmélet ugyanis több tekintetben nem kielégítő, sőt ellentmondásokat tartalmaz.

Így pl. a *Bohr*-féle elméletben érthetetlen maradt az, hogy a mag körül keringő elektron miért nem sugároz keringése közben. Általában érthetetlen a kvantumfeltételek bevezetése. A *Bohr*-féle elméletben ugyanis az atomi problémákat a klasszikus mechanika módszereivel tárgyaljuk, amelyre mintegy rákényszerítjük a kvantumfeltételeket, amelyeket megokolni vagy levezetni nem tudunk. Ezeknek a kvantumfeltételeknek alapján szelektáljuk azután ki az ún. megengedett elektronpályákat, de az eljárásnak mélyebb értelmét adni nem tudjuk. Az elmélet ellentmondásai közül megemlítjük, hogy az elméletből következő k azimutális kvantumszám helyett az l mellékkvantumszámot kellett bevezetni, hogy a kísérleti eredményekkel megegyezésben maradjunk. Hasonló ellentmondás az is, hogy – mint említettük – a kétatomos molekulák rotációs energiájának tárgyalásánál a rotációs energia kifejezésében az m^2, vagyis a rotációs kvantumszám négyzetének helyébe az $m(m + 1)$ kifejezést kellett helyettesíteni, hogy az elméleti értékek a kísérletiekkel megegyezzenek. Egészen hasonló a helyzet a *Zeeman*-effektus tárgyalásánál is, ahol a j^2 helyébe $j(j + 1)$-et kell írni. Végül pedig megemlítjük, hogy a *Bohr*-féle elmélet már a legegyszerűbb többelektronproblémánál, a He-atomnál helytelen energiaértékekre vezet.

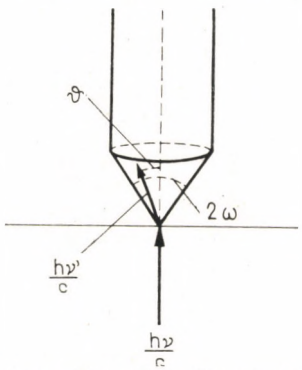
Mindez arra utalt, hogy a *Bohr*-féle elmélet lényeges kiegészítésre és módosításra szorul. Ezt szolgáltatja a kvantummechanika, amely az említett nehézségeket le tudta győzni és a *Bohr*-féle elméleten messze túlmegy. A kvantummechanika két, egymástól látszólag teljesen különböző elméletből indult ki: a mátrixmechanikából, amelyet HEISENBERG dolgozott ki és a hullámmechanikából, amely SCHRÖDINGERtől származik. A két elméletről, amely csaknem egy időben keletkezett, csakhamar kiderült, hogy ugyanannak az elméletnek két különböző alakja. A hullámmechanika sokkal szemléletesebb, mint a mátrixmechanika és konkrét problémák megoldására sokkal alkalmasabb. A mátrixmechanika igen absztrakt, de a kvantummechanika mélyebb alapjainak megértése csak ennek segítségével lehetséges.

2. §. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció

Elsősorban az ún. *Heisenberg*-féle határozatlansági relációval fogunk megismerkedni, amely az egész kvantummechanikában alapvető fontosságú.

A régi mechanika, vagyis a kvantummechanika előtti mechanika szerint a mérések pontosságának nem volt elvi határa. Természetesen a gyakorlatban a mérési berendezések tökéletlenségei minden mérés pontosságának határt szabnak, de természetesnek látszott, hogy a berendezések tökéletesítésével a mérések pontossága határtalanul fokozható. A kvantummechanikában is fennáll ez, ha egy rendszeren csak egy változót mérünk. HEISENBERG ismerte fel azonban elsőnek azt, hogy egy rendszer két kanonikusan konjugált változóját nem lehet egyidejűleg tetszőleges pontossággal meghatározni, mégpedig azért nem, mert az egyik változó mérése szükségképpen maga után vonja azt, hogy a rendszerbe beavatkozunk és ezzel a másik (kanonikusan konjugált) változónak adatát megváltoztatjuk. Így pl. ha egy részecskének egy koordinátáját mérjük, akkor ezzel a méréssel szükségképpen egy kis impulzust adunk a résznek és ezzel az ugyanazon időben történő impulzusmérés pontosságát lerontjuk.

Hogy a *Heisenberg*-féle határozatlansági relációt közelebbről megismerhessük, végezzük a következő gondolatbeli kísérletet. Gondoljunk egy elektront egy mikroszkóp tárgylemezére helyezve, amely a lemezen egy bizonyos sebességgel mozog. Az elektront világítsuk meg egy ν frekvenciájú monokromatikus fénnyel. A megfigyelés most már abban áll, hogy a beérkező fény, vagyis az elemi processzszust tekintve egy foton, az elektronon eltérítést szenved, tehát *Compton*-effektus lép fel. A *Compton*-effektus tárgyalásánál kimutatható, hogy az ütközés következtében az eltérített foton impulzusának (pontosabban a beeső fénysugár irányára



63. ábra. Vázlat a Heisenberg-féle gondolatkísérlethez

merőleges impulzuskomponensének) megváltozása $\frac{h\nu'}{c}\sin\vartheta$, ahol ϑ az a szög, amellyel a foton eredeti irányától eltért. Első közelítésben e helyett az impulzusváltozás helyett $\frac{h\nu}{c}\sin\vartheta$ írható, vagyis ν'-t ν-vel helyettesítjük. Mint a 63. ábrából

látható, csak olyan fotonok jutnak a mikroszkópba, amelyek belejutnak a 2ω nyílásszögű kúpba, tehát a mi esetünkben az eltérítés szögének, ϑ-nak, $+\omega$ és $-\omega$ közé kell esnie. Tehát a mikroszkópba jutó eltérített fotonok impulzusváltozása $-\frac{hv}{c}\sin\omega$ és $+\frac{hv}{c}\sin\omega$ közé esik, vagyis a *Compton*-effektus után az impulzusban előálló bizonytalanság

$$\Delta p = \frac{hv}{c}\sin\omega$$

nagyságrendű lesz. Ha figyelembe vesszük, hogy $\frac{c}{v} = \lambda$, akkor arra jutunk, hogy

$$\Delta p \approx \frac{h}{\lambda}\sin\omega. \tag{22.2.1}$$

Ezek után foglalkozzunk a helymeghatározással. Egy λ hullámhosszúságú fénnyel történő helymeghatározás egy λ nagyságrendű határozatlansággal kapcsolatos, ugyanis a mikroszkópban keletkező elhajlási kép méretei λ nagyságrendűek. Ezenkívül az elhajlási kép méretei függnek még a nyílásszögtől, 2ω-tól, mégpedig $\frac{1}{\sin\omega}$-val arányosak. Tehát a helymeghatározásban előálló bizonytalaság, Δq nagyságrendje $\frac{\lambda}{\sin\omega}$, vagyis

$$\Delta q \approx \frac{\lambda}{\sin\omega}. \tag{22.2.2}$$

Tehát a helymeghatározás szempontjából előnyös volna igen rövid hullámhosszúságú fényt alkalmazni és a nyílásszöget naggyá tenni, de ez megnövelné Δp-t.

Ha az ugyanazon időpontban történő helymeghatározás és impulzusmeghatározás bizonytalanságait összeszorozzuk, nyerjük, hogy

$$\Delta q \Delta p \approx h. \tag{22.2.3}$$

Ez az egyenlet lényegében már kifejezi az ún. *Heisenberg*-féle határozatlansági relációt, amelynek pontosabb megfogalmazása a következő. Ha q és p egymással kanonikusan konjugált változók, akkor, ha Δq és Δp az egyidejűleg történő megfelelő méréseknél fellépő (elvi) határozatlanságok, fennáll, hogy

$$\Delta q \Delta p \geqq h. \tag{22.2.4}$$

Külön kiemeljük, hogy a határozatlansági reláció Δq és Δp szorzatára vonatkozik, Δq és Δp közül az egyik elvi szempontból tekintve tetszőleges kicsi lehet, ha a másikat a reláció által megkövetelt arányban növeljük. Tehát egy változó mérésének pontosságára vonatkozóan a határozatlansági reláció nem tartalmaz kijelentést, az, ha a technikai nehézségektől eltekintünk, tetszőleges mértékben fokozható. Ha Δq vagy Δp közül az egyik nulla, vagyis ha az egyik változót egészen pontosan tudnánk meghatározni, akkor az ugyanahhoz az időhöz tartozó másik változó

határozatlansága végtelen nagy, vagyis akkor a másik változóról nem tudunk semmit.

A *Heisenberg*-féle határozatlansági reláció csak atomi méretekben jelent számottevő korlátozást h kicsisége folytán. A relációból következik, hogy

$$\Delta v_x \geqq \frac{h}{m_0} \frac{1}{\Delta x}, \tag{22.2.5}$$

ahol Δv_x a sebesség x-komponensének határozatlansága.

Vegyünk először makroszkopikus viszonyokat tekintetbe. Legyen adva egy 1g tömegű golyó, amelynek helyét 10^{-4} cm pontossággal határozzuk meg, ami makroszkopikus viszonyok között igen jó helymeghatározás. Ekkor nyerjük, hogy

$$\Delta v_x \geqq \frac{6{,}63 \cdot 10^{-27}}{1} \frac{1}{10^{-4}} \text{ cm s}^{-1} = 6{,}63 \cdot 10^{-23} \text{cm s}^{-1}. \tag{22.2.6}$$

Ez igen kis hibahatár, amely messze felülmúlja a sebességmeghatározásra vonatkozó követeléseinket.

Atomi méretek esetén azonban a helyzet lényegesen más. Tegyük fel, hogy meg akarjuk határozni egy atom egyik elektronjának helyét és sebességét ugyanabban az időpillanatban. Ekkor a helymeghatározás hibahatára 10^{-8} cm-nél semmi esetre sem lehet nagyobb, ha az elektront az atomban figyelemmel akarjuk kísérni. Az elektron tömegét behelyettesítve és Δq számára 10^{-8} cm-t írva a határozatlansági reláció fenti alakjába, az adódik, hogy

$$\Delta v_x \geqq \frac{6{,}63 \cdot 10^{-27}}{9{,}11 \cdot 10^{-28}} \frac{1}{10^{-8}} \text{ cm s}^{-1} = 7{,}3 \cdot 10^{8} \text{cm s}^{-1}. \tag{22.2.7}$$

Δv_x legkisebb értéke tehát kereken háromszor akkora, mint amekkorát a H-atom legbelső *Bohr*-féle pályáján keringő elektron sebességére nyertünk. Tehát a sebesség hibahatára igen nagy.

Ez az oka annak, hogy nem lehetséges egy elektron pályájának végigkövetése a *Bohr*-féle elméletben neki tulajdonított pályán. Mert amint az elektron helyét az atomi méreteknek megfelelő pontossággal meghatározzuk, akkor az elektron *Compton*-effektus folytán kirepül pályájából. Ezért a *Bohr*-féle pályák elvileg nem észlelhetők.

A *Heisenberg*-féle határozatlansági reláció az egész elméleti fizika egyik legfontosabb megismerését tartalmazza. A klasszikus mechanikában feltételeztük, hogy egy mechanikai állapotnak összes jellemző adatát egy bizonyos időpillanatban tetszőleges pontossággal lehet meghatározni. Most látjuk, hogy valójában egy rendszer különböző jellemző adatait egyidejűleg nem lehet tetszőleges pontossággal meghatározni, hanem a pontosságnak határai vannak. Elvileg lehetetlen egy rendszer összes jellemző mechanikai adatát, például egy tömegpont 3 koordinátáját és sebességét egy kezdeti időpillanatban teljesen pontosan meghatározni. Ezért tehát elvileg lehetetlen egy kezdeti időpillanatban végrehajtott megfigyelés adataira következtetni. Így az új mechanikában el kell tekintenünk olyan

egyenletek vagy összefüggések felállításától, amelyekbe egy rendszer egzakt kezdeti adatait beírva pontosan meghatározhatjuk a rendszer adatait egy későbbi időpillanatban. A való viszonyoknak ugyanis nem az a kérdés felel meg, hogy mi lesz egy pontosan definiált kezdeti állapotból, hanem a kérdést úgy kell módosítani, hogy mi lesz egy klasszikus értelemben nem pontosan definiált kezdeti állapotból. Erre a kérdésre olyan értelemben pontos választ adni, mint a klasszikus mechanikában, nyilván nem lehet, a rendszer későbbi állapotára vonatkozóan csak valószínűségi prognózist adhatunk meg. Már innen is látható, hogy az új mechanika, a kvantummechanika, lényegében statisztikai elmélet. Természetesen az elméletben egy rendszer állapotának egy bizonyos időpillanatra vonatkozó jellemző adatait csak oly mértékben szabad határozatlanoknak tekintenünk, amennyire azt a *Heisenberg*-féle reláció elvi okok miatt megköveteli; a technikai okok következtében fellépő kísérleti hibákat természetesen nem számítjuk bele az említett határozatlanságba.

Visszatérve a *Heisenberg*-féle határozatlansági relációra, kiemeljük még a következőt. Mivel a reláció mindegyik kanonikusan konjugált változópárra fennáll, a reláció fennáll az energiára és az időre is, ugyanis ezek is kanonikusan konjugáltak. A *Hamilton*-egyenletből, $\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}$-ből ugyanis, ha $p = H = E$-t írunk, következik, hogy $\frac{dq}{dt} = 1$, vagyis $q = t$. Tehát E-re és t-re is fennáll a *Heisenberg*-féle reláció, vagyis

$$\Delta E \Delta t \geqq h. \tag{22.2.8}$$

Ha tehát egy kvantumállapot energiáját abszolút pontosan ismerjük, akkor az időről, amelyet a rendszer ebben az állapotban eltölt, nem tudunk semmit.

Ez a reláció az oka annak, hogy például a kisugárzást, vagyis a foton emisszióját, mint folyamatot, elméletileg nem lehet tárgyalni. Egy ilyen foton-emisszió-elmélettől természetesen meg kellene követelnünk, hogy a kisugárzási processzus alatt megadja azt, hogy az energia milyen függvénye az időnek. Egy ilyen összefüggést azonban elvi okoknál fogva nem lehetne ellenőrizni, mint arról a reláció alapján azonnal meggyőződhetünk. Ellenben makroszkopikus rendszerek esetében, például egy antenna kisugárzásánál, a reláció következtében nem lépnek fel az előbbi nehézségek, mert ott az energiában, illetőleg az időben előálló határozatlanságok h kicsiségénél fogva nem játszanak szerepet.

A *Heisenberg*-féle határozatlansági reláció egészen új utakat mutatott az elméletnek. A reláció alapján látjuk ugyanis, hogy az elméletnek nem lehet célja, hogy az atomnak oly belső folyamatairól, amelyek elvi okoknál fogva nem figyelhetők meg, számot adjon, hanem hogy olyan mechanikát konstruáljon, amely megfigyelhető mennyiségeket, tehát például a spektrumvonalak hullámhosszát vagy az atom energianívóit vezeti le. Ebben a modellben csak az elemi alkotórészeket és a köztük működő erőket ismerjük, de nem ismerjük a klasszikus mechanika ún. integrációs állandóit.

3. §. A kauzalitás elve a kvantummechanikában

A *Heisenberg*-féle relációval kapcsolatban azonnal felmerül a kérdés, hogyan kell megfogalmazni a kauzalitás elvét a kvantummechanikában. Mielőtt a kérdés tárgyalására rátérnénk, röviden megemlítjük, hogy a kauzalitás elve hogyan szól a klasszikus mechanikában. A kauzalitás elvét ott a következőképp fogalmazhatjuk meg: egy lezárt rendszer esetében egyenlő kezdeti állapotokból mindig ugyanazok a későbbi állapotok következnek. A kvantummechanikában a kauzalitás elve ilyen megfogalmazásban nem áll fenn, ugyanis, ha megvizsgáljuk, hogy egy atomi rendszer milyen fejlődésen megy keresztül, feltéve, hogy a megfigyelés pontosságának elvi határai között mindig ugyanabból a kezdeti állapotból indulunk ki, akkor azt tapasztaljuk, hogy ez általában minden esetben más. Természetesen arra az álláspontra lehetne helyezkedni, hogy ez nem bizonyít semmit az okság elvének fenti megfogalmazása ellen, mert hiszen a valóságban más és más kezdeti állapotokból indultunk ki, amelyek között mi csak azért nem tudunk különbséget tenni, mert a megfigyelés pontosságának elvi határai vannak és így valójában különböző kezdeti állapotoknak megfelelő folyamatokat észlelünk. Ha módunkban volna elvi határok által nem korlátozott pontos megfigyeléseket végezni, akkor előreláthatóan azt találnánk, hogy az okság elve a fenti megfogalmazásban érvényes. De ilyen fajta okoskodások, illetve spekulációk céltalanok. Ugyanis a fizikus feladata nem lehet az, hogy megállapítsa, ill. megvizsgálja azt, hogy mi volna akkor, ha különböző, nem teljesíthető feltételek volnának megvalósítva. A fizikus vizsgálatának tárgya a valóban megfigyelhető világ. A fizikus ugyanis csak azzal foglalkozhat, ami valóban megfigyelhető. Ebből következik, hogy két olyan állapotot, amelyek között semmilyen megfigyeléssel sem tudunk különbséget tenni, azonosnak kell tekintenünk. Tehát az új mechanikában az okság elvének fenti megfogalmazását nem fogadhatjuk el.

Ezzel kapcsolatban legelőször is felmerül az a kérdés, hogyan lehetséges az, hogy a mérések pontosságának elvi határa ellenére a klasszikus mechanikában megadott kezdeti állapotból egyértelműen tudunk következtetni a rendszer későbbi állapotaira. Ennek magyarázata abban van, hogy a klasszikus mechanika makroszkopikus testekkel foglalkozik és ezekre vonatkozóan a mérések pontosságának elvi határa h kicsiségénél fogva, mint azt egy példán mi is bemutattuk, jelentőségtelen. Tehát a makroszkopikus világban sem érvényes az okság elve a fenti megfogalmazásban, csakhogy mi ezt nem vesszük észre, mert mérési berendezéseink technikai okoknál fogva nem szolgáltatnak elég pontos adatokat. Ha azonban a *Planck*-féle állandó nagy volna, akkor egy tömegpont a makrokozmoszban is mindannyiszor megváltoztatná sebességét, valahányszor helyzetének megállapítása céljából megvilágítanánk.

A következő kérdés az, hogy a kvantummechanikában milyen megfogalmazásban áll fenn az okság elve. Mint már említettük, a kvantummechanikában nem tudunk egy kezdeti állapotból egy atomi rendszernek későbbi állapotaira klasszikus értelemben egzakt módon következtetni, mert a kezdeti állapot adatait nem ismerjük teljes pontossággal. Arra azonban elegendő pontossággal ismerjük a kezdeti

állapot adatait, hogy megállapítsuk annak valószínűségét, hogy egy későbbi időpontban végzett megfigyelés eredménye a rendszernek valamilyen megadott állapota lesz. Tehát matematikai segédeszközök nélkül a következőképpen fogalmazhatjuk meg a kauzalitás elvét a kvantummechanikában: egy megadott kezdeti állapot nem determinálja a rendszerrel való további történést, de determinálja annak valószínűségét, hogy ez a történés egy megadott módon megy végbe. Tehát a kvantummechanikában csak ilyen statisztikus értelemben következtethetünk a rendszernek egy megadott állapotából a későbbi állapotokra.

4. §. Hullámok fázis- és csoportsebessége

A következőkben a hullámmozgással kapcsolatban néhány fogalommal ismerkedünk meg, amelyekre szükségünk lesz. Foglalkozzunk először egy egyszerű periodikus hullámmal, ϕ-vel, amelyet komplex alakban állítunk elő. Ha a koordinátarendszer x tengelyét a hullám terjedésének irányába helyezzük, akkor

$$\phi = Ae^{i(\omega t - kx)}, \tag{22.4.1}$$

ahol ω a körfrekvencia és k a hullámszám. Az amplitúdót A-val, az időt t-vel jelöljük. Ha T a teljes rezgés ideje és λ a hullámhossz, akkor

$$\omega = \frac{2\pi}{T} \qquad \text{és} \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}. \tag{22.4.2}$$

A hullám sebessége, u az

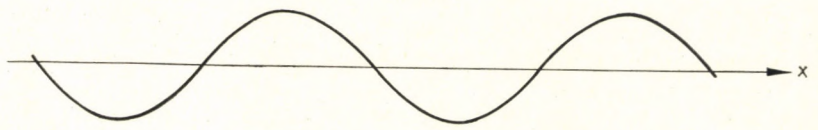
$$\omega t - kx = \text{állandó} \tag{22.4.3}$$

egyenletből t szerinti differenciálással a következőképpen adódik:

$$u = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} = \nu\lambda. \tag{22.4.4}$$

Az így előállított egyszerű periodikus hullám mindig végtelen, ami azt jelenti, hogy a tengely mentén a pillanatnyi zérushelyektől eltekintve minden időben, mindenütt van elongáció, amelynek maximális értéke az A amplitúdó (64. ábra).

Ha olyan hullámot akarunk előállítani, amelynek amplitúdója csak egy véges darabon bír mérhető értékkel, ezen a darabon kívül pedig mindenütt zérus, akkor különböző ω-jú és k-jú hullámokat kell szuperponálnunk. Ezek interferencia útján egyes helyeken erősítik egymást, ezeken a helyeken mérhető amplitúdót kapunk, más helyeken pedig gyengítik egymást, úgyhogy ott a hullámok alkalmas



64. ábra. Egyszerű periodikus hullám

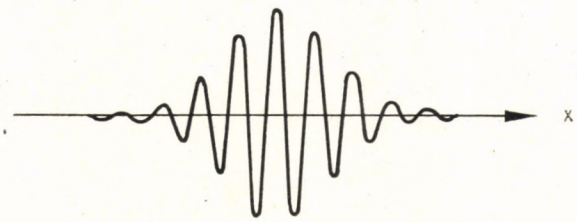
megválasztása esetén az amplitúdó zérus. Minél rövidebb a hullám, ω és k annál nagyobb intervallumához tartozó hullámokat kell szuperponálni. (65. ábra).

A szuperpozíció eredményeként előálló ún. hullámcsoport kifejezése a következő

$$\Phi = \int_{k_0-\eta}^{k_0+\eta} A(k) e^{i[\omega(k)t - kx]}\, dk\,. \tag{22.4.5}$$

Ha a $(k_0 - \eta,\ k_0 + \eta)$ intervallum elég kicsi, akkor az eredmény felfogható, mint egy az eredetitől csak kissé különböző hullám, amelynek amplitúdója változik. A kitevő ugyanis a következő alakban írható

$$\omega t - kx = \omega_0 t - k_0 x + (\omega - \omega_0)t - (k - k_0)x. \tag{22.4.6}$$



65. ábra. Hullámcsoport

Ezt beírva a hullámcsoport kifejezésébe, nyerjük, hogy

$$\Phi = C e^{i(\omega_0 t - k_0 x)}, \tag{22.4.7}$$

ahol

$$C = \int_{k_0-\eta}^{k_0+\eta} A(k) e^{i[(\omega-\omega_0)t - (k-k_0)x]}\, dk\,. \tag{22.4.8}$$

A hullámcsoport sebességét megadja annak a helynek a sebessége, amelyen C állandó. C ott állandó, ahol

$$(\omega - \omega_0)t - (k - k_0)x = \text{állandó}. \tag{22.4.9}$$

Innen a hullámcsoport sebessége, vagyis a csoportsebesség

$$u_g = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega - \omega_0}{k - k_0} = \frac{d\omega}{dk}, \tag{22.4.10}$$

feltéve, hogy $\omega - \omega_0$ és $k - k_0$ elegendő kicsi, vagyis hogy η kicsi. A $\dfrac{d\omega}{dk}$ differenciálhányados a $k = k_0$ értékre vonatkozik. Előbb azt találtuk, hogy

$$u = \frac{\omega}{k}, \tag{22.4.11}$$

ahonnan

$$k = \frac{\omega}{u}. \tag{22.4.12}$$

Ezzel nyerjük, hogy

$$\frac{1}{u_g} = \frac{d}{d\omega}\left(\frac{\omega}{u}\right) = \frac{d}{d\nu}\left(\frac{\nu}{u}\right), \tag{22.4.13}$$

ahol $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$ a frekvencia. Ez a csoportsebesség kifejezésének egyik ismert alakja. Ebből látható, hogy a csoportsebesség csak akkor nem egyezik meg a fázissebességgel, ha a fázissebesség ν függvénye, vagyis ha diszperzió áll fenn.

A csoportsebesség nagyon fontos fogalom és, mint látjuk, a hullámcsoport terjedési sebességét jelenti, míg a fázissebesség a csoportot alkotó egyszerű szinuszhullámok sebessége. Egy végtelen hosszú szinuszhullám völgyeivel és hegyeivel jeleket adni nem lehet. Jeleket adni akusztikai vagy elektronmágneses úton csak hullámcsoportokkal lehet, mint már abból is látható, hogy a jeladás alkalmával meg kell indítanunk vagy meg kell szakítanunk egy hullámzási folyamatot. Tehát a jeladásra alkalmas hullám nem lehet végtelen hosszú szinuszhullám, amiből következik, hogy a csoportsebesség az ún. jelsebességgel egyenlő.

5. §. Anyaghullámok

Az előzőkben már megismerkedtünk a fénynek, továbbá elektronsugaraknak és általában atomsugaraknak duális természetével. Láttuk, hogy ezek egyrészt korpuszkuláris, másrészt hullámszerű tulajdonságokkal rendelkeznek. Ezeknek a hullámoknak alapján (különösen fény esetén) szintén levezethető a *Heisenberg*-féle határozatlansági reláció, ami azt a rendkívül szoros kapcsolatot mutatja, ami a korpuszkulák és a hozzájuk rendelt hullámok, az ún. anyaghullámok között fennáll. Az anyaghullámok gondolata DE BROGLIETŐL származik és a következőkben ezekkel a hullámokkal akarunk részletesebben foglalkozni.

Fény esetében, a fotonok pályái, vagyis a fénysugarak a hullámfelületek ortogonális trajektóriái. Ameddig az optikai ernyők nyílásai nagyok a fény hullámhosszához képest, tehát a geometriai optika érvényességének határain belül vagyunk, az elhajlásjelenségeket elhanyagolhatjuk és a fénysugarak útját a *Fermat*-féle elvből határozhatjuk meg, amely a következő:

$$\int_{P_0}^{P} n\,ds = \text{extremum}. \tag{22.5.1}$$

P_0 és P a fénysugarak pályájának két pontja, n a törésmutató, amelyet mint a hely függvényét kell ismernünk, ds az útelem. FERMAT elvének tehát az az értelme, hogy $\int_{P_0}^{P} n\,ds$ a fénysugár valóságos útján képezve és összehasonlítva a P_0 és

P pontokon átmenő más utak mentén képezett értékekkel, szélső érték. FERMAT elvét még a következőképpen is írhatjuk:

$$\delta \int_{P_0}^{P} n ds = 0 , \tag{22.5.2}$$

ahol variálni kell a P_0 és P közötti utat, de a kezdő- és végpontot nem. Ha figyelembe vesszük, hogy a törésmutató fordítva arányos a fényhullámok fázissebességével, u-val, mégpedig $n = \frac{c}{u}$, ahol c a fénysebesség légüres térben, akkor a *Fermat*-féle elv a következő alakban is kifejezhető:

$$\delta \int_{P_0}^{P} \frac{ds}{u} = 0 . \tag{22.5.3}$$

A *Fermat*-féle elv, mint említettük, csak a geometriai optika körében érvényes, de ha az optikai ernyőkön levő nyílások méreteinek nagyságrendje megegyezik a fény hullámhosszával, elhajlásjelenségek lépnek fel, így a geometriai optika elveszti érvényességét. Az előálló jelenségeket már nem lehet fénysugarak segítségével leírni, hanem a jelenségek tárgyalására a fény hullámtermészetéből, vagyis a hullámelméletből kell kiindulni.

A tömegpontok pályáját a klasszikus mechanika alapján a *Hamilton*-elvből határozhatjuk meg, amely hasonlít a fénysugarak útjának meghatározására szolgáló *Fermat*-féle elvhez. Ez a hasonlóság különösen akkor tűnik ki, ha csak olyan pályák között végzünk összehasonlításokat, amelyeken az összenergia, E, variációja mindenütt nulla. Ebben az esetben a *Hamilton*-elvből egy új elvet, az ún. *Maupertuis*-féle elvet nyerjük. A *Hamilton*-elv a következő:

$$\delta \int_{t_0}^{t} L dt = \delta \int_{t_0}^{t} (2T - E) dt = 0, \tag{22.5.4}$$

ahol $L = T - V$, továbbá T a kinetikus, V a potenciális energia és t az idő. Ha az összenergiát nem variáljuk, akkor ebből

$$\delta \int_{t_0}^{t} 2T dt = 0 \tag{22.5.5}$$

következik. Ez egy m_0 tömegű és v sebességű tömegpont esetén a következőképp írható:

$$\delta \int_{t_0}^{t} m_0 v^2 dt = \delta \int_{t_0}^{t} m_0 v \frac{ds}{dt} dt = \delta \int_{P_0}^{P} m_0 v ds = 0 , \tag{22.5.6}$$

ahol ds a pályaelem. Ha itt figyelembe vesszük, hogy m_0 állandó, akkor nyerjük a

Maupertuis-féle elvet, amely szerint

$$\delta \int_{P_0}^{P} v ds = 0. \tag{22.5.7}$$

Ha a mechanika törvényei szerint mozgó korpuszkulákhoz hasonló módon akarunk hullámokat hozzárendelni, mint ahogyan a fénysugarak mentén haladó fotonokhoz a fényhullámok tartoznak és ha azt akarjuk, hogy ezekre a hullámokra ismét érvényes legyen a *Fermat*-féle elv, akkor, mint az (5.3) és (5.7) formulák összehasonlításából látható, a hozzárendelt hullámok fázissebességét, u-t, $\frac{1}{v}$-vel kell arányosnak vennünk. Tehát mivel V potenciális energia esetén

$$v = \sqrt{\frac{2}{m_0}(E - V)}, \tag{22.5.8}$$

u-ra a következő összefüggésnek kell fennállnia

$$u = \frac{B}{\sqrt{E - V}}, \tag{22.5.9}$$

ahol B egy arányossági tényező.

Külön kiemeljük, hogy a korpuszkulákhoz hozzárendelt hullámok nem elektromágneses hullámok. A hozzárendelt hullámok csak a foton esetében elektromágneses természetűek.

Hátra van még, hogy ezeknek a hozzárendelt hullámoknak, az ún. *de Broglie-hullám*oknak megadjuk a frekvenciáját, v-t. Közelfekvő az a gondolat, hogy ezt a következő egyenlettel definiáljuk:

$$E = hv, \tag{22.5.10}$$

miáltal kapjuk, hogy

$$u = \frac{B}{\sqrt{hv - V}}. \tag{22.5.11}$$

Tehát a hozzárendelt hullámokra, mivel u függvénye v-nek, diszperzió áll fenn.

De Broglie hipotézisét, alapvető fontossága miatt, eredeti fogalmazásban is megadjuk (Journal de Physique, *1*, 1, 1924.): „Mindannyiszor, ha egy koordinátarendszerben egy anyagi korpuszkula a legáltalánosabb értelemben véve egy E energiával rendelkezik, ebben a koordinátarendszerben egy periodikus fenomén létezik, amelynek frekvenciája v, amely az $E = hv$ egyenlettel van definiálva (h a *Planck*-féle állandó)." Megemlítjük, hogy de Broglie a fotonokat is korpuszkuláknak tekinti. Azzal, hogy a hullámok frekvenciáját definiáló egyenletbe bevezette a *Planck*-féle állandót, megteremtette a hullámoknak a kvantumelmélettel való kapcsolatát.

Ezzel a kapcsolattal akarunk még a továbbiakban részletesen foglalkozni. Mint láttuk, a *de Broglie*-hullámokra diszperzió áll fenn, ebben az esetben pedig,

mint az előző fejezetben láttuk, különbséget kell tenni a hullám fázissebessége, u és csoportsebessége, u_g között. Láttuk azt is, hogy a csoportsebesség egyenlő a jelsebességgel, vagyis egyenlő azzal a sebességgel, amellyel pl. elektromágneses úton leadott jelek terjednek, ez tehát az a sebesség, amelyet elektromágneses regisztráló berendezésekkel mérni tudunk. Egy tömegpont sebességét természetesen szintén tudjuk mérni, ezért tehát a korpuszkulákhoz rendelt *de Broglie*-féle hullámoktól azt fogjuk megkövetelni, hogy azoknak a csoportsebessége megegyezzen a korpuszkula, ill. a tömegpont sebességével, a mi esetünkben v-vel. Láttuk, hogy a csoportsebességre a következő formula érvényes:

$$\frac{1}{u_g} = \frac{d}{dv}\left(\frac{v}{u}\right). \tag{22.5.12}$$

Mivel u_g-nek egyenlőnek kell lennie v-vel, nyerjük, hogy

$$\frac{d}{dv}\left(\frac{v}{u}\right) = \frac{1}{v} = \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{m_0}(E-V)}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{m_0}(h\nu - V)}}, \tag{22.5.13}$$

ahol E helyébe $h\nu$-t írunk. Ebből az összefüggésből integráció útján nyerjük, hogy

$$\frac{v}{u} = \int \frac{d\nu}{\sqrt{\frac{2}{m_0}(h\nu - V)}} = \frac{1}{h}\sqrt{2m_0(h\nu - V)}. \tag{22.5.14}$$

Tehát

$$u = \frac{h\nu}{\sqrt{2m_0}} \frac{1}{\sqrt{h\nu - V}}. \tag{22.5.15}$$

Ha tehát a fenti állandót, B-t $\frac{h\nu}{\sqrt{2m_0}}$-val tesszük egyenlővé, akkor egy olyan diszperzió-törvényt nyerünk, amely egyrészt eleget tesz annak a követelménynek, hogy $\frac{1}{u}$ arányos v-vel, másrészt pedig teljesíti azt a követelményt is, hogy $u_g = v$. Megemlítjük, hogy a B állandó tartalmazhatja $h\nu$-t, vagyis E-t, mert a *Maupertuis*-féle elvnél az összehasonlításra kerülő pályák ugyanahhoz az E-hez tartoznak.

Így tehát a *de Broglie*-hullám fázissebességére egy V potenciálú térben nyerjük, hogy

$$u = \frac{E}{\sqrt{2m_0(E-V)}} = \frac{h\nu}{\sqrt{2m_0(h\nu - V)}}. \tag{22.5.16}$$

Innen a hullámhossz számára a következő kifejezést nyerjük ugyancsak V potenciálú tér esetében:

$$\lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{h}{\sqrt{2m_0(h\nu - V)}} = \frac{h}{\sqrt{2m_0(E-V)}}. \tag{22.5.17}$$

Tehát olyan tér esetében, ahol $V = 0$, a hullámhossz számára az adódik, hogy

$$\lambda_0 = \frac{h}{\sqrt{2m_0E}} = \frac{h}{m_0v} = \frac{h}{p}, \tag{22.5.18}$$

ugyanis ebben az esetben $E = \frac{1}{2} m_0v^2$. Ha egy $V=0$ potenciálú térből egy V térbe lépnek át a hullámok, ez megfelel annak, hogy a hullámok egy oly térbe lépnek, amelynek a nulla potenciálú térre vonatkoztatott törésmutatója

$$n = \frac{\lambda_0}{\lambda} \sqrt{\frac{E - V}{E}}. \tag{22.5.19}$$

Mivel n a hely függvénye, a V potenciálú tér egy változó törésmutatójú közeggel ekvivalens, amelyben a hullámfelületek ortogonális trajektóriái, vagyis a korpuszkulák pályái, általában görbültek.

Ha a tapasztalati, ill. kísérleti eredmények nem utalnak arra, hogy a korpuszkulákhoz valóban kell hullámokat rendelnünk, akkor az előbbi fejtegetésünk hiábavaló és felesleges elméleti spekuláció volna. A tapasztalat azonban azt mutatja, hogy elektronsugarakkal és atomsugarakkal elhajlásjelenségeket lehet előállítani, vagyis hogy ezek a sugarak korpuszkuláris természetükön kívül hullámtermészettel is bírnak. Azt is láttuk, hogy a hullámhossz $V = 0$ esetben megfelel a *de Broglie*-féle hullámok hosszának, vagyis $\frac{h}{p}$-vel egyenlő. Említettük azt is, hogy a tapasztalat azt mutatja, hogy a fény is duális természetű, mégpedig foton- és hullámtermészettel bír. A *de Broglie*-hullámokra vonatkozó elméleti fejtegetéseinknek fizikai tartalmát éppen ezek a kísérleti tények szolgáltatják.

6. §. A Schrödinger-egyenlet

Az optikában, midőn az elhajlásjelenségeket tárgyaljuk, a hullámegyenletből kell kiindulni. Hasonlóképpen az atommechanikában, ahol olyan jelenségekkel foglalkozunk, melyekben szereplő távolságok a *de Broglie*-hullámok hullámhosszával egyenlő nagyságrendűek, a *de Broglie*-hullámoknak az optikai hullámegyenletekhez hasonló hullámegyenletéből kell kiindulnunk, mely a következő:

$$\Delta\Psi = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}; \qquad u = \frac{E}{\sqrt{2m_0(E - V)}}. \tag{22.6.1}$$

Ebben az egyenletben Ψ jelentése egyelőre határozatlan. Ψ-ről most csak azt tesszük fel, hogy négyzete, ill. komplex Ψ esetén abszolút értékének négyzete, $\Psi\Psi^*$ (ahol Ψ^* a Ψ konjugált komplexe), a korpuszkuláris sugár, pl. elektronsugár, intenzitásának mértéke, teljesen hasonlóan az optikához, ahol a hullámegyenlet megoldásának, az ún. fényvektornak, ill. komponensének négyzete a fény intenzitásának mértékét szolgáltatja.

Mint a hullámelméletben általában, itt is feltételezzük, hogy Ψ az időnek tisztán periodikus függvénye, tehát

$$\Psi = \psi e^{-2\pi i \nu t} = \psi e^{-2\pi i \frac{E}{h} t}, \tag{22.6.2}$$

ahol ψ még a hely függvénye. Ezt behelyettesítve a fenti hullámegyenletbe, ψ számára nyerjük a fundamentális *Schrödinger*-egyenletet, amely az egész atommechanika alapja

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E - V)\psi = 0. \tag{22.6.3}$$

Ezt az egyenletet az energia

$$H = \frac{1}{2m_0}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z) \tag{22.6.4}$$

kifejezéséből a következő formális helyettesítések útján kaphatjuk. Az impulzuskomponensek helyébe operátorokat írunk, mégpedig

$$p_x \to \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}, \qquad p_y \to \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial y}, \qquad p_z \to \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z}. \tag{22.6.5}$$

Az impulzuskomponensek négyzeteihez pedig a következő operátorokat rendeljük:

$$p_x^2 \to -\frac{h^2}{4\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \qquad p_y^2 \to -\frac{h^2}{4\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}, \qquad p_z^2 \to -\frac{h^2}{4\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial z^2}, \tag{22.6.6}$$

amelyek formálisan az előbbi operátorok négyzeteinek tekinthetők. Ezeket beírva az energia kifejezésébe, nyerjük az ún. *Hamilton*-féle operátort vagy energiaoperátort, amelyet egy ψ függvényre alkalmazva, vagyis az operátort jobbról a ψ függvénnyel formálisan szorozva és az így nyert kifejezést $E\psi$-vel téve egyenlővé, nyerjük a *Schrödinger*-egyenletet:

$$H\left(x, y, z, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial y}, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z}\right) = E\psi,$$

$$-\frac{1}{2m_0}\left(\frac{h^2}{4\pi^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{h^2}{4\pi^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{h^2}{4\pi^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + V\psi = E\psi,$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + V\psi = E\psi,$$

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E - V)\psi = 0.$$

Megemlítjük még, hogy itt V-hez, amely a koordináták függvénye, a V-vel való szorzás operátorát rendeltük, amiből következik, hogy a koordinátákhoz a koordinátákkal való szorzás operátorát rendeljük.

Mindez egyelőre puszta formalitás, de ezzel a formalizmussal már sikerül pl. általános koordináták esetén is felírni a *Schrödinger*-egyenletet. Ekkor, ha q_i és p_i az egymáshoz kanonikusan konjugált általános koordináta és impulzuskoordináta, akkor az általános impulzuskoordinátának, p_i-nek és p_i^2-nek a következő operátorok felelnek meg:

$$p_i \to \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_i}, \qquad p_i^2 \to -\frac{h^2}{4\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial q_i^2}, \tag{22.6.7}$$

mely helyettesítéseket azonban csak a *Hamilton*-függvény megfelelő szimmetrizálása után szabad elvégezni. Tehát ebben az esetben a *Schrödinger*-egyenlet formálisan a következő lesz

$$H\left(q_i, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_i}\right)\psi = E\psi. \tag{22.6.8}$$

Az energiát, E-t, eliminálhatjuk a *Schrödinger*-egyenletből, ugyanis

$$\Psi = \psi e^{-\frac{2\pi i}{h}Et}, \tag{22.6.9}$$

tehát

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{2\pi i}{h}E\Psi \quad \text{és} \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -\frac{4\pi^2}{h^2}E^2\Psi. \tag{22.6.10}$$

(6.1) első egyenletébe beírva a második egyenletből u kifejezését, nyerjük, hogy

$$\Delta\Psi = 2m_0(E-V)\frac{1}{E^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}. \tag{22.6.11}$$

$\frac{1}{E^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}$-et (6.10) második egyenletéből kifejezve és az $\frac{1}{E^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}$-re nyert kifejezést (6.11)-be helyettesítve, nyerjük, hogy

$$\Delta\Psi = 2m_0(E-V)\left(-\frac{4\pi^2}{h^2}\Psi\right) = -\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}E\Psi + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}V\Psi. \tag{22.6.12}$$

Innen $E\Psi$-t (6.10) első egyenlete segítségével eliminálva és az egyenletet rendezve

$$\Delta\Psi - \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}V\Psi + \frac{4\pi i m_0}{h}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = 0. \tag{22.6.13}$$

Ezt az egyenletet nevezzük az időtől függő *Schrödinger-egyenlet*nek, vagy röviden *időegyenlet*nek. Ez az egyenlet olyan problémák tárgyalására szükséges, amelyeknél V tartalmazza az időt, vagyis V az idő függvénye. Az egyenletben szereplő Ψ természetesen az időnek is függvénye.

Az időtől függő *Schrödinger*-egyenletet pl. általános koordináták esetében a következőképpen állíthatjuk elő egyszerűen. A (6.8) egyenlet természetesen nemcsak ψ-re, hanem Ψ-re is érvényes, ami azonnal látható, ha pl. az egyenletet jobbról (vagy balról, mert a H operátor nem hat az időre) megszorozzuk $e^{-\frac{2\pi i}{h}Et}$-vel. Tehát fennáll, hogy

$$H\left(q_i, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_i}\right)\Psi = E\Psi\,. \tag{22.6.14}$$

$E\Psi$-t a (6.10) első egyenlete segítségével eliminálva, nyerjük az időtől függő *Schrödinger*-egyenletet általános koordináták esetén

$$H\left(q_i, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_i}\right)\Psi = -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \Psi}{\partial t}\,. \tag{22.6.15}$$

A *Schrödinger*-egyenlet és a klasszikus mechanika *Hamilton – Jacobi*-féle egyenlete között analógia áll fenn. Ha H az időt explicite nem tartalmazza, akkor az ún. *rövidített Hamilton – Jacobi-egyenlet* a következő

$$H\left(q_i, \frac{\partial S_0}{\partial q_i}\right) = E\,, \tag{22.6.16}$$

ahol

$$p_i = \frac{\partial S_0}{\partial q_i} \tag{22.6.17}$$

és S_0 a rövidített *Hamilton*-féle principális függvény.

A (6.16) egyenletet az időtől független (6.8) *Schrödinger*-egyenlettel összehasonlítva, kitűnik a nagyfokú analógia, de ugyanakkor szembetűnik a nagyfokú különbség is. Míg a *Hamilton – Jacobi*-egyenlet esetében p_i^2 helyébe $\left(\frac{\partial S_0}{\partial q_i}\right)^2$-t kell helyettesíteni a *Hamilton*-féle kifejezésbe, addig a *Schrödinger*-egyenlet képzésénél p_i^2 helyébe $\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2 \frac{\partial}{\partial q_i^2}$ kerül. Ki lehet mutatni, hogy a *Schrödinger*-egyenletből $h \to 0$ esetben következik a *Hamilton – Jacobi*-egyenlet, mint általában $h \to 0$ esetben az egész kvantumelmélet átmegy a klasszikus mechanikába. A *nem rövidített Hamilton – Jacobi-egyenlet* a következő:

$$H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}\right) = -\frac{\partial S}{\partial t}\,, \tag{22.6.18}$$

ahol $\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i$ és a (6.15) egyenlettel ugyanaz az analógia áll fenn, mint (6.16) és (6.8) között. Látjuk, hogy $\frac{\partial S}{\partial t}$-nek $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ felel meg. Itt S a *Hamilton*-féle principális függvény.

7. §. A Schrödinger-egyenlet származtatása a variációs elvből

Hasonlóan, mint ahogy a klasszikus mechanika mozgásegyenleteit variációs elvből lehet levezetni, a hullámmechanika alapegyenlete, a *Schrödinger*-egyenlet, szintén származtatható variációs elvből. A klasszikus mechanika mozgásegyenletei a *Hamilton*-elv *Euler—Lagrange*-féle differenciálegyenletei, a *Schrödinger*-egyenlet pedig az *Euler—Lagrange*-féle differenciálegyenlete egy variációs elvnek, melynek egy N részecskéből álló rendszer esetén a következő alakot adhatjuk:

$$\delta \int L d\tau = 0, \tag{22.7.1}$$

ahol

$$L = \sum_{i=1}^{N} \frac{h^2}{8\pi^2 m_i} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x_i} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \frac{\partial \psi^*}{\partial y_i} \frac{\partial \psi}{\partial y_i} + \frac{\partial \psi^*}{\partial z_i} \frac{\partial \psi}{\partial z_i} \right) + V \psi \psi^*. \tag{22.7.2}$$

A ψ hullámfüggvény a következő normálási mellékfeltételnek tartozik eleget tenni

$$\int \psi^* \psi d\tau = 1, \tag{22.7.3}$$

továbbá m_i az i-edik részecske tömegét, V pedig az egész rendszer potenciális energiáját jelenti. $d\tau$ a $3N$-dimenziós tér térfogateleme.

Egy $-E$ *Lagrange*-féle multiplikátor bevezetésével a (7.3) mellékfeltételt oly módon vehetjük figyelembe, hogy a variációs elvnek a következő alakot adjuk

$$\delta \int (L - E\psi^* \psi) d\tau = 0, \tag{22.7.4}$$

amelyből a variáció elvégzése után nyerjük az N részecskéből álló rendszer *Schrödinger*-egyenletét:

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{h^2}{8\pi^2 m_i} \Delta_i \psi + (E - V)\psi = 0, \tag{22.7.5}$$

ahol Δ_i az i-edik részecskére vonatkoztatott *Laplace*-féle operátor. Innen egyúttal látható az is, hogy E, vagyis a *Lagrange*-féle multiplikátor negatívja, a rendszer energiaparaméterével azonos.

A H *Hamilton*-operátorral a (7.5) egyenletet a következő alakban írhatjuk:

$$H\psi = E\psi, \tag{22.7.6}$$

ahonnan az E energiaparaméter számára a következő kifejezés adódik

$$E = \frac{\int \psi^* H \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau}. \tag{22.7.7}$$

Parciális integrálással nyerjük, hogy

$$\int L d\tau = \int \psi^* H \psi d\tau. \tag{22.7.8}$$

Ennek az összefüggésnek felhasználásával E számára (7.7)-ből a következő ki-

fejezést kapjuk

$$E = \frac{\int L d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau}. \tag{22.7.9}$$

Innen, figyelembe véve a variációs elvet, következik, hogy a (7.5) *Schrödinger*-egyenlet energiasajátértékei a (7.9) kifejezés szélső értékei, mégpedig, mint kimutatható, minimumai.

A (7.8) összefüggésből következik, hogy a variációs elvnek még a következő alakot is adhatjuk

$$\delta \int \psi^*(H - E)\psi d\tau = 0. \tag{22.7.10}$$

A (7.7) kifejezés energiaminimumai tehát szintén megegyeznek a (7.6) egyenlet, ill. az ezzel azonos (7.5) egyenlet sajátértékeivel.

8. §. Sajátfüggvények, sajátértékek

A Ψ függvény, amely eleget tesz a *Schrödinger*-egyenletnek, a korpuszkulákkal hasonló kapcsolatban van, mint a fényhullámok a fotonokkal. Ahol tehát $\Psi\Psi^*$, ill. Ψ eltűnik, oda nem jutnak korpuszkulák. Ha tehát pl. a *Schrödinger*-egyenletnek oly Ψ megoldását keressük, amely egy atomhoz kötött elektronnak felel meg, akkor ennek a Ψ-nek a végtelenben mindenesetre el kell tűnnie, mert oda egy atomhoz kötött elektron nem juthat el. Továbbá a *Schrödinger*-egyenletnek egy fizikai szempontból használható megoldásától meg kell követelni, hogy mindenütt folytonos legyen és egyértelmű függvénye legyen a helynek. A hullámmechanika nagy sikere a régi kvantumelmélettel szemben, hogy ezek a teljesen természetes követelmények elegendők ahhoz, hogy az atomok vagy atomi rendszerek diszkrét energianívóit meghatározzuk, míg ezeket a régebbi elméletben csak a teljesen idegenszerű kvantumfeltételekkel lehetett megkapni.

A Ψ függvény folytonosságának és egyértelműségének érdekes következménye, hogy elegendően nagyméretű zárt pályákra teljesülnek a régi, *Bohr*-féle kvantumfeltételek. Az m_0 tömegpont mozgását leíró Ψ hullám hullámhossza (5.17) szerint

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0(E - V)}}. \tag{22.8.1}$$

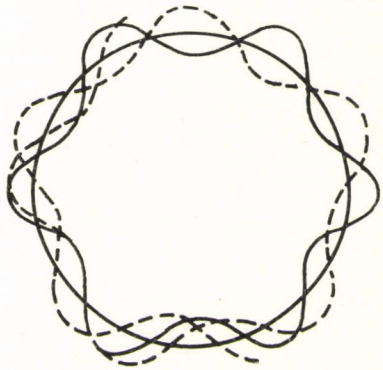
Ez általában a pálya mentén helyről helyre változik. Tekintsük a pálya egy dq elemi szakaszát, amelyről feltételezzük, hogy rá még több teljes hullám esik. Ilyen szakaszokra az egész pályát csak akkor lehet felbontani, ha a hullámhossz változása a pálya mentén elegendően lassú, azaz ha a pálya elegendően nagyméretű. A dq szakaszra eső hullámok száma $\frac{dq}{\lambda}$ lesz, az egész pályára pedig $\oint \frac{dq}{\lambda}$ hullám esik, ahol az integráció a teljes zárt pályára vonatkozik. Ψ egyértelműsége megköveteli, hogy a hullámhosszat a pályára egész számúszor lehessen felmérni

(66. ábra). Tehát

$$\oint \frac{dq}{\lambda} = \oint \frac{1}{h} \sqrt{2m_0(E - V)}\, dq = n \tag{22.8.2}$$

kell hogy legyen, ahol n egy egész szám. Az $E = \frac{p^2}{2m_0} + V$ energiakifejezéséből p-re a

$$p = \sqrt{2m_0(E - V)} \tag{22.8.3}$$



66. ábra. *De Broglie*-hullámok körpálya mentén

formula adódik. Ennek segítségével (8.2)-ből nyerjük, hogy

$$\oint p dq = nh, \tag{22.8.4}$$

vagyis megkaptuk a *Bohr*-féle kvantumfeltételt.

Még egyszer hangsúlyozzuk, hogy a fenti meggondolások csak elegendően nagyméretű zárt pályákra érvényesek. Más esetekben a hullámmechanika alapján kapott eredmények különbözhetnek a *Bohr*-elmélet eredményeitől, szó sincs tehát arról, hogy a két elmélet egymással egyenértékű volna. Ahol a két elmélet eredményei eltérnek egymástól, ott a tapasztalat mindig a hullámmechanika javára dönt.

A lineáris differenciálegyenletek elméletéből következik, hogy a Ψ-re vonatkozó határfeltétel, valamint az a követelmény, hogy Ψ egyértelmű és folytonos függvénye legyen a helynek, csak bizonyos E paraméterértékek mellett lehetséges. Tehát az E energiaparaméter nem vehet fel tetszőleges értékeket. Azokat az E értékeket, amelyekkel a *Schrödinger*-egyenlet az előbb említett feltételek mellett megoldható, nevezzük az egyenlet sajátértékeinek. Legyenek ezek pl.

$$E_1, E_2, \ldots, E_i, \ldots$$

Az egyes sajátértékeknek megfelelő megoldásokat, amelyeket a következőképpen jelölünk:

$$\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_i, \ldots,$$

nevezzük az egyenlet sajátfüggvényeinek. Bennünket elsősorban a sajátértékek fognak érdekelni, tehát ezek meghatározása lesz a fő cél. A sajátfüggvények meghatározása csak másodsorban érdekel bennünket. A hullámmechanika módszereit és a *Schrödinger*-egyenlet megoldását a legjobban egyes speciális esetekben ismerhetjük meg, amelyekkel rövidesen foglalkozni fogunk. A következőkben még néhány általános természetű kérdésre kell rátérnünk.

Először is a Ψ függvény fizikai jelentésével kell közelebbről megismerkednünk. SCHRÖDINGER eredetileg a Ψ függvényt a következőképpen értelmezte. Feltételezte, hogy az atom kötelékéhez tartozó elektron nem egy elektromosan töltött, meghatározott tömeggel bíró tömegpont, hanem tömege és töltése az atomban folytonosan van elosztva, mintegy elkenve, éspedig ennek az elkent elektronnak töltéssűrűsége $\Psi\Psi^*$-gal arányos. A Ψ függvénynek ezt a SCHRÖDINGERtől származó értelmezését azonban módosítani kellett. Ugyanis, ha egy többelektronproblémára térünk át, midőn a Ψ függvény $3N$ koordinátától függ, ahol N az elektronok száma, akkor Ψ nem interpretálható a közöséges térben. Vagyis Ψ nem adható meg a közönséges 3-dimenziós térben, mint a hely függvénye, hanem ekkor Ψ a $3N$-dimenziós koordináta-térben, az ún. konfigurációs térben, a hely függvénye. Tehát a Ψ-függvény *Schrödinger*-féle értelmezése nem tartható fenn. Ma a Ψ-függvényt M. BORN szerint statisztikailag értelmezzük. Eszerint $\Psi\Psi^* dv$ adja annak valószínűségét, hogy az elektron a dv térfogatelemben jelen van. Több elektron esetében dv alatt a konfigurációs tér térfogatelemét kell érteni és akkor az előbbi kifejezés annak valószínűségét adja, hogy az elektronok a dv konfigurációs térfogatelemben jelen vannak. A lényeges különbség SCHRÖDINGER felfogásával szemben az, hogy itt az elektront továbbra is elektromosan töltött tömegpontnak tekintjük. Mivel az atomokra nyert tapasztalati eredmények mindig sok atomra vonatkozó megfigyelés középértékei gyanánt adódnak, vagy pedig hosszabb időn át végzett megfigyelések eredményei, sok esetben, különösen, midőn az atomokhoz kötött elektronokról van szó, annak ellenére, hogy Ψ-t statisztikailag értelmezzük, beszélhetünk az elektron vagy az elektronok töltéssűrűségéről, amelyen térbeli középértéket, vagy hosszabb (az atomi időmérték szerint hosszabb, ami a valóságban igen rövid időt jelent) időre vonatkozó átlagértéket értünk.

Ezek után foglalkozzunk a k-adik kvantumállapotban levő rendszer, pl. egy atomhoz kötött elektron sajátfüggvényével. A rendszer, jelen esetben az elektron energiája ebben az állapotban legyen E_k, sajátfüggvénye pedig

$$\Psi_k = e^{-\frac{2\pi i}{h} E_k t} \psi_k(x, y, z). \tag{22.8.5}$$

Mint látható, fennáll, hogy

$$\Psi_k \Psi_k^* = \psi_k \psi_k^*. \tag{22.8.6}$$

A ψ_k függvények egy tetszőleges faktort tartalmaznak. A *Schrödinger*-féle egyenlet ugyanis homogén, aminek következtében a megoldások egy tetszőleges állandót artalmazhatnak tényező gyanánt. Ezt az állandót mindig úgy választhatjuk meg,

hogy fennálljon a következő egyenlet:

$$\int \psi_k \psi_k^* dv = 1\,, \tag{22.8.7}$$

ahol az integrációt az egész térre kell kiterjeszteni. Ha a ψ_k (ill. Ψ_k) sajátfüggvények ennek a követelménynek eleget tesznek, akkor azt mondjuk, hogy a ψ_k (ill. a Ψ_k) függvények 1-re vannak normálva. Ennek fizikai értelme a következő: $\psi_k \psi_k^* dv$ adja annak a valószínűségét, hogy egy k-adik kvantumállapotban levő elektron a dv térfogatelemben jelen van. Mivel pedig az elektron az egész térben valahol biztosan jelen van, ennek valószínűsége pedig 1, szükséges, hogy fennálljon a fenti összefüggés.

Ezek után bebizonyítjuk a következő fontos összefüggést: ha a k-adik és l-edik sajátértékek egymástól különböznek, akkor a megfelelő sajátfüggvényekre fennáll, hogy

$$\int \psi_k \psi_l^* dv = 0,$$

ahol az integrációt az egész térre kell kiterjeszteni. Ez az összefüggés azt fejezi ki, hogy a különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvények egymásra ortogonálisak.

Ez a tétel a következőképpen bizonyítható be. ψ_k és ψ_l a *Schrödinger*-egyenlet egy-egy megoldása, tehát fennáll, hogy

$$\Delta\psi_k + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E_k - V)\psi_k = 0 \tag{22.8.9}$$

és

$$\Delta\psi_l^* + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E_l - V)\psi_l^* = 0\,. \tag{22.8.10}$$

Ha az első egyenletet ψ_l^*-gal, a másodikat ψ_k-val szorozzuk és az így nyert utóbbi egyenletből az elsőt kivonjuk, nyerjük, hogy

$$\psi_k \Delta\psi_l^* - \psi_l^* \Delta\psi_k = \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E_k - E_l)\psi_k \psi_l^*\,. \tag{22.8.11}$$

Szorozzuk meg ezt az egyenletet dv-vel és integráljunk az egész térre. Ekkor a baloldalra alkalmazhatjuk a *Green*-féle tételt, amely szerint

$$\int (\psi_k \Delta\psi_l^* - \psi_l^* \Delta\psi_k)\, dv = \int \left(\psi_k \frac{\partial \psi_l^*}{\partial n} - \psi_l^* \frac{\partial \psi_k}{\partial n}\right) df\,. \tag{22.8.12}$$

A jobboldali kifejezés egy felületi integrál, amelyet arra a felületre kell kiterjeszteni, amely azt a térfogatot határolja, melyre a baloldali térfogati integrált kiterjesztettük. A jobboldali integrandusban az n szerinti differenciálás a felületnek kifelé mutató normálisa szerinti differenciálást jelenti. Mivel, mint a speciális problémák tárgyalásánál látni fogjuk, ψ a ∞-ben exponenciálisan eltűnik, ezért ha a baloldali integrált az egész térre és ennek megfelelően a jobboldalit a végtelen távoli felületre terjesztjük ki, a jobboldali integrál eltűnik, vagyis fennáll,

hogy

$$\int (\psi_k \Delta\psi_l^* - \psi_l^* \Delta\psi_k) dv = 0 \tag{22.8.13}$$

ha az integrációt az egész térre kiterjesztjük. Ebből pedig (8.11) alapján következik, mivel $E_k \neq E_l$, hogy

$$\int \psi_k \psi_l^* dv = 0. \tag{22.8.14}$$

Ezzel az ortogonalitási relációt bebizonyítottuk.

A *Schrödinger*-egyenlet megoldására vonatkozóan megemlítjük még a következőt. Mivel az egyenlet homogén lineáris, következik, hogy ha $\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_n$ megoldások, akkor megoldás a következő kifejezés is

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \ldots + c_n\Psi_n, \tag{22.8.15}$$

ahol a c_i koefficiensek állandók. A koefficiensek fizikai jelentése nyilván az, hogy $|c_i|^2$ adja annak valószínűségét, hogy a rendszer, pl. egy atom kötelékébe tartozó elektron az i-edik kvantumállapotban van. A c_i koefficiensekre kikötjük, hogy

$$\sum_i |c_i|^2 = 1 \tag{22.8.16}$$

legyen, amit természetesen mindig el lehet érni. Ha az elektron pl. a k-adik állapotban van, akkor az összes c_i, kivéve c_k-t, nullával egyenlő, c_k pedig 1. Ekkor tehát

$$\Psi_k = e^{-\frac{2\pi i}{h} E_k t} \psi_k,$$

ami azt jelenti, hogy egy állandó E_k energiájú állapot, egy ún. stacionárius állapot áll fenn.

9. §. A klasszikus mechanika mennyiségeinek kvantummechanikai értelmezése. Operátorok

A következőkben először is azzal kell foglalkoznunk, hogy a klasszikus mechanika egyes mennyiségeinek, mint például a koordinátáknak, az impulzusnak stb. a kvantummechanikában mi felel meg. Célszerű lesz egy konkrét esetet szem előtt tartani. Foglalkozzunk ismét egy atomhoz kötött elektronnal, amelynek megfelelő sajátfüggvénye legyen Ψ, melyről feltesszük, hogy 1-re normált. Tehát $\Psi\Psi^* dv$ adja annak valószínűségét, hogy az elektron dv-ben jelen van. Foglalkozzunk először is egy koordinátával, melynek a klasszikus mechanikában például a q felel meg. A kvantummechanika szerint egy atom egyik elektronjának q koordinátáját úgy határozhatnánk meg mérések útján, hogy az atom elektronjának q koordinátáját igen sok esetben megmérjük (amidőn gondoskodni kell arról, hogy minden mérés után a rendszert, vagyis az elektront visszavigyük eredeti kvantumállapotába) és ezeknek a mérési eredményeknek, melyek egymástól különbözni fognak, a középértékét képezzük. Ennek megfelelően tehát a q koordináta mérésekor várható eredményt a kvantummechanikában úgy kapjuk, hogy q-nak $\Psi\Psi^*$ való-

színűségi eloszlással képezzük a középértékét, tehát

$$\bar{q} = \int q\Psi\Psi^* dv = \int \Psi^* q \Psi dv. \tag{22.9.1}$$

$\bar{q}$, vagyis q kvantummechanikai középértéke tehát az a $\bar{q}$-érték, amelyet mérések útján azok középértéke gyanánt q-ra nyerhetünk vagy várhatunk (Erwartungswert). Ezt röviden q kvantummechanikai értékének nevezhetjük.

Hogy az impulzus, ill. az impulzuskomponensek kvantummechanikai középértékét megállapíthassuk, vezessük le az áram kvantummechanikai kifejezését. Évégből induljunk ki az időtől függő *Schrödinger*-egyenletből, mely, ha pl. egy m_0 tömegű korpuszkulára szorítkozunk, a következő

$$\Delta\Psi - \frac{8\pi m_0}{h^2} V\Psi + \frac{4\pi i m_0}{h} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0. \tag{22.9.2}$$

Természetesen fennáll ennek az egyenletnek konjugált komplexe is

$$\Delta\Psi^* - \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} V\Psi^* - \frac{4\pi i m_0}{h} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = 0. \tag{22.9.3}$$

Szorozzuk meg az első egyenletet Ψ^*-gal, a másodikat Ψ-vel és vonjuk ki az így nyert második egyenletet az elsőből. Ekkor nyerjük, hogy

$$-\frac{4\pi i m_0}{h}\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\right) = -\frac{4\pi i m_0}{h} \frac{\partial(\Psi\Psi^*)}{\partial t} = \Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*. \tag{22.9.4}$$

Mivel pedig fennáll, hogy

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\right) = \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}$$

és hasonló egyenletek állnak fenn y-ra és z-re, következik, hogy

$$\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^* = \operatorname{div}(\Psi^* \operatorname{grad} \Psi - \Psi \operatorname{grad} \Psi^*). \tag{22.9.5}$$

Tehát

$$-\frac{\partial(\Psi^*\Psi)}{\partial t} = \frac{h}{4\pi i m_0} \operatorname{div}(\Psi^* \operatorname{grad} \Psi - \Psi \operatorname{grad} \Psi^*). \tag{22.9.6}$$

Szorozzuk meg ezt az egyenletet e-vel, a korpuszkula töltésével, akkor

$$-\frac{\partial(\Psi\Psi^* e)}{\partial t} = \frac{he}{4\pi i m_0} \operatorname{div}(\Psi^* \operatorname{grad} \Psi - \Psi \operatorname{grad} \Psi^*). \tag{22.9.7}$$

Hasonlítsuk össze ezt az egyenletet az elektrodinamikának a kontinuitási egyenletével, mely szerint

$$-\frac{\partial \rho}{\partial t} = \operatorname{div} \mathbf{i}, \tag{22.9.8}$$

ahol ρ a töltéssűrűség, **i** pedig az áramsűrűség. Ez az egyenlet a hidrodinamikai egyenlet analogonja, és azt fejezi ki, hogy az elektromos töltés a térfogategységre vonatkoztatva csak úgy fogyhat, ha onnan eláramlik. Általában ez az egyenlet az elektromosság megmaradásának tételét fejezi ki. Az összehasonlítás alapján átjuk, hogy az áramsűrűséget a kvantummechanikában a következő kifejezéssel kell definiálni

$$\mathbf{i} = \frac{he}{4\pi i m_0}(\Psi^* \operatorname{grad}\Psi - \Psi \operatorname{grad}\Psi^*). \tag{22.9.9}$$

$\mathbf{s} = \frac{h}{4\pi i m_0}(\Psi^* \operatorname{grad}\Psi - \Psi \operatorname{grad}\Psi^*)$ tehát annak a valószínűsége, hogy a részecske egy az **s**-re merőleges felületegységen az időegység alatt áthalad. Innen következik, hogy az áramerősség, **I** kvantummechanikai kifejezése a következő

$$\mathbf{I} = e\mathbf{v} = \frac{he}{4\pi i m_0}\int(\Psi^* \operatorname{grad}\Psi - \Psi \operatorname{grad}\Psi^*)dv. \tag{22.9.10}$$

Ennek alapján pedig a korpuszkula impulzusának kvantummechanikai értéke

$$\mathbf{p} = \frac{h}{4\pi i}\int(\Psi^* \operatorname{grad}\Psi - \Psi \operatorname{grad}\Psi^*)\,dv\,. \tag{22.9.11}$$

Parciális integrálással következik, hogy

$$\int \Psi \operatorname{grad}\Psi^* dv = -\int \Psi^* \operatorname{grad}\Psi dv. \tag{22.9.12}$$

Ezt a legegyszerűbben úgy mutathatjuk ki, hogy az egyes komponensekre igazoljuk, hogy

$$\int \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\,dv = -\int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\,dv,$$

és hasonló egyenletek állnak fenn az y és z komponensre is. Ezek helyessége közvetlenül belátható. Tehát

$$\mathbf{p} = \frac{h}{2\pi i}\int \Psi^* \operatorname{grad}\Psi\,dv\,, \tag{22.9.13}$$

vagyis

$$\bar{p}_x = \frac{h}{2\pi i}\int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\,dv, \qquad \bar{p}_y = \frac{h}{2\pi i}\int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial y}\,dv,$$

$$\bar{p}_z = \frac{h}{2\pi i}\int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial z}\,dv\,. \tag{22.9.14}$$

Az impulzus egyik komponensét, pl. a z komponensét úgy kapjuk, hogy Ψ-re alkalmazzuk a $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z}$ operátort és az így nyert függvényt, $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \Psi}{\partial z}$-t szorozzuk Ψ^*-gal és integráljuk az egész térre. Mivel itt formálisan a $\bar{p}_z$-re kapott formulát

a $\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial z}$ operátornak Ψ és Ψ^* szerinti középértékének tekinthetjük, amelyet úgy képezünk, hogy az operátort jobbról formálisan szorozzuk Ψ-vel, balról pedig Ψ^*-gal és integrálunk, azt mondhatjuk, hogy p_z-t a kvantummechanikában a $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z}$ operátor reprezentálja. Általában tehát a q_i-hez kanonikusan konjugált p_i impulzuskoordinátát a kvantummechanikában a $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_i}$ operátor reprezentálja, vagy állítja elő. Ilymódon tehát mélyebb megalapozást nyert ennek az operátornak bevezetése a *Schrödinger*-egyenlet formális levezetésénél. Megemlítjük még, hogy $\bar{p}_z$-nak a fenti integrállal adott kifejezése, vagyis p_z kvantummechanikai értéke azt a p_z értéket szolgáltatja, amelyet a Ψ-nek megfelelő kvantumállapot esetében p_z mérésekor a mérések középértéke gyanánt nyerünk.

q-nak az előbbiekben nyert kvantummechanikai értékét az impulzuskomponensek kvantummechanikai értékének analógiájára úgy értelmezhetjük, hogy Ψ-re alkalmazzuk a q-val való szorzás operátorát, az így nyert függvényt, $q\Psi$-t megszorozzuk Ψ^*-gal és integráljuk az egész térre. Így lehet mélyebb értelmet tulajdonítani a q-val való szorzás formális operációjának.

Így általában minden fizikai mennyiséghez lehet egy operátort rendelni és minden fizikai mennyiségnek megadhatjuk a kvantummechanikai középértékét.

A potenciális energiához, V-hez, mivel V a koordináták függvénye, a V-vel való szorzás operátorát rendeljük, tehát V kvantummechanikai értéke

$$\bar{V} = \int \Psi^* V \Psi dv. \tag{22.9.15}$$

A kinetikus energiához egy m_0 tömegű pont esetén, az előbbiek alapján a következő operátor tartozik

$$\frac{1}{2m_0}\left(\frac{h}{2\pi i}\operatorname{grad}\right)^2 = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\Delta. \tag{22.9.16}$$

Tehát a kinetikus energia kvantummechanikai értéke

$$\bar{T} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\int \Psi^* \Delta \Psi dv. \tag{22.9.17}$$

Mint már láttuk, az energiához rendelt ún. *Hamilton*-féle operátor általános koordináták esetén

$$H\left(q_i, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_i}\right).$$

Tehát általános koordináták esetében az energia kifejezése a kvantummechanikában

$$\bar{E} = \int \Psi^* H\left(q_i, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_i}\right)\Psi dv. \tag{22.9.18}$$

Ez a formula egy m_0 tömegpontra derékszögű koordináták esetén a következő alakú lesz

$$\bar{E} = \int \Psi^* \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0} \Delta + V \right) \Psi dv$$

$$= -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0} \int \Psi^* \Delta \Psi dv + \int \Psi^* V \Psi dv . \qquad (22.9.19)$$

Mivel, mint láttuk, $\Psi = \psi e^{-\frac{2\pi i}{h} Et}$, amiből következik, hogy

$$-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi , \qquad (22.9.20)$$

az energiához a $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}$ operátor tartozik. Ez az operátor az idő szerinti differenciálást tartalmazza, szemben a *Hamilton*-operátorral, amely csak a koordinátákat és az azok szerinti differenciálásokat tartalmazza. A fentiek alapján

$$\bar{E} = -\frac{h}{2\pi i} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dv . \qquad (22.9.21)$$

Az impulzusmomentum komponenseihez, pl. a z-komponenshez, az előbbiek alapján a következő operátort rendeljük

$$N_z \to \frac{h}{2\pi i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) . \qquad (22.9.22)$$

Az impulzusmomentum abszolút értékének négyzetéhez pedig a következő operátor tartozik

$$N^2 \to -\frac{h^2}{4\pi^2} \sum_{x,y,z} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$= -\frac{h^2}{4\pi^2} \left[\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) + \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) + \right.$$

$$\left. + \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] = -\frac{h^2}{4\pi^2} \left[(y^2 + z^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (z^2 + x^2) \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \right.$$

$$+ (x^2 + y^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} - 2zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - 2xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} -$$

$$\left. - 2x \frac{\partial}{\partial x} - 2y \frac{\partial}{\partial y} - 2z \frac{\partial}{\partial z} \right] . \qquad (22.9.23)$$

Ezeknek az operátoroknak megfelelő kvantummechanikai értékeket egészen hasonlóan képezhetjük, mint a fentieket.

Általában, ha adva van egy $L(q_i, p_i)$ függvény, akkor a hozzárendelt operátor $L\left(q_i, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_i}\right)$ és a megfelelő kvantummechanikai érték

$$\bar{L} = \int \Psi^* L\left(q_i, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_i}\right)\Psi dv. \qquad (22.9.24)$$

A kvantummechanikai értékekre általában ugyanazok az összefüggések állnak fenn, mint a klasszikus mechanika megfelelő mennyiségeire, így pl. $\bar{p}_z = m\dot{\bar{z}}$.

Az előbbiek alapján minden fizikai mennyiséghez rendelhetünk egy operátort. Láttuk, hogy a *Schrödinger*-egyenletet úgy kapjuk, hogy a *Hamilton*-operátort alkalmazzuk egy Ψ függvényre és az így nyert kifejezést egyenlővé tesszük $E\Psi$-vel, vagyis Ψ-nek egy sokszorosával. Az egyenlet E lehetséges értékeit szolgáltatja. A H operátort egy tetszőleges függvényre alkalmazva egy más függvényt nyerünk, amely általában nem lesz az eredetinek sokszorosa. A *Schrödinger*-egyenlet megoldásai éppen azok a függvények, amelyekre a *Hamilton*-operátort alkalmazva azok átmennek az eredeti függvény E-szeresébe. A szorzótényezők az operátor, ill. az egyenlet sajátértékei, a megfelelő függvények pedig a sajátfüggvények. Az operátor sajátértékei az operátornak megfelelő fizikai mennyiségek, jelen esetben az energia lehetséges értékei. Mivel minden fizikai mennyiséghez rendelünk egy operátort, mindez általánosítható. Az operátorok sajátfüggvényei azok a függvények, amelyekre az operátort alkalmazva azok átmennek egy λ-szorosba. A λ-k az operátor sajátértékei, melyek az operátornak megfelelő fizikai mennyiség lehetséges értékeit szolgáltatják.

Így pl. a q koordinátához a q-val való szorzás operátorát rendeltük; a sajátérték maga q

$$q\phi = q\phi.$$

Mint látható, q minden értéket felvehet. A sajátfüggvények, ϕ-k, szintén tetszőlegesek.

Az impulzus x-komponensének sajátfüggvényeit és sajátértékeit, amelyeket itt α-val jelölünk, a következő egyenletből lehet meghatározni

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \chi}{\partial x} = \alpha\chi,$$

amelynek megoldása $\chi = \chi_0 e^{\frac{2\pi i}{h}p_x x}$, ahol χ_0 tetszőleges függvénye y-nak és z-nek. A sajátértékekre p_x-et nyerjük.

Mindez a kvantummechanika alapelveinek kifejezésénél és a kvantummechanika mélyebb megalapozásánál alapvető fontosságú.

10. §. Az elektronspin kvantumelmélete

Az előző szakaszban megismerkedtünk azokkal a törvényekkel, melyek segítségével a klasszikus mechanikai mennyiségeknek megfelelő kvantummechanikai operátorok megszerkeszthetők. A mikrofizikában találkozunk azonban olyan

mennyiségekkel is, melyeknek nincs a klasszikus mechanikában megfelelőjük. Ilyen pl. az elektronspin. Az ilyen mennyiségek operátorait nem lehet egy általános elv alapján megadni, hanem próbálkozással olyan operátort kell keresni, melynek következményei a tapasztalattal egyeznek.

Az elektronspinnel kapcsolatos tapasztalati tényeket az előzőekben már megismertük. Ezek szerint az elektron S spinjének vetülete bármelyik tériránra csak a $+\frac{h}{4\pi}$ és $-\frac{h}{4\pi}$ értékeket veheti fel. A spinnel kapcsolatos mágneses nyomaték pedig $-\frac{e}{m_0 c}$ S-sel egyenlő, ennek egy tetszőlegesen megadott tériránytú vetülete tehát $-\frac{eh}{4\pi m_0 c}$ és $+\frac{eh}{4\pi m_0 c}$ lehet. Szokásos az elektron spinállapotát a koordinátarendszer z-tengelyére vonatkoztatni és a spinállapot leírására egy s spinkoordinátát bevezetni. Az s koordináta csak az $s = \pm 1$ értékeket veheti fel, amelyek a z-tengely irányába mért spinvetület $\pm\frac{h}{4\pi}$ értékeinek felelnek meg. Az elektron Ψ hullámfüggvénye, ha a spinnel kapcsolatos jelenségek leírására is igényt tartunk, az x, y, z derékszögű térkoordináták mellett még az s spinkoordinátának is függvénye kell, hogy legyen,

$$\Psi = \Psi(x, y, z, s, t). \tag{22.10.1}$$

A Ψ hullámfüggvénynek az s spinkoordinátától való függését megadhatjuk például a következő kis táblázattal:

$$\begin{array}{lll} s = & +1 & -1 \\ \Psi(x, y, z, s, t) = & \Psi_+(x, y, z, t) & \Psi_-(x, y, z, t) \end{array}$$

Ψ_+ és Ψ_- már csak a térkoordináták és az idő függvényei. A (10.1) hullámfüggvényt tehát a Ψ_+, Ψ_- függvénypárral egyértelműen jellemezhetjük. Szokás ezt a függvénypárt egy 1×2-es méretű mátrix alakjában felírni:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_+(x, y, z, t) \\ \Psi_-(x, y, z, t) \end{pmatrix}. \tag{22.10.2}$$

Az ilymódon megadott hullámfüggvényt (*Pauli*-féle) *spinor*nak nevezzük. Ψ_+ és Ψ_- a spinor komponensei. Fontos megjegyezni, hogy bármely spinor felírható két speciális spinornak, nevezetesen a

$$\chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{22.10.3}$$

spinorok lineáris kombinációjaként. A (10.2) hullámfüggvénynek ezen spinorok szerint kifejtett alakja

$$\Psi = \Psi_+(x, y, z, t)\chi_{+\frac{1}{2}} + \Psi_-(x, y, z, t)\chi_{-\frac{1}{2}}. \tag{22.10.4}$$

A Ψ hullámfüggvény spinfüggésének leírására három módot ismertünk meg: a (10.1), a (10.2) és a (10.4) kifejezéseket. E három módszer egymással teljesen egyenértékű és konkrét problémák vizsgálatakor mindig a legcélszerűbbet választhatjuk.

Most foglalkozzunk a Ψ hullámfüggvényre ható kvantummechanikai operátorokkal. Induljunk ki a hullámfüggvény (10.2) spinor alakjából. A legáltalánosabb lineáris operátor, mellyel egy kétkomponensű spinorból egy másikat képezhetünk, a 2×2 méretű mátrix. A kvantummechanikai operátorok is ilyen mátrixok alakjában írhatók fel. Az

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \tag{22.10.5}$$

operátor hatását a (10.2) hullámfüggvényre a mátrixszorzás szabálya adja meg:

$$A\Psi = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}\Psi_+ + A_{12}\Psi_- \\ A_{21}\Psi_+ + A_{22}\Psi_- \end{pmatrix}. \tag{22.10.6}$$

Itt az A_{11}, A_{12}, A_{21} és A_{22} komponensek már csak a térbeli koordinátákra ható operátorok.

Vezessük be, PAULI nyomán, a következő mátrixokat:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{22.10.7}$$

Minden 2×2 méretű mátrix előállítható az

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

egységmátrix, valamint a *Pauli*-mátrixok lineáris kombinációjaként

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = A_0 1 + A_x\sigma_x + A_y\sigma_y + A_z\sigma_z, \tag{22.10.8}$$

ahol

$$\begin{aligned} A_0 &= \frac{1}{2}(A_{11} + A_{22}), \\ A_x &= \frac{1}{2}(A_{12} + A_{21}), \\ A_y &= \frac{i}{2}(A_{12} - A_{21}), \\ A_z &= \frac{1}{2}(A_{11} - A_{22}). \end{aligned} \tag{22.10.9}$$

Ha a három *Pauli*-mátrixot egy vektor-operátor három derékszögű komponensének tekintjük,

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z), \tag{22.10.10}$$

továbbá a (10.9) alatti A_x, A_y, A_z komponensekből is képezünk egy **A** vektort, akkor a (10.8) kifejezést tömören a következő alakban írhatjuk fel

$$A = A_0 + \mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}. \tag{22.10.11}$$

Az A operátornak ez vagy az ezzel egyenértékű (10.8) előállítása különösen akkor célszerű, ha a Ψ-nek (10.4) alakjával dolgozunk. Ugyanis $A\Psi$ képzésekor csak a *Pauli*-mátrixok és a $\chi_{m_s}\left(m_s = \pm\frac{1}{2}\right)$ alap-spinorok szorzatával találkozunk. Ezeket pedig a (10.7) és (10.3) definíciók alapján könnyen kiszámíthatjuk; az eredményt az alábbi táblázatban állítottuk össze:

A *Pauli*-mátrixok hatása az alapspinorokra

	$\chi_{-\frac{1}{2}}$	$\chi_{+\frac{1}{2}}$
σ_x	$\chi_{-\frac{1}{2}}$	$\chi_{+\frac{1}{2}}$
σ_y	$i\chi_{-\frac{1}{2}}$	$-i\chi_{+\frac{1}{2}}$
σ_z	$\chi_{+\frac{1}{2}}$	$-\chi_{-\frac{1}{2}}$

Az eddigiekben az elektronspin kvantumelméletének matematikai keretével ismerkedtünk meg. Ahhoz, hogy ezt a keretet fizikai tartalommal töltsük meg, meg kell határoznunk, hogy a spinváltozóval kapcsolatos fizikai mennyiségeknek milyen konkrét operátorok felelnek meg. Elsősorban az **S** spinnek, az elektron saját impulzusmomentumának operátorára vagyunk kíváncsiak. Be fogjuk bizonyítani, hogy a spinnel kapcsolatos összes fizikai követelménynek a következő operátor felel meg

$$\mathbf{S} = \frac{h}{4\pi}\boldsymbol{\sigma}. \tag{22.10.12}$$

A táblázat utolsó sora mutatja, hogy

$$S_z\chi_{+\frac{1}{2}} = +\frac{h}{4\pi}\chi_{+\frac{1}{2}} \quad \text{és} \quad S_z\chi_{-\frac{1}{2}} = -\frac{h}{4\pi}\chi_{-\frac{1}{2}}. \tag{22.10.13}$$

A χ_{m_s} alap-spinorok tehát sajátfüggvényei a spin komponensének, mert ha S_z-t χ_{m_s}-re alkalmazzuk, az átmegy χ_{m_s}-nek egy számszerű sokszorosába. A megfelelő sajátértékek $\pm\frac{h}{4\pi}$. Ez egyrészt megfelel annak a tapasztalati ténynek, hogy a spinvetület bármely tériránya csak $\pm\frac{h}{4\pi}$ lehet, másrészt mutatja, hogy a $\chi_{+\frac{1}{2}}$ spinor a $+z$-tengely, a $\chi_{-\frac{1}{2}}$ spinor pedig a $-z$-tengely irányába mutató spint írja le.

Most állapítsuk meg a spin vetületét egy tetszőleges tériránya. Egy általános tériránt a ϑ és ϕ térbeli polárszögek jellemeznek, a tériránba mutató egységvektor derékszögű komponensei

$$n_x = \sin\vartheta\cos\phi,$$

$$n_y = \sin\vartheta\cos\phi,$$

$$n_z = \cos\vartheta.$$

Az **S** spinnek az **n**-nel jellemzett tériránba eső vetülete

$$S_n = \mathbf{nS} = \frac{h}{4\pi}(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z). \tag{22.10.14}$$

Határozzuk meg az S_n operátor sajátértékeit és sajátfüggvényeit! Ehhez első lépésként vizsgáljuk meg S_n hatását a χ_{m_s} alap-spinorokra. A táblázatban összefoglalt szabályok felhasználásával kapjuk

$$\begin{aligned} S_n\chi_{+\frac{1}{2}} &= \frac{h}{4\pi}(\cos\vartheta\chi_{+\frac{1}{2}} + \sin\vartheta e^{i\phi}\,\chi_{-\frac{1}{2}}), \\ S_n\chi_{-\frac{1}{2}} &= \frac{h}{4\pi}(\sin\vartheta e^{-i\phi}\chi_{+\frac{1}{2}} - \cos\vartheta\chi_{-\frac{1}{2}}). \end{aligned} \tag{22.10.15}$$

Az S_n spinvetület sajátértékegyenlete

$$S_n\chi = \lambda\chi, \tag{22.10.16}$$

ahol λ a sajátérték és χ a sajátfüggvény. χ-t az alapspinorok szerint kifejtett alakban vehetjük fel: $\chi = a\chi_{+\frac{1}{2}} + b\chi_{-\frac{1}{2}}$. Ezt beirva a sajátértékegyenletbe és felhasználva a (10.15) szabályokat, a következő egyenlethez jutunk

$$\frac{h}{4\pi}[(a\cos\vartheta + b\sin\vartheta e^{-i\phi})\chi_{+\frac{1}{2}} + (a\sin\vartheta e^{i\phi} - b\cos\vartheta)\chi_{-\frac{1}{2}}] = \lambda[a\chi_{+\frac{1}{2}} + b\chi_{-\frac{1}{2}}].$$

Ez az egyenlet csak úgy állhat fenn, ha mind $\chi_{+\frac{1}{2}}$, mind pedig $\chi_{-\frac{1}{2}}$ együtthatója a jobb és baloldalon ugyanaz. $\chi_{+\frac{1}{2}}$ együtthatóinak összehasonlításából

$$\left(\frac{h}{4\pi}\cos\vartheta - \lambda\right)a + \frac{h}{4\pi}\sin\vartheta e^{-i\phi}b = 0, \tag{22.10.17}$$

$\chi_{-\frac{1}{2}}$ együtthatóinak egyenlőségéből pedig

$$\frac{h}{4\pi}\sin\vartheta e^{i\phi}a - \left(\frac{h}{4\pi}\cos\vartheta + \lambda\right)b = 0. \tag{22.10.18}$$

Ez a két egyenlet egy elsőfokú homogén egyenletrendszer az a, b ismeretlenekre. Triviálistól különböző megoldás csak akkor van, ha az egyenletrendszer determi-

nánsa zérussal egyenlő

$$D \equiv -\left(\frac{h^2}{16\pi^2}\cos^2\vartheta - \lambda^2\right) - \frac{h^2}{16\pi^2}\sin^2\vartheta = 0\,.$$

Ebből $\lambda^2 = h^2/16\pi^2$, vagyis a két sajátérték $\lambda = \pm h/4\pi$ lesz. A (10.12) spinoperátor megfelel tehát annak az alapvető tapasztalati ténynek, hogy a spinnek egy tetszőlegesen megadott irányra vonatkozó vetülete csak a $+h/4\pi$ és $-h/4\pi$ értékeket veheti fel. A (10.17) és (10.18) egyenleteket az a, b ismeretlenekre megoldva az S_n spinvetület sajátfüggvényeit is megkapjuk. A $\lambda = +h/4\pi$ sajátérték esetében a sajátfüggvény

$$\chi_\uparrow = \cos\frac{\vartheta}{2}\chi_{+\frac{1}{2}} + \sin\frac{\vartheta}{2}e^{i\phi}\chi_{-\frac{1}{2}} \tag{22.10.19}$$

lesz, míg $\lambda = -\dfrac{h}{4\pi}$ esetben

$$\chi_\downarrow = -\sin\frac{\vartheta}{2}e^{-i\phi}\chi_{+\frac{1}{2}} + \cos\frac{\vartheta}{2}\chi_{-\frac{1}{2}}\,. \tag{22.10.20}$$

A következő táblázatban az S_x, S_y és S_z spinvetületek sajátfüggvényeit állítottuk össze.

A spinkomponensek sajátfüggvényei

Irány	ϑ	ϕ	$\chi_\uparrow$	$\chi_\downarrow$
x	$\frac{\pi}{2}$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+\frac{1}{2}} + \chi_{-\frac{1}{2}})$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}(\chi_{+\frac{1}{2}} - \chi_{-\frac{1}{2}})$
y	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+\frac{1}{2}} + i\chi_{-\frac{1}{2}})$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(i\chi_{+\frac{1}{2}} + \chi_{-\frac{1}{2}})$
z	0	—	$\chi_{+\frac{1}{2}}$	$\chi_{-\frac{1}{2}}$

Eredményeink szerint a különböző térirányokra vonatkozó spinvetületek sajátfüggvényei egymástól különbözőek lesznek. Ez megfelel annak, hogy két különböző irányba eső spinvetület egyidejűleg sohasem mérhető meg.

Foglalkoznunk kell még az S spinmomentum négyzetével, az S^2 operátorral. Akár az első táblázatból, akár a (10.7) mátrix alakokból könnyen megállapíthatjuk, hogy a *Pauli*-mátrixok négyzetei mind 1-gyel egyenlőek:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1. \tag{22.10.21}$$

A spinoperátor négyzete eszerint

$$S^2 = \frac{h^2}{16\pi^2}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3h^2}{16\pi^2}\,. \tag{22.10.22}$$

A (10.12) spinoperátor tehát egy olyan impulzusmomentumot ír le, melynek abszolút értéke $S = \frac{\sqrt{3}h}{4\pi}$, egy univerzális állandó. Az elektron spinjének abszolút értéke semmilyen körülmények között nem változhat meg.

Végül felírjuk a spinnel kapcsolatos mágneses momentum operátorát. Már említettük, hogy ez a mágneses momentum $-\frac{e}{m_0 c}$ S-sel egyenlő, tehát

$$\mu_s = -\frac{e}{m_0 c}\mathbf{S} = -\frac{eh}{4\pi m_0 c}\boldsymbol{\sigma}. \qquad (22.10.23)$$

Ezen mágneses momentum vetülete az **n** tériányra $-\frac{e}{m_0 c} S_n$ lesz, a vetület sajátértékei tehát $\pm \frac{eh}{4\pi m_0 c}$ lesznek, ami teljesen megfelel a mért értékeknek.

11. §. A korrespondencia-elv. Átmeneti valószínűségek

Mint tudjuk, már a *Bohr*-féle elmélet alapján ki lehetett számítani a H-atom energianívóit, az energianívókból pedig a *Bohr*-féle frekvenciafeltételből az

$$E_i - E_k = h\nu_{ik} \qquad (22.11.1)$$

egyenlet alapján meg lehetett határozni a spektrumvonalak frekvenciáit. A spektrumvonalak intenzitásáról, vagyis az $E_i \to E_k$ átmenetek valószínűségéről azonban az elmélet közvetlenül nem tudott felvilágosítást adni. Ezt a nagy hiányt pótolta a *Bohr*-féle korrespondencia-elv. Ezt az elvet nem lehetett elméletileg pontosan megalapozni, de az eredmények, amelyek belőle következnek, a tapasztalattal jól megegyeznek. Az elv szerint az *i*-edik kvantumállapotból történő átmeneteknek megfelelő spektrumvonalak intenzitását annak a sugárzásnak intenzitásából lehet meghatározni, amelyet az elektron az *i*-edik kvantumállapotnak megfelelő pályán a klasszikus *Maxwell*-elmélet szerint emittálna és amelynek frekvenciáján kívül az intenzitása is pontosan definiálva van. Ez a *Bohr*-elméletben részleteiben a következőképpen történik. Legyen az *i*-edik kvantumpályán az elektron keringési frekvenciája ν. Az elektron koordinátái, x, y és z periodikus függvényei lévén az időnek, FOURIER szerint tiszta harmonikus rezgések szuperpozíciója gyanánt állíthatók elő, amelyek frekvenciája ν egész számú sokszorosa. Így például

$$x = \sum_{n=0}^{\infty} x_n \cos(2\pi n\nu t + \alpha_n), \qquad (22.11.2)$$

ahol az α_n-ek fázisállandók, az x_n-ek amplitúdók, amelyeket a *Fourier*-elmélet alapján lehet meghatározni. Minden egyes harmonikus rezgés egy lineáris harmonikus oszcillátornak felel meg, így pl. az n-edik harmonikus rezgés egy olyan lineáris harmonikus oszcillátorral, vagyis rezgő dipólussal ekvivalens, amelynek

megfelelő elektromos momentum abszolút értéke

$$ex_n \cos(2\pi n\nu t + \alpha_n). \tag{22.11.3}$$

Egy ilyen oszcillátor a *Maxwell*-elmélet szerint $n\nu$ frekvenciájú rezgést bocsát ki és az általa 1s alatt emittált energia

$$\frac{16\pi^4 e^2}{3c^3} \nu_n^4 x_n^2,$$

ahol $\nu_n = n\nu$ és c a fénysebesség. Figyelembe véve, hogy y és z hasonlóképpen, mint x, szintén harmonikus rezgések szuperpozíciója gyanánt állíthatók elő, amelyek szintén oszcillátorokkal ekvivalensek, nyerjük, hogy az 1s alatt emittált ν_n frekvenciájú sugárzás teljes energiája a következő:

$$\frac{16\pi^4 e^2}{3c^3} \nu_n^4 (x_n^2 + y_n^2 + z_n^2). \tag{22.11.4}$$

y_n és z_n jelentése teljesen hasonló x_n-hez. A korrespondencia-elv a következőket mondja ki: ha a (11.4) kifejezésben a ν_n-et a kvantumelméleti $\nu_{i,i-n} = \dfrac{E_i - E_{i-n}}{h}$ frekvenciával helyettesítjük, akkor a nyert kifejezés közelítőleg mértéket szolgáltat annak a fénynek az intenzitására, amely az i-edik kvantumállapotból az $(i - n)$-edik kvantumállapotba való spontán átmenetnél keletkezik.

Jóllehet ez az elv az egyes vonalak relatív intenzitására csak durva értékeket szolgáltatott, az elvből pontos, ún. kiválasztási szabályokat lehetett levezetni, amelyek pontosan számot adtak a spektrumnak egyes hiányzó vonalairól, vagyis a tiltott átmenetekről. Tehát nyilvánvaló volt, hogy a korrespondencia-elv lényegében helyes, annak ellenére, hogy az elv elméleti megalapozása egyáltalán nem volt kielégítő.

Ezek után térjünk át arra, hogy a korrespondencia-elvet hogyan lehet átvinni a hullámmechanikába, ill. hogy a korrespondencia-elvet hogyan lehet a hullámmechanikában elméletileg konzekvens módon megfogalmazni. Évégből induljunk ki az atomnak, pl. a H-atomnak egy Ψ állapotából amely általánosságban a következő

$$\Psi = \sum_i c_i \psi_i e^{-\frac{2\pi i}{h} E_i t}. \tag{22.11.5}$$

Az elektron klasszikus elmélet szerinti x koordinátájának, vagyis a (11.2) egyenletben x-nek most nyilván x kvantummechanikai középértéke, vagyis röviden x kvantummechanikai értéke, $\bar{x}$ felel meg, amely a következő:

$$\bar{x} = \int \Psi x \Psi^* dv = \int x \sum_i c_i \psi_i e^{-\frac{2\pi i}{h} E_i t} \sum_k c_k^* \psi_k^* e^{\frac{2\pi i}{h} E_k t} \, dv$$

$$= \sum_{i,k} c_i c_k^* e^{-\frac{2\pi i}{h}(E_i - E_k)t} \int \psi_k^* x \psi_i dv. \tag{22.11.6}$$

Vezessük be a következő jelölést

$$\int \psi_k^* x \psi_i dv = x_{ki},$$

akkor nyerjük, hogy

$$\bar{x} = \sum_{i,k} c_i c_k^* x_{ki} e^{-\frac{2\pi i}{h}(E_i - E_k)t}. \tag{22.11.7}$$

Az x_{ki} definíciójából következik, hogy

$$x_{ki} = x_{ik}^*.$$

Mivel továbbá $c_i c_k^*$ konjugáltja $c_i^* c_k$, az *ik* és a *ki* indexű tagokat összefoglalhatjuk és nyerjük, hogy

$$x = \sum_{i,k} | c_i c_k^* | 2 | x_{ki} | \cos(2\pi \nu_{ik} t + \alpha_{ik}), \tag{22.11.8}$$

ahol α_{ik} a $c_i c_k^*$ és az x_{ki} komplex számok argumentumának összege, ν_{ik} pedig a következőképpen van definiálva:

$$\nu_{ik} = \frac{E_i - E_k}{h}.$$

Természetesen y-ra és z-re egészen hasonló formulák érvényesek.

A hullámmechanikában tehát nem x, y, z, hanem $\bar{x}$-, $\bar{y}$-, $\bar{z}$-t lehet harmonikus rezgések szuperpozíciója gyanánt előállítani. Az egyes frekvenciák azonban nem egy meghatározott frekvencia egész számú sokszorosai, hanem az egyes rezgések frekvenciái megegyeznek azoknak a fényhullámoknak frekvenciáival, amelyeket az atom emittálni képes és amelyeket a régi elmélet a *Bohr*-féle frekvenciafeltételből nyert. A korrespondencia helyébe tehát itt a teljes megegyezés lép. A hullámmechanikában a (11.4) kifejezésben x_n, y_n, z_n helyébe tehát nyilvánvalóan azoknak a részrezgéseknek amplitúdóit kell írnunk, amelyekből az $\bar{x}$, $\bar{y}$ és $\bar{z}$ összetevődik. A $| c_i c_k^* |$ faktorokat azonban nem szabad az amplitúdókhoz hozzávennünk. Ha ugyanis ezeket a faktorokat az amplitúdóhoz hozzávéve beírnánk a (11.4) kifejezésbe, akkor azt nyernénk, hogy az atom egy olyan állapotban, melynél az összes c, kivéve c_i-t, zérussal egyenlő, nem mehet át spontán egy másik kvantumállapotba, ami ellenkezik a tapasztalattal. A (11.4) kifejezésbe amplitúdók gyanánt tehát a $2 | x_{ki} |$ stb. mennyiségeket kell beírni. A korrespondenciaelvet tehát a hullámmechanikában a következőképpen fogalmazhatjuk meg: ha egy atom az i-edik stacionárius állapotban van, akkor annak valószínűsége, hogy ebből 1s alatt spontán átmegy egy $k < i$ kvantumállapotba

$$w = \frac{64\pi^4 e^2}{3c^3 h} \nu_{ik}^3 (| x_{ki} |^2 + | y_{ki} |^2 + | z_{ki} |^2). \tag{22.11.9}$$

Ez a kifejezés nem felel meg teljesen (11.4)-nek, ugyanis a fenti valószínűséget a (11.4)-nek megfelelő intenzitáskifejezésből, amely a másodpercenként kisugárzott energiát adja, úgy nyerjük, hogy az utóbbit elosztjuk az egy átmenetnél ki-

sugárzott energiával, $h\nu_{ik}$-val. Ennek megfelelően, mivel minden $i \to k$ átmenetnél az emittált energia $h\nu_{ik} = E_i - E_k$, annak a fénynek intenzitása, amelyet N számú, az i-edik kvantumállapotban levő atom emittál 1s alatt, a következő:

$$J = N \frac{64\pi^4 e^2}{3c^3} \nu_{ik}^4 (|x_{ki}|^2 + |y_{ki}|^2 + |z_{ki}|^2) . \qquad (22.11.10)$$

Az x_{ki}, y_{ki}, z_{ki} mennyiségeket természetesen a normált sajátfüggvényekkel kell kiszámítani, mert csak így egyértelműek. Az így nyert fontos kifejezéseket, amelyeket (11.4)-ből dedukáltunk, a kvantummechanika alapján is le lehet vezetni és ott azt is ki lehet mutatni, hogy nemcsak az emisszió, hanem az abszorpció valószínűsége, tehát pl. az olyan $i \to k$ átmenetek valószínűsége, amelyeknél $k > i$, szintén arányos ($|x_{ki}|^2 + |y_{ki}|^2 + |z_{ki}|^2$)-tel.

Megemlítjük még, hogy a w- és J-re nyert kifejezéseket itt olymódon – talán némiképp szemléletesebben is – megkaphattuk volna, ha az atomnak megfelelő elektromos dipólusmomentum kvantummechanikai értékéből indultunk volna ki, amely a következő:

$$\mathbf{p} = -\int \Psi^* \mathbf{r} e \Psi \, dv = -\sum_{i,k} c_i c_k^* e^{-\frac{2\pi i}{h}(E_i - E_k)t} \int \psi_k^* \mathbf{r} e \psi_i \, dv , \qquad (22.11.11)$$

ahol $\mathbf{r}$ a magtól az elektronhoz húzott rádiuszvektor. Mivel, mint látható, a dipólmomentum függ az időtől, az atom sugároz. Az 1s alatt kisugárzott energiát úgy kapjuk, ha a megfelelő klasszikus kifejezésben a momentum helyébe a helyesen értelmezett kvantummechanikai értéket írjuk, ami teljesen hasonló az előbbi eljáráshoz.

A következőkben még néhány következtetést vonunk le w, ill. J fentebb kapott kifejezéseiből. Különös érdekességűek azok az esetek, amelyeknél meghatározott i, k kombinációkra az x_{ki}, y_{ki}, z_{ki} mennyiségek közül bizonyos számú eltűnik. Ha egy bizonyos i, k kombináció esetén

$$x_{ki} = 0, \quad y_{ki} = 0, \quad z_{ki} = 0,$$

akkor ebből nyilván azt következtethetjük, hogy az $i \to k$ átmenet nem jön létre, vagyis a spektrumban a ν_{ki} frekvenciának megfelelő vonal hiányzik. Ilymódon tehát le lehet vezetni bizonyos kiválasztási szabályokat. Ha az x_{ki}, y_{ki}, z_{ki} mennyiségek közül egy meghatározott kombinációra csak kettő tűnik el, a harmadik ellenben zérustól különböző érték, pl.

$$x_{ki} \neq 0, \quad y_{ki} = 0, \quad z_{ki} = 0,$$

akkor az $i \to k$ átmenetnek megfelelő sugárzás egy az x-tengely irányában rezgő dipólus sugárzásának fog megfelelni, vagyis az x-tengely irányában lineárisan poláros lesz. Végül pedig, ha az x_{ki}, y_{ki}, z_{ki} mennyiségek közül csak egy tűnik el, vagyis pl.

$$x_{ki} \neq 0, \quad y_{ki} \neq 0, \quad z_{ki} = 0,$$

akkor az $i \rightarrow k$ átmenetnél elliptikusan vagy cirkulárisan poláros fényt emittál az atom.

A fentiek alapján az egyes rendszerekre kiválasztási szabályokat állapíthatunk meg. Így pl. a lineáris harmonikus oszcillátorra nyerjük, hogy csak olyan átmenetek lehetségesek, amelyeknél az oszcillációs kvantumszám ± 1-gyel változik, vagyis a lineáris harmonikus oszcillátor egyszerre csak egy $h\nu$ energiakvantumot emittálhat vagy abszorbeálhat. A H-atomra ugyanazokat a kiválasztási szabályokat kapjuk, amelyeket már a *Bohr*-elméletben említettünk, vagyis a főkvantumszám, n és a radiális kvantumszám, n_r tetszőlegesen változhat, a mellékkvantumszám, l csak ± 1-gyel, a mágneses kvantumszám, m pedig csak ± 1-gyel vagy zérussal változhat.

HUSZONHARMADIK FEJEZET

EGYSZERŰ PÉLDÁK A SCHRÖDINGER-EGYENLET MEGOLDÁSÁRA

1. §. Szabad tömegpont

Legyen adva egy m_0 tömegű tömegpont (korpuszkula) és legyen

$$V = 0, \tag{23.1.1}$$

akkor

$$H = T \quad \text{és} \quad T = \frac{1}{2} m_0 v^2, \tag{23.1.2}$$

ahol v a tömegpont sebessége.

A *Schrödinger*-egyenlet ekkor a következő

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E\psi = 0. \tag{23.1.3}$$

Derékszögű koordináták esetében az egyenlet részletesen kiírva

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E\psi = 0. \tag{23.1.4}$$

Ennek az egyenletnek megoldása

$$\psi = Ae^{ik(\alpha x + \beta y + \gamma z)}, \tag{23.1.5}$$

ahol α, β, γ iránykoszinuszok és A egy tetszőleges állandó. Behelyettesítve az egyenletbe, nyerjük, hogy

$$\left[k^2(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2) - \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E\right]\psi = 0. \tag{23.1.6}$$

Mivel ennek minden x-, y-, z-re fenn kell állnia, ψ együtthatójának el kell tűnnie. Ha figyelembe vesszük az iránykoszinuszokra fennálló relációt, akkor innen

$$k^2 = \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E, \tag{23.1.7}$$

vagyis

$$k = 2\pi \frac{\sqrt{2m_0 E}}{h} = 2\pi \frac{m_0 v}{h} = 2\pi \frac{p}{h}. \tag{23.1.8}$$

ψ az α, β, γ irány mentén periodikus függvény, mégpedig, mint ψ formulájából látható, a periódus hossza, vagyis a hullámhossz $2\pi/k$,

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \tag{23.1.9}$$

Összehasonlítva előbbi eredményünkkel, nyerjük, hogy

$$\lambda = \frac{h}{p}, \tag{23.1.10}$$

megegyezésben a kísérleti eredményekkel.

Figyelembe véve ezeket az eredményeket és azt, hogy

$$p\alpha = p_x, \quad p\beta = p_y, \quad p\gamma = p_z, \tag{23.1.11}$$

a fent megadott ψ-t a következő alakban is írhatjuk:

$$\psi = Ae^{\frac{2\pi i}{\lambda}(\alpha x + \beta y + \gamma z)} = Ae^{\frac{2\pi i}{h}(p_x x + p_y y + p_z z)} \tag{23.1.12}$$

ψ-ből Ψ-t úgy kapjuk, hogy az előbbit $e^{-2\pi i \nu t}$-vel szorozzuk. Tehát

$$\Psi = Ae^{-2\pi i\left[\nu t - \frac{1}{\lambda}(\alpha x + \beta y + \gamma z)\right]} = Ae^{-\frac{2\pi i}{h}[Et - (p_x x + p_y y + p_z z)]}. \tag{23.1.13}$$

Ez egy síkhullám, amely az α, β, γ irányban halad, frekvenciája $\nu = \frac{E}{h}$, hullámhossza pedig $\lambda = \frac{h}{p}$.

Képezzük $\Psi\Psi^*$-ot. Mint azonnal látható, azt nyerjük, hogy

$$\Psi\Psi^* = |A|^2. \tag{23.1.14}$$

Mivel $|A|^2$ állandó, a helytől és időtől független mennyiség, azt kaptuk, hogy $V = 0$ esetben annak valószínűsége, hogy a részecske egy bizonyos helyen jelen van, mindenhol és minden időben ugyanakkora. Tehát arról, hogy a részecske egy bizonyos időben hol van, nem tudunk semmit. Ez teljesen megfelel a *Heisenberg*-féle határozatlansági relációnak. Ugyanis formuláinkban szerepelnek a részecske impulzuskomponensei és energiája, tehát feltételezzük ezek egzakt ismeretét, de akkor az időről, amelyet a részecske ebben az energiaállapotban eltölt és a részecske helyéről nem tudhatunk semmit.

2. §. A síkbeli rotátor

A síkbeli rotátor alatt egy tömegpontot értünk, amely a síkban körpályán mozoghat egy másik fix pont körül. Síkbeli rotátort reprezentál pl. egy tömegpont, amely egy fix tengely körül keringhet körpályán, a tömegpont ugyanis ekkor mindig ugyanabban a síkban marad. Első feladatunk felírni a *Schrödinger-*

egyenletet, evégből meg kell állapítani az energia kifejezését. Az m_0 tömegű tömegpont helyzetét a körpályán, amelynek sugarát ismertnek tételezzük fel, egyetlen paraméterrel jellemezhetjük, mégpedig a ϕ síkbeli polár koordinátával, vagyis az azimuttal.

Az energia kifejezése, minthogy $V = 0$,

$$H = T = \frac{1}{2}\Theta\dot{\phi}^2, \tag{23.2.1}$$

ahol Θ a kezdőponton átmenő és a forgás síkjára merőleges tengelyre vonatkozó tehetetlenségi momentum. A ϕ-hez tartozó kanonikusan konjugált impulzuskoordináta

$$p_\phi = \frac{\partial T}{\partial \dot{\phi}} = \Theta\dot{\phi}. \tag{23.2.2}$$

Tehát

$$H = \frac{1}{2\Theta}p_\phi^2 = E. \tag{23.2.3}$$

Ennek alapján a *Schrödinger*-egyenlet

$$-\frac{1}{2\Theta}\frac{h^2}{4\pi^2}\frac{d^2\psi}{d\phi^2} = E\psi, \tag{23.2.4}$$

vagyis

$$\frac{d^2\psi}{d\phi^2} = -\frac{8\pi^2\Theta E}{h^2}\psi. \tag{23.2.5}$$

Ennek az egyenletnek megoldása

$$\psi = Ae^{\pm i\sqrt{\frac{8\pi^2\Theta E}{h^2}}\phi}, \tag{23.2.6}$$

ahol A egy tetszőleges állandó, melyet a normálási feltételből lehet meghatározni.

A probléma sajátértékeit abból a követelményből határozzuk meg, hogy ψ egyértelmű függvénye legyen a helynek. Ez jelen esetben azt jelenti, hogy ψ értéke ugyanaz legyen a $\phi = 0$ és $\phi = 2\pi$ értékeknél, amiből következik, hogy az exponensben a $\sqrt{\frac{8\pi^2\Theta E}{h^2}}$ -nek egy n egész számmal kell egyenlőnek lenni, tehát

$$\sqrt{\frac{8\pi^2\Theta E}{h^2}} = n, \tag{23.2.7}$$

vagyis

$$E = E_n = \frac{h^2}{8\pi^2\Theta}n^2 \qquad (n = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots). \tag{23.2.8}$$

Ezek az E_n értékek adják a síkbeli rotátor energiájának sajátértékeit. A síkbeli rotátor csak ezeket az energiaértékeket veheti fel. Itt tehát a kvantummechanika ugyanarra az eredményre vezet, mint a *Bohr*-féle elmélet. A térbeli rotátor esetében azonban, amellyel rövidesen foglalkozni fogunk és amellyel a kétatomos molekulák rotációja sematizálható, a kvantummechanika más eredményre vezet, mint a *Bohr*-féle elmélet.

A síkbeli rotátor sajátfüggvényei

$$\psi = \psi_n = Ae^{\pm in\phi}, \tag{23.2.9}$$

vagyis

$$\psi_n = A\cos n\phi \quad \text{és} \quad \psi_n = A\sin n\phi.$$

Tehát mindegyik E_n energiaértékhez két egymástól lineárisan független sajátfüggvény tartozik. Általában, ha egy sajátértékhez több, pl. z egymástól lineárisan független sajátfüggvény tartozik, akkor azt mondjuk, hogy az illető állapot degenerált, mégpedig $(z-1)$-szeresen degenerált. Jelen esetben tehát mindegyik állapot egyszeresen degenerált. Hogy itt mindegyik állapothoz két független sajátfüggvény tartozik, az annak a következménye, hogy a rotátor egy megadott n esetében pozitív és negatív irányban végezhet forgást, tehát mindegyik n-nek, vagyis mindegyik E_n energianívónak két állapot felel meg.

3. §. A harmonikus lineáris oszcillátor

A harmonikus lineáris oszcillátor egy m_0 tömegpont, amely rezgéseket végez egy egyenes, pl. az x-tengely mentén a $-kx$ rugalmas erő hatására. A potenciális energia tehát $V = \frac{1}{2}kx^2$. Mint tudjuk, a rezgés frekvenciája

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m_0}}. \tag{23.3.1}$$

A *Schrödinger*-egyenlet a következő

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E-V)\psi = 0. \tag{23.3.2}$$

Ha V-ből k-t eliminálјuk, akkor V-t a következő alakban írhatjuk

$$V = 2\pi^2 m_0 \nu^2 x^2. \tag{23.3.3}$$

Ezt beírva a *Schrödinger*-egyenletbe, nyerjük, hogy

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}E - \frac{16\pi^4 m_0^2 \nu^2}{h^2}x^2\right]\psi = 0. \tag{23.3.4}$$

Vezessük be a következő jelöléseket

$$\lambda = \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E \quad \text{és} \quad \alpha = \frac{4\pi^2 m_0 v}{h}, \tag{23.3.5}$$

amelyekkel a *Schrödinger*-egyenlet a következőképp állítható elő

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\lambda - \alpha^2 x^2)\psi = 0. \tag{23.3.6}$$

Ezek után térjünk át az x változóról a

$$\xi = \sqrt{\alpha} x \tag{23.3.7}$$

változóra. Evégből osszuk el a fenti egyenletet α-val, amidőn, figyelembe véve, hogy $d\xi = \sqrt{\alpha} dx$, kapjuk, hogy

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - \xi^2\right)\psi = 0. \tag{23.3.8}$$

Először is ennek az egyenletnek aszimptotikus megoldását keressük nagy x-ek, vagyis nagy ξ-k esetére, amidőn az állandó $\frac{\lambda}{\alpha}$ tag ξ^2 mellett elhanyagolható. Ekkor az egyenlet a következő alakú

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \xi^2\psi. \tag{23.3.9}$$

Ennek az egyenletnek aszimptotikus megoldása nagy ξ-k esetére

$$\psi = e^{\pm \frac{\xi^2}{2}}. \tag{23.3.10}$$

Ugyanis, ha a ξ szerinti differenciálást a rövidség kedvéért vesszővel jelöljük, nyerjük, hogy

$$\psi' = \pm\xi\psi \quad \text{és} \quad \psi'' = \pm\psi + \xi^2\psi.$$

Tehát nagy ξ-k esetén

$$\psi'' \approx \xi^2\psi,$$

ami azt mutatja, hogy ψ (3.10) kifejezése valóban aszimptotikus megoldása (3.8)-nak. Mivel ψ-nek a ∞-ben el kell tűnnie, az exponensben csak a mínusz előjel jöhet számításba, tehát (3.8) számunkra használható aszimptotikus megoldása

$$\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \tag{23.3.11}$$

A (3.8) egyenlet megoldását mármost a következőképp vesszük fel

$$\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} u(\xi). \tag{23.3.12}$$

Ekkor nyerjük, hogy

$$\psi' = e^{-\frac{\xi^2}{2}}(u' - \xi u) \tag{23.3.13}$$

és

$$\psi'' = e^{-\frac{\xi^2}{2}}(u'' - 2\xi u - u + \xi^2 u). \tag{23.3.14}$$

(3.12)-t és (3.14)-et behelyettesítve (3.8)-ba és $e^{-\frac{\xi^2}{2}}$-vel osztva, kapjuk:

$$u'' - 2\xi u' + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right)u = 0. \tag{23.3.15}$$

Ennek az egyenletnek megoldására u-t a következő alakban vesszük fel

$$u = \sum_i a_i \xi^i, \tag{23.3.16}$$

vagyis u-t hatványsorral állítjuk elő. Helyettesítsük ezt be (3.15)-be, ekkor

$$\sum_i \left[i(i-1)a_i \xi^{i-2} - 2ia_i \xi^i + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right)a_i \xi^i \right] = 0. \tag{23.3.17}$$

Ezt a kifejezést ξ hatványai szerint rendezve

$$\sum_i \left[(i+2)(i+1)a_{i+2} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1 - 2i\right)a_i \right] \xi^i = 0. \tag{23.3.18}$$

Ez ξ minden értékére fennáll, ha

$$(i+2)(i+1)a_{i+2} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1 - 2i\right)a_i = 0. \tag{23.3.19}$$

Tehát egy kéttagú rekurziós formulát nyertünk a (3.16) kifejezés tagjainak kiszámítására, miáltal az teljesen definiálva van, mert az első együtthatót természetesen egynek vehetjük.

Mivel a sajátfüggvénynek a végtelenben el kell tűnnie, u-nak, ha $\xi \to \infty$, lassabban, vagyis alacsonyabb rendben kell végtelenné válnia, mint amilyen rendben (3.11) eltűnik. Ezt csak úgy tudjuk biztosítani, ha kikötjük, hogy a (3.16) kifejezésben i nem megy végtelenig, vagyis a (3.16) kifejezésnek véges számú tagból kell állnia. Ha azt akarjuk, hogy az $i = n$ után következő együtthatók eltűnjenek, akkor a (3.19) formulában i helyébe n-et írva csak azt kell követelnünk, hogy a_n faktora eltűnjön, mert ekkor az $a_{n+2}, a_{n+1}, \ldots$ együtthatók mind eltűnnek. Tehát legyen

$$\frac{\lambda}{\alpha} - 1 - 2n = 0, \tag{23.3.20}$$

vagyis

$$\frac{\lambda}{\alpha} = 2n + 1. \tag{23.3.21}$$

Ha ide λ és α értékeit behelyettesítjük, nyerjük, hogy

$$\frac{2E}{h\nu} = 2n + 1 ,$$

vagyis

$$E = E_n = (2n + 1)\frac{h\nu}{2} = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu . \tag{23.3.22}$$

Tehát abból a követelményből, hogy ψ-nek a végtelenben el kell tűnnie, meg lehetett határozni az energiasajátértékeket. Mint látjuk, E_n különbözik a *Bohr*-elméleti értéktől, ahol E_n számára az $nh\nu$ értéket találtuk. A különbség, mint látjuk, az, hogy a kvantummechanikában a lineáris oszcillátor energiája $h\nu$ feles számú sokszorosa, míg a régi kvantumelméletben $h\nu$ egész számú sokszorosa. Ez lényeges különbséget csak $n = 0$ esetben jelent, mert a régi kvantumelmélet szerint ekkor a lineáris oszcillátor energiája zérus, míg a kvantummechanika szerint $\frac{1}{2}h\nu$. Különben az energianívónak $\frac{1}{2}h\nu$-vel való eltolása nem jelent lényeges különbséget az eredeti *Planck*-féle hipotézissel szemben, amely szerint az oszcillátor energiát $h\nu$ kvantumokban emittálhat vagy abszorbeálhat, ez ugyanis, mint részletesebb számítások mutatják, a kvantummechanikában is fennáll.

A (3.16) polinomokat, amelyekhez a fenti módon jutottunk, nevezzük *Hermite*-féle polinomoknak, mégpedig az n indexhez tartozót az n-edik *Hermite*-féle polinomnak nevezzük és $H_n(\xi)$-vel jelöljük. Jóllehet $H_n(\xi)$ a fentiek alapján teljesen definiálva van, mégis célszerű lesz differenciálegyenletét külön is megadni, amelyre (3.15)-ből a $\frac{\lambda}{\alpha} = 2n + 1$ helyettesítéssel nyerjük, hogy

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0, \tag{23.3.23}$$

ahol n egész szám. Általában ez az egyenlet szolgál $H_n(\xi)$ definiálására, de az ebből az egyenletből meghatározott polinomok egy határozatlan faktort tartalmaznak, mert az egyenlet homogén. Ki lehet mutatni, hogy a határozatlan faktortól eltekintve, $H_n(\xi)$ a következő kifejezéssel egyenlő:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} . \tag{23.3.24}$$

Így nyerjük, hogy

$$H_0 = 1, \qquad H_3 = 8\xi^3 - 12\xi,$$
$$H_1 = 2\xi, \qquad H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12,$$
$$H_2 = 4\xi^2 - 2, \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

Az E_n-nek megfelelő sajátfüggvény tehát

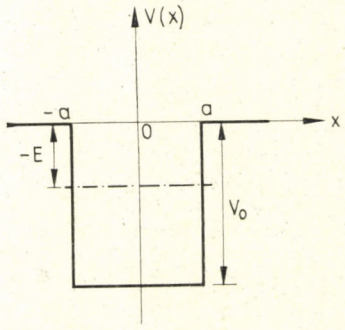
$$\psi_n = A_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi) = A_n(-1)^n e^{+\xi^2/2}\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} , \tag{23.3.25}$$

ahol az A_n egy normálási faktor, amelyet az $\int \psi^* \psi dx = 1$ egyenletből lehet meghatározni

$$A_n^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{1}{2^n n!}. \tag{23.3.26}$$

4. §. A derékszögű potenciálvölgy

Vizsgáljuk az m_0 tömegpont egydimenziós (pl. az x tengely menti) mozgását egy derékszögű potenciálvölgyben. A potenciális energiát a 67. ábra szemlélteti. Az x tengely origóját a potenciálvölgy közepében választottuk meg; a potenciál értéke egy konstans $-V_0$ értékkel egyezik meg a $-a < x < a$ tartományban,



67. ábra. Derékszögű potenciálvölgy

e tartományon kívül a potenciál zérus. A *Schrödinger*-egyenlet a következő

$$\begin{aligned}
&-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, && \text{ha} \quad x < -a, \\
&-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi, && \text{ha} \quad -a < x < a, \\
&-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, && \text{ha} \quad x > a.
\end{aligned} \tag{23.4.1}$$

Ha az E energia pozitív, akkor a tömegpont kinetikus energiája nagyobb, mint V_0, tehát a tömegpont a potenciálvölgyből kilépve a végtelenbe tud távozni. Ebben az esetben a tömegpontnak a potenciálvölgyön való szóródásáról beszélünk. Ha viszont $-V_0 < E < 0$, akkor a tömegpont a potenciálvölgyben kötve van. Ebben a §-ban a kötött állapotokkal foglalkozunk, a szórási állapotokat később fogjuk tárgyalni. Bevezetve a következő állandókat

$$\kappa = \sqrt{-\frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E} \quad \text{és} \quad \alpha = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E + V_0)}, \tag{23.4.2}$$

a (4.1) differenciálegyenletek általános megoldásait a következőképpen írhatjuk fel

$$\begin{aligned} \psi(x) &= b_1 e^{\kappa x} + c_1 e^{-\kappa x}, && \text{ha } x < -a, \\ \psi(x) &= b_2 \sin(\alpha x) + c_2 \cos(\alpha x), && \text{ha } -a < x < a, \\ \psi(x) &= b_3 e^{\kappa x} + c_3 e^{-\kappa x}, && \text{ha } x > a. \end{aligned} \tag{23.4.3}$$

Minthogy ψ-nek az $x \to \pm\infty$ esetben el kell tűnnie, ezért c_1 és b_3 zérus kell, hogy legyen. A b_1, b_2, c_2 és c_3 állandókat pedig abból a követelményből határozzuk meg, hogy mind $\psi(x)$, mind pedig $d\psi/dx$ a potenciálvölgy szélein folytonos függvény kell, hogy legyen. $\psi(x)$ és $d\psi/dx$ folytonosságának feltétele az $x = -a$ és $x = a$ helyeken a következő:

$$\begin{aligned} b_1 e^{-\kappa a} &= -b_2 \sin(\alpha a) + c_2 \cos(\alpha a), \\ b_1 \kappa e^{-\kappa a} &= b_2 \alpha \cos(\alpha a) + c_2 \alpha \sin(\alpha a), \\ c_3 e^{-\kappa a} &= b_2 \sin(\alpha a) + c_2 \cos(\alpha a), \\ -c_3 \kappa e^{-\kappa a} &= b_2 \alpha \cos(\alpha a) - c_2 \alpha \sin(\alpha a). \end{aligned} \tag{23.4.4}$$

Egy lineáris, homogén egyenletrendszert kaptunk, melyből a b_1, b_2, c_2, c_3 állandók meghatározhatók. Triviálistól különböző megoldás csak akkor van, ha az egyenletrendszer determinánsa zérussal egyenlő. A determinánsra elemi számítással a következőt kapjuk

$$2e^{-2\kappa a}\big(\alpha \sin(\alpha a) - \kappa \cos(\alpha a)\big)\big(\alpha \cos(\alpha a) + \kappa \sin(\alpha a)\big), \tag{23.4.5}$$

amely csak úgy lehet zérus, ha a két gömbölyű zárójeles kifejezés közül valamelyik zérus. Tehát a következő két egyenlet közül az egyiknek teljesülnie kell:

$$\begin{aligned} \kappa &= \alpha \operatorname{tg}(\alpha a), \\ \kappa &= -\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a). \end{aligned} \tag{23.4.6}$$

Ezekből a transzcendens egyenletekből az E energiasajátértékek numerikus vagy grafikus módszerekkel meghatározhatók. Ha (4.6) első egyenlete elégül ki, akkor (4.4) megoldása

$$b_2 = 0 \quad \text{és} \quad b_1 = c_3 = c_2 e^{\kappa a} \cos(\alpha a), \tag{23.4.7}$$

míg a (4.6) második egyenletének kielégülése esetén

$$c_2 = 0 \quad \text{és} \quad -b_1 = c_3 = b_2 e^{\kappa a} \sin(\alpha a). \tag{23.4.8}$$

Az első esetben a $\psi(x)$ sajátfüggvény

$$\begin{aligned} \psi(x) &= b_1 e^{\kappa x}, && \text{ha} \quad x < -a, \\ \psi(x) &= b_1 e^{-\kappa a} \frac{\cos(\alpha x)}{\cos(\alpha a)}, && \text{ha} \quad -a < x < a, \\ \psi(x) &= b_1 e^{-\kappa x}, && \text{ha} \quad x > a. \end{aligned} \tag{23.4.9}$$

Ez a sajátfüggvény x-nek páros függvénye: $\psi(-x) = \psi(x)$. A második esetben pedig a sajátfüggvény

$$\begin{aligned} \psi(x) &= b_1 e^{\kappa x}, && \text{ha} \quad x < -a, \\ \psi(x) &= -b_1 e^{-\kappa a} \frac{\sin(\alpha x)}{\sin(\alpha a)}, && \text{ha} \quad -a < x < a, \\ \psi(x) &= -b_1 e^{-\kappa x}, && \text{ha} \quad x > a. \end{aligned} \tag{23.4.10}$$

A sajátfüggvény most x-nek páratlan függvénye: $\psi(-x) = -\psi(x)$.

A $\psi(x)$ sajátfüggvény b_1 amplitúdóját az

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \tag{23.4.11}$$

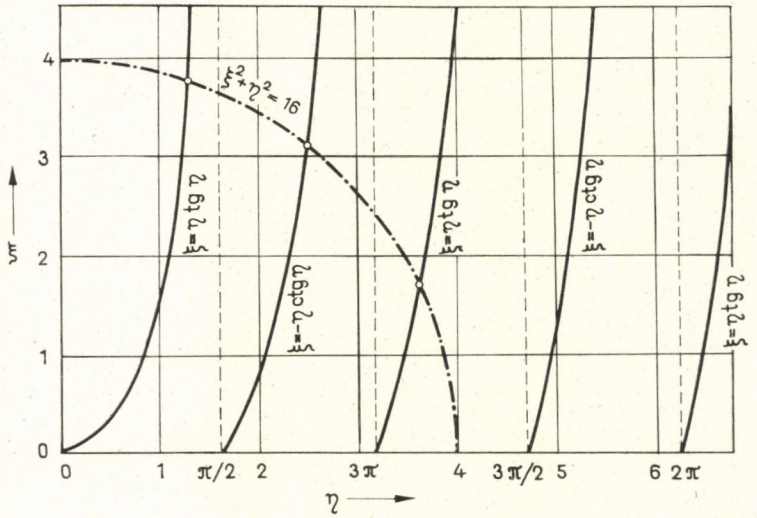
normálási követelményből lehet kiszámítani. Mind (4.9), mind (4.10) esetében kapjuk, hogy

$$\frac{1}{b_1^2} = a e^{-2\kappa a} \left(1 + \frac{1}{\kappa a}\right)\left(1 + \frac{\kappa^2}{\alpha^2}\right). \tag{23.4.12}$$

Végül ismertetünk egy igen egyszerű grafikus eljárást a (4.6) transzcendens egyenletek megoldására. A κ és α mennyiségeket definiáló (4.2) egyenletek szerint fennáll, hogy

$$\kappa^2 + \alpha^2 = \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} V_0 . \tag{23.4.13}$$

A 68. ábrán felrajzoltuk egy $\xi = \kappa a$, $\eta = \alpha a$ koordinátarendszerben a (4.6) egyenleteknek megfelelő görbéket. A sajátprobléma megoldását úgy kapjuk meg, ha



68. ábra. A (4.6) egyenletek grafikus megoldása

meghatározzuk a görbéknek a (4.13) összefüggést ábrázoló körívvel való metszéspontjait. (Csak az I. síknegyedbe eső metszéspontok érdekelnek bennünket, hiszen $\kappa > 0$ és $\alpha > 0$-nak kell lennie.) A metszéspontok ξ koordinátáiból

$$E = -\frac{h^2\xi^2}{8\pi^2 m_0 a^2}$$

segítségével az energiasajátértékeket ki tudjuk számítani. A 68. ábrán bemutatott szerkesztésből következik, hogy a metszéspontok (és így az energiasajátértékek) száma mindig véges és minél nagyobb a potenciálvölgyet jellemző $\frac{8\pi^2 m_0 a^2 V_0}{h^2}$ konstans, annál több a metszéspontok száma. Ha

$$\frac{n\pi}{2} < \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0 a^2 V_0}{h^2}} < \frac{(n+1)\pi}{2}, \tag{23.4.14}$$

akkor a metszéspontok száma $n + 1$. Páros sajátfüggvényű megoldás legalább egy mindig van, páratlan sajátfüggvény csak akkor, ha

$$\sqrt{\frac{8\pi^2 m_0 a^2 V_0}{h^2}} > \frac{\pi}{2}.$$

Az alapállapothoz tartozó sajátfüggvény mindig páros, a gerjesztett állapotokban a páratlan és páros sajátfüggvények váltogatják egymást.

5. §. Részecskék áthaladása derékszögű potenciálvölgyön

Az előzőekben a derékszögű potenciálvölgyben kialakuló kötött, tehát negatív energiájú állapotokat vizsgáltuk meg. Most a részecskéknek a potenciálvölgyön való áthaladásával fogunk foglalkozni. Jöjjenek a részecskék balról, a negatív x-tengely irányából. Energiájuk egy adott pozitív E érték, melyet a kezdősebesség meghatároz. Szeretnénk tudni, hogy a potenciálvölgy milyen hatást gyakorol a részecskék mozgására: hányadrészük halad át és hányadrészük verődik vissza. Kiindulópontunk most is a (4.1) *Schrödinger*-egyenlet. Pozitív E energia esetén az általános megoldás

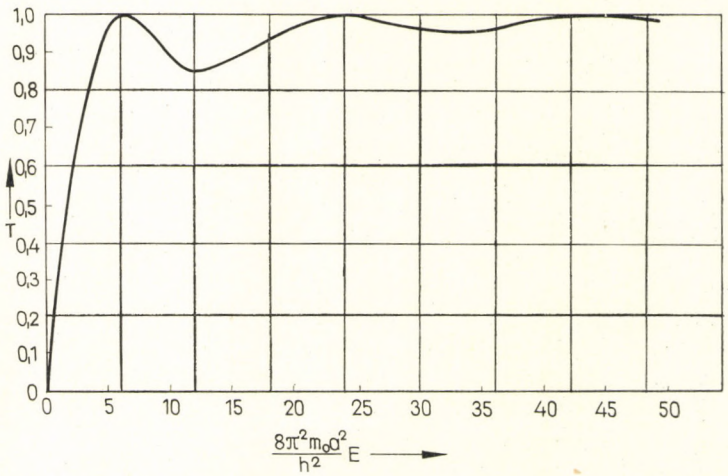
$$\begin{aligned}
\psi(x) &= b_1 e^{ikx} + c_1 e^{-ikx}, && \text{ha} \quad x < -a, \\
\psi(x) &= b_2 e^{i\alpha x} + c_2 e^{-i\alpha x}, && \text{ha} \quad -a < x < a, \\
\psi(x) &= b_3 e^{ikx} + c_3 e^{-ikx}, && \text{ha} \quad x > a,
\end{aligned} \tag{23.5.1}$$

ahol α ugyanaz, mint (4.2)-ben és

$$k = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E}. \tag{23.5.2}$$

A b_1, b_2 és b_3 amplitúdójú hullámok jobbra, a pozitív x-tengely irányába haladnak, a c_1, c_2 és c_3 amplitúdójúak pedig balra. Mivel a beeső részecskék balról érkeznek a potenciálvölgyhöz, ezért az $x > a$ térrészben csak jobbra haladó részecskék lehetnek, tehát $c_3 = 0$. A többi amplitúdót ismét az a követelmény határozza meg, hogy $\psi(x)$ és $d\psi/dx$ folytonos kell, hogy legyen az $x = -a$ és $x = a$ helyeken. E folytonossági feltételeket részletesen kiírva a következő egyenletrendszerhez jutunk

$$\begin{aligned} b_1 e^{-ika} + c_1 e^{ika} &= b_2 e^{-i\alpha a} + c_2 e^{i\alpha a}, \\ k(b_1 e^{-ika} - c_1 e^{ika}) &= \alpha(b_2 e^{-i\alpha a} - c_2 e^{i\alpha a}), \\ b_3 e^{ika} &= b_2 e^{i\alpha a} + c_2 e^{-i\alpha a}, \\ k b_3 e^{ika} &= \alpha(b_2 e^{i\alpha a} - c_2 e^{-i\alpha a}). \end{aligned} \tag{23.5.3}$$



69. ábra. Derékszögű potenciálvölgy transzmissziós együtthatója mint E függvénye, ha $\dfrac{8\pi^2 m_0 a^2 V_0}{h^2} = 16$

Ezekből az egyenletekből kiküszöbölve b_2-t és c_2-t, a beeső hullám b_1, a potenciálvölgyről visszaverődött hullám c_1 és a völgyön átjutott hullám b_3 amplitúdója között fennálló összefüggéseket kapjuk meg. Ezek a következők:

$$\begin{aligned} b_1 e^{-ika} + c_1 e^{ika} &= \frac{1}{2} e^{ika}\left[\left(1 + \frac{k}{\alpha}\right) e^{-2i\alpha a} + \left(1 - \frac{k}{\alpha}\right) e^{2i\alpha a}\right] b_3, \\ b_1 e^{-ika} - c_1 e^{ika} &= \frac{1}{2} e^{ika}\left[\left(1 + \frac{\alpha}{k}\right) e^{-2i\alpha a} + \left(1 - \frac{\alpha}{k}\right) e^{2i\alpha a}\right] b_3. \end{aligned} \tag{23.5.4}$$

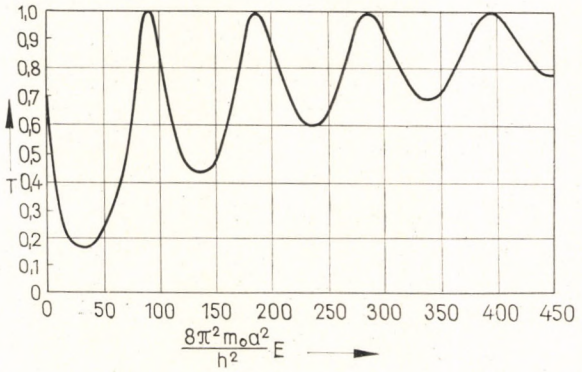
A potenciálvölgy transzmissziós együtthatója alatt annak valószínűségét értjük,

hogy egy részecske túl tud jutni a potenciálvölgyön. Ezt a valószínűséget a beeső és áthaladt hullám amplitúdói abszolút értéke négyzetének viszonya adja meg. A transzmissziós együttható tehát

$$T = \left| \frac{b_3}{b_1} \right|^2 .$$

Az (5.4) egyenletekből T-re a következő formula adódik:

$$T = \frac{1}{\cos^2(2\alpha a) + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2 \sin^2(2\alpha a)} . \qquad (23.5.5)$$



70. ábra. Derékszögű potenciálvölgy transzmissziós együtthatója mint E függvénye, ha $\frac{8\pi^2 m_0 a^2 V_0}{h^2} = 800$

A potenciálvölgyön való visszaverődés valószínűsége pedig

$$R = \left| \frac{c_1}{b_1} \right|^2 = \frac{\left[\frac{1}{4}\left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2 - 1\right] \sin^2(2\alpha a)}{\cos^2(2\alpha a) + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2 \sin^2(2a\alpha)} . \qquad (23.5.6)$$

(A két mennyiség nem független egymástól: fennáll ugyanis, hogy $T + R = 1$). A T transzmissziós együtthatót, mint a beeső részecskék E energiájának függvényét két különböző potenciálvölgy esetén a 69. és 70. ábrák mutatják. Látható, hogy a maximális, $100^0/_0$-os transzmisszió csak néhány diszkrét energiérték esetében valósul meg, amikor $\sin(2\alpha a) = 0$, tehát $\alpha = \frac{n\pi}{2a}$. A 70. ábrán láthatjuk,

hogy ha a potenciálvögy igen mély és széles, tehát ha

$$\frac{8\pi^2 m_0 a^2 V_0}{h^2} \gg 1,$$

akkor a transzmissziós együttható maximumai igen élesek. Ilyen esetben a maximumokat *rezonanciák*nak nevezzük.

6. §. Részecskék áthaladása a potenciálfalon. Alagúteffektus

A következőkben az m_0 tömegpontnak a 71. ábra szerinti potenciálfalon való áthaladásával foglalkozunk. A mozgás most is egydimenziós, a probléma *Schrödinger*-egyenlete a következő

$$\begin{aligned} -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi, && \text{ha} \quad x < -a, \\ -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi &= E\psi, && \text{ha} \quad -a < x < a, \\ -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi, && \text{ha} \quad x > a. \end{aligned} \tag{23.6.1}$$

Foglalkozzunk először az $E < V_0$ esettel. (A klasszikus mechanika szerint ekkor a részecske visszapattan a potenciálfalon). A *Schrödinger*-egyenlet általános megoldása

$$\begin{aligned} \psi(x) &= b_1 e^{ikx} + c_1 e^{-ikx}, && \text{ha} \quad x < -a, \\ \psi(x) &= b_2 e^{\beta x} + c_2 e^{-\beta x}, && \text{ha} \quad -a < x < a, \\ \psi(x) &= b_3 e^{ikx} + c_3 e^{-ikx}, && \text{ha} \quad x > a, \end{aligned} \tag{23.6.2}$$

ahol

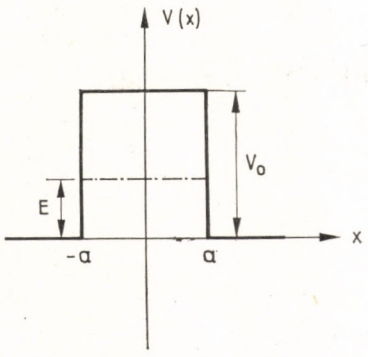
$$k = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E} \quad \text{és} \quad \beta = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(V_0 - E)}.$$

Balról beeső részecskék esetén az $x > a$ térrészben csak jobb felé haladó anyaghullám lehet, tehát $c_3 = 0$. Az $x = -a$ és $x = a$ helyekre vonatkozó folytonossági követelményekből pedig

$$\begin{aligned} b_1 e^{-ika} + c_1 e^{ika} &= b_2 e^{-\beta a} + c_2 e^{\beta a}, \\ ik(b_1 e^{-ika} - c_1 e^{ika}) &= \beta(b_2 e^{-\beta a} - c_2 e^{\beta a}), \\ b_3 e^{ika} &= b_2 e^{\beta a} + c_2 e^{-\beta a}, \\ ikb_3 e^{ika} &= \beta(b_2 e^{\beta a} - c_2 e^{-\beta a}). \end{aligned} \tag{23.6.3}$$

A potenciálfal transzmissziós együtthatója a beeső és áthaladó hullám amplitúdójának viszonyából határozható meg. A (6.3) egyenletekből egyszerű számítással kapjuk, hogy

$$T = \left|\frac{b_3}{b_1}\right|^2 = \frac{1}{\mathrm{ch}^2(2\beta a) + \frac{1}{4}\left(\frac{\beta}{k} - \frac{k}{\beta}\right)^2 \mathrm{sh}^2(2\beta a)}. \tag{23.6.4}$$



71. ábra. Egydimenziós potenciálfal

Az eredmény igen figyelemreméltó. A részecskék véges, zérustól különböző valószínűséggel áthaladhatnak a potenciálfalon akkor is, ha a klasszikus mechanika szerint feltétlenül visszapattannának róla. Ezt a jelenséget alagúteffektusnak nevezzük. Az alagúteffektus valószínűsége növekvő falvastagság esetén rohamosan csökken, $\beta a \gg 1$ esetben a T transzmisszió a következő közelítő képlettel adható meg

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-4\beta a}. \tag{23.6.5}$$

Röviden foglalkozunk még az $E > V_0$ esettel, tehát amikor a klasszikus mechanika szerint a részecske feltétlenül áthalad a potenciálfalon. A transzmissziós együtthatóra most az előzőekhez hasonló számítással a következő kifejezés adódik

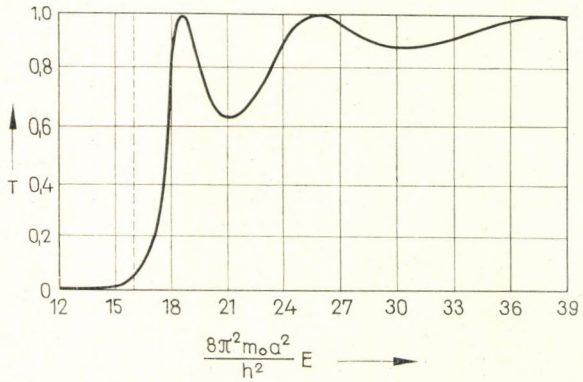
$$T = \frac{1}{\cos^2(2\alpha a) + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2 \sin^2(2\alpha a)}, \tag{23.6.6}$$

melyben

$$k = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E} \quad \text{és} \quad \alpha = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E - V_0)}. \tag{23.6.7}$$

T csak néhány rezonanciaenergiánál éri el a klasszikus mechanikának megfelelő

$T = 1$ értéket. A rezonanciaenergiákat a $\sin(2\alpha a) = 0$, tehát $\alpha = \frac{n\pi}{2a}$ feltétel határozza meg. A 72. ábrán bemutatjuk a (6.4) es (6.6) képletekből kiszámított T transzmissziós együtthatót, mint a beeső részecske E energiájának függvényét



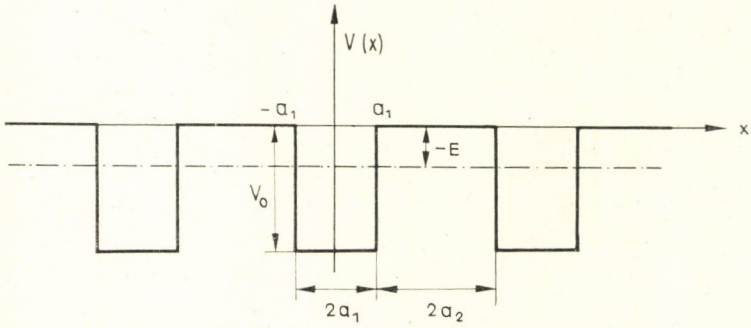
72. ábra. A potenciálfal transzmissziós együtthatója mint E függvénye, ha $\frac{8\pi^2 m_0 a^2 V_0}{h^2} = 16$

egy olyan potenciálfal esetén, melyre

$$\frac{8\pi^2 m_0 a^2 V_0}{h^2} = 16 .$$

7. §. Periodikus potenciál

A fémkristályokban levő vezetési elektronok a fémionok által kialakított potenciáltérben mozognak. E potenciál legszembeötlőbb tulajdonsága az, hogy a rácsállandóval megszabott ütemben periodikus. A 73. ábrán egy egydimenziós periodikus potenciált láthatunk, mely derékszögű potenciálvölgyek szabályos is-



73. ábra. Egydimenziós periodikus potenciál

métlődéséből áll. A periódusa $l = 2a_1 + 2a_2$. Ez a potenciál a fémekben uralkodó potenciáloknak igen nagy mértékben idealizált modellje, mégis a periodikus potenciálok minden lényeges tulajdonságát tanulmányozhatjuk rajta.

Írjuk fel az egydimenziós mozgás *Schrödinger*-egyenletét

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{23.7.1}$$

Ha a $V(x)$ potenciál l szerint periodikus, akkor $V(x + l) = V(x)$. Helyettesítsünk (7.1)-ben x helyébe $x + l$-t:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\frac{d^2\psi(x+l)}{dx^2} + V(x)\psi(x+l) = E\psi(x+l). \tag{23.7.2}$$

Látjuk, hogy ha $\psi(x)$ megoldása a *Schrödinger*-egyenletnek, akkor $\psi(x + l)$ is az. Viszont az E sajátértékhez egydimenziós mozgás esetén csak egy sajátfüggvény tartozhat, tehát $\psi(x)$ és $\psi(x + l)$ csak egy konstans szorzófaktorban különbözhetnek egymástól

$$\psi(x + l) = C\psi(x). \tag{23.7.3}$$

Ha ezt a szabályt n-szer egymásután alkalmazzuk, akkor a $\psi(x + nl) = C^n\psi(x)$ eredményt kapjuk. Mivel a ψ hullámfüggvény az egész x-tengely mentén véges kell, hogy maradjon, ezért C^n az $n \to \pm\infty$ határesetben sem válhat végtelenné. Ez csak úgy lehet, ha C egy egységnyi abszolút értékű fázisfaktor:

$$C = e^{i\Theta}. \tag{23.7.4}$$

Itt Θ egy valós szám, melyről az általánosság sérelme nélkül feltételezhetjük, hogy

$$-\pi < \Theta < \pi. \tag{23.7.5}$$

Ezek után foglalkozzunk a 73. ábra szerinti speciális alakú periodikus potenciál esetén a *Schrödinger*-egyenlet megoldásával. A (7.3) szabály szerint elegendő egy l hosszúságú szakaszt vizsgálni. Legyen ez a $-a_1 < x < a_1 + 2a_2$ tartomány. A *Schrödinger*-egyenlet

$$\begin{aligned} &-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi, \quad \text{ha} \quad -a_1 < x < a_1, \\ &-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \qquad\quad \text{ha} \quad a_1 < x < a_1 + 2a_2. \end{aligned} \tag{23.7.6}$$

Először tételezzük fel, hogy $-V_0 < E < 0$. Bevezetve az

$$\alpha = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E + V_0)} \quad \text{és} \quad \kappa = \sqrt{-\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}E} \tag{23.7.7}$$

jelöléseket, az általános megoldás

$$\psi(x) = b_1 e^{i\alpha x} + c_1 e^{-i\alpha x}, \qquad \text{ha} \qquad -a_1 < x < a_1,$$
$$\psi(x) = b_2 e^{\kappa x} + c_2 e^{-\kappa x}, \qquad \text{ha} \qquad a_1 < x < a_1 + 2a_2. \tag{23.7.8}$$

Tudjuk, hogy ψ-nek és $d\psi/dx$-nek folytonosan kell változnia azokon a helyeken is, ahol a potenciálnak ugráspontja van. A folytonosság feltétele az $x = a_1$ helyen

$$b_1 e^{i\alpha a_1} + c_1 e^{-i\alpha a_1} = b_2 e^{\kappa a_1} + c_2 e^{-\kappa a_1},$$
$$i\alpha(b_1 e^{i\alpha a_1} - c_1 e^{-i\alpha a_1}) = \kappa(b_2 e^{\kappa a_1} - c_2 e^{-\kappa a_1}). \tag{23.7.9}$$

A potenciálnak egy másik ugráspontja az $x = a_1 + 2a_2$ helyen van. E ponttól jobbra a sajátfüggvényt (7.8) első egyenletéből a (7.3) és (7.4) szabályok alapján állapíthatjuk meg

$$\psi(x) = e^{i\Theta}(b_1 e^{i\alpha(x-l)} + c_1 e^{-i\alpha(x-l)}),$$

ha

$$a_1 + 2a_2 < x < 3a_1 + 2a_2.$$

Ennek kell folytonosan és folytonos első differenciálhányadossal csatlakoznia a (7.8) második egyenletével megadott ψ függvényhez. Ebből a következő összefüggések adódnak

$$b_2 e^{\kappa(a_1+2a_2)} + c_2 e^{-\kappa(a_1+2a_2)} = e^{i\Theta}(b_1 e^{-i\alpha a_1} + c_1 e^{i\alpha a_1}),$$
$$\kappa(b_2 e^{\kappa(a_1+2a_2)} - c_2 e^{-\kappa(a_1+2a_2)}) = i\alpha e^{i\Theta}(b_1 e^{-i\alpha a_1} - c_1 e^{i\alpha a_1}). \tag{23.7.11}$$

A (7.9) és (7.11) egyenletek lineáris homogén egyenletrendszert képeznek, melyből a b_1, c_1, b_2 és c_2 állandók meghatározhatók. Triviálistól különböző megoldás csak akkor van, ha az egyenletrendszer determinánsa zérussal egyenlő

$$\begin{vmatrix} e^{i\alpha a_1} & e^{-i\alpha a_1} & -e^{\kappa a_1} & -e^{-\kappa a_1} \\ i\alpha e^{i\alpha a_1} & -i\alpha e^{-i\alpha a_1} & -\kappa e^{\kappa a_1} & \kappa e^{-\kappa a_1} \\ e^{i(\Theta-\alpha a_1)} & e^{i(\Theta+\alpha a_1)} & -e^{\kappa(a_1+2a_2)} & -e^{-\kappa(a_1+2a_2)} \\ i\alpha e^{i(\Theta-\alpha a_1)} & -i\alpha e^{i(\Theta+\alpha a_1)} & -\kappa e^{\kappa(a_1+2a_2)} & \kappa e^{-\kappa(a_1+2a_2)} \end{vmatrix} = 0.$$

A determinánst kifejtve kapjuk, hogy

$$\operatorname{ch}(2\kappa a_2)\cos(2\alpha a_1) + \frac{\kappa^2 - \alpha^2}{2\kappa\alpha}\operatorname{sh}(2\kappa\alpha_2)\sin(2\alpha a_1) = \cos\Theta. \tag{23.7.12}$$

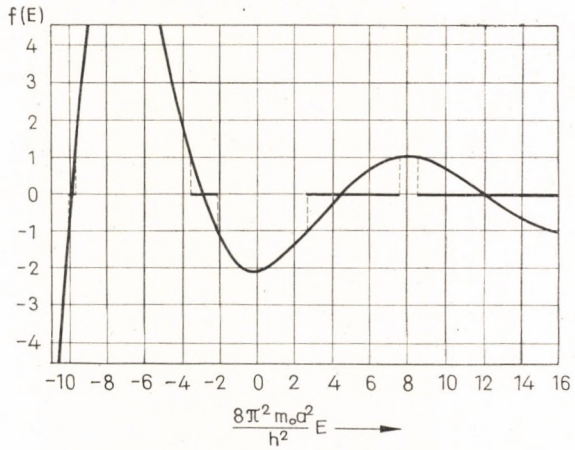
A jobb oldalon egy valós Θ szám koszinusza áll, a bal oldalon pedig, ha α és κ (7.7) definícióit figyelembe vesszük, az E energiának egy transzcendens függvénye. Jelöljük röviden ezt a függvényt $f(E)$ -vel. Fennáll tehát, hogy

$$f(E) = \cos\Theta. \tag{23.7.13}$$

Ez az egyenlet csak akkor elégülhet ki, ha

$$-1 \leq f(E) \leq 1. \tag{23.7.14}$$

A *Schrödinger*-egyenlet sajátértékei azok az E energiák, melyekre ez az egyenlőtlenség teljesül. Az $f(E)$ függvényt $a_1 = 2a_2$ és $\frac{8\pi^2 m_0 a_1^2 V_0}{h^2} = 16$ adatok esetén a 74. ábra szemlélteti. Látjuk, hogy a (7.14) feltételnek eleget tevő E sajátértékek véges hosszúságú intervallumokat, ún. sávokat alkotnak, melyeket tiltott zónák



74. ábra. Az energiasávok meghatározása periodikus potenciál esetén

választanak el egymástól. (Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy azok az E energiák, melyekre $\frac{2\alpha a_1}{\pi}$ egész szám, mind tiltottak, hiszen ez esetben $|f(E)| = \mathrm{ch}\,(2\kappa a_2)$, tehát a (7.14) egyenlőtlenség nem teljesülhet. Az $f(E)$ függvény folytonosságából következik, hogy a tiltott zónák ezen energiaértékek környezetét képezik.)

Teljesen hasonló módon tárgyalható az $E > 0$ eset is. Ekkor az energiasávok meghatározására (7.12) helyett az

$$f(E) \equiv \cos(2ka_2)\cos(2\alpha a_1) - \frac{k^2 + \alpha^2}{2k\alpha}\sin(2ka_2)\sin(2\alpha a_1) = \cos\Theta \tag{23.7.15}$$

egyenlet adódik, melyben

$$k = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E}. \tag{23.7.16}$$

A 74. ábrán a pozitív E tengelyre eső energiasávokat (7.15) szerint határoztuk meg.

Az energiasajátértékek sávos szerkezete a periodikus kristályrácsok egyik legfontosabb tulajdonsága. Segítségével a szilárd testek alapvető tulajdonságait értelmezni lehetett és kiindulópontja lett az elektromos vezetés kvantumelméletének.

8. §. Mozgás centrális erőtérben

Centrálisnak nevezzük az erőteret, ha a V potenciál csak az erőtér centrumától mért r távolságtól függ, de független attól, hogy ezt a távolságot milyen irányban mérjük fel. A centrális erőtérben mozgó tömegpont kvantummechanikai tárgyalásának mind az atom-, mind a magfizikában nagy gyakorlati fontossága van.

Centrális erőtér esetén célszerű térbeli polárkoordinátákat bevezetni és a *Schrödinger*-egyenletet ezekben a koordinátákban felírni.

A derékszögű *Descartes*-koordinátákat és a térbeli polárkoordinátákat a következő transzformáció kapcsolja össze

$$x = r \sin \vartheta \cos \phi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \phi, \quad z = r \cos \vartheta. \tag{23.8.1}$$

Ebből a Δ *Laplace*-operátorra a következő kifejezés adódik

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \\ + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right). \tag{23.8.2}$$

A polárkoordinátarendszer origója gyanánt természetesen az erőtér centrumát választjuk, ekkor $V = V(r)$. A *Schrödinger*-egyenlet polárkoordinátákban tehát a következő

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta}\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2}\right) + \\ + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E - V(r))\psi = 0. \tag{23.8.3}$$

Ennek az egyenletnek megoldására ψ-t a következő alakban vesszük fel

$$\psi = R(r)\, Y(\vartheta, \phi), \tag{23.8.4}$$

ahol R csak r-nek, Y pedig csak a ϑ és ϕ polárszögek függvénye. Helyettesítsük ezt a próbakifejezést a *Schrödinger*-egyenletbe, majd szorozzuk végig az egyenletet r^2/ψ-vel. Ekkor nyerjük, hogy

$$\frac{r^2}{R}\left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} r^2 (E - V(r)) = \\ = -\frac{1}{Y}\left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta}\frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2}\right). \tag{23.8.5}$$

Az egyenlet bal oldalán szereplő kifejezés csak r-től, a jobb oldal pedig csak a ϑ és ϕ polárszögektől függ. r, ϑ és ϕ tetszőleges értékeire az egyenlőség csak akkor állhat fenn, ha mindkét oldal külön-külön állandó. Jelöljük ezt az állandót λ-val. Ekkor a következő két egyenletet kapjuk

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{\lambda}{r^2}R + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E - V(r))R = 0\,, \tag{23.8.6}$$

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg}\vartheta\frac{\partial Y}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \lambda Y = 0\,. \tag{23.8.7}$$

Az első egyenlet egy közönséges differenciálegyenlet az $R(r)$ függvényre nézve. Ezt az egyenletet *radiális Schrödinger-egyenlet*nek nevezzük. Megoldásához természetesen meg kell adni a $V(r)$ potenciálfüggvény konkrét alakját.

Az $Y(\vartheta, \phi)$ függvényre vonatkozó (8.7) egyenlet azonban nem tartalmazza az erőtér potenciálját, megoldása minden centrális erőtér esetén egyaránt megadja a ψ sajátfüggvény szögfüggő részét. Keressük Y-t a következő alakban

$$Y(\vartheta, \phi) = T(\vartheta)\,F(\phi). \tag{23.8.8}$$

Behelyettesítve a (8.7) egyenletbe, $\sin^2\vartheta/Y$-nal való szorzással a ϑ-tól és ϕ-től függő kifejezéseket különválaszthatjuk

$$\frac{\sin^2\vartheta}{T}\left(\frac{d^2T}{d\vartheta^2} + \operatorname{ctg}\vartheta\frac{dT}{d\vartheta}\right) + \lambda\sin^2\vartheta = -\frac{1}{F}\frac{d^2F}{d\phi^2}\,. \tag{23.8.9}$$

Itt ismét fennáll az, hogy az egyenlet mindkét oldalának külön-külön állandónak kell lennie, ugyanis egyébként az egyenlőség nem állhatna fenn a polárszögek tetszőleges értékeire. Tehát a következő két egyenletet kapjuk

$$\frac{d^2T}{d\vartheta^2} + \operatorname{ctg}\vartheta\frac{dT}{d\vartheta}\left(\lambda - \frac{\mu}{\sin^2\vartheta}\right)T = 0\,, \tag{23.8.10}$$

$$\frac{d^2F}{d\phi^2} + \mu F = 0\,. \tag{23.8.11}$$

Az $F(\phi)$-re vonatkozó egyenlet megoldása

$$F(\phi) = e^{i\sqrt{\mu}\phi}.$$

Mivel megköveteljük, hogy a ψ sajátfüggvény és így $F(\phi)$ is egyértékű függvénye legyen a helynek, ezért F-nek ϕ-ben 2π szerint periodikusnak, tehát $m = \sqrt{\mu}$-nek egész számnak kell lennie. Így

$$Y(\vartheta, \phi) = T(\vartheta)e^{im\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{23.8.12}$$

A $T(\vartheta)$ függvény meghatározására szolgáló (8.10) egyenletben írjunk μ helyébe

m^2-et, és végezzük el az $x = \cos\vartheta$ helyettesítést. Rövid számolással kapjuk, hogy

$$(1 - x^2)\frac{d^2P}{dx^2} - 2x\frac{dP}{dx} + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - x^2}\right)P = 0, \qquad (23.8.13)$$

ahol $T(\vartheta)$ helyébe $P(\cos\vartheta)$-t írunk. Ez az egyenlet az ún. *gömbfüggvények differenciálegyenlete.* A gömbfüggvények elméletéből következik, hogy ennek az egyenletnek csak akkor van az $x = \pm 1$ (tehát $\vartheta = 0$ és $\vartheta = \pi$) helyeken reguláris megoldása, ha λ a következő alakú

$$\lambda = (k + |m|)(k + |m| + 1),$$

ahol k egy nemnegatív egész szám: $k = 0, 1, 2, \ldots$ Jelöljük a $k + |m|$ egész számot l-lel, ekkor $\lambda = l(l + 1)$. A $P(x)$-re vonatkozó egyenletnek a $\lambda = l(l + 1)$-hez tartozó megoldásait nevezzük *l-ed rendű gömbfüggvények*nek. Számuk $2l + 1$, mert megadott l esetén m még a $0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$ értékeket veheti fel. $m = 0$ esetében kapjuk az ún. *közönséges l-edrendű gömbfüggvény*eket. Ezek egyszerű l-edrendű polinomok, melyeket $P_l(x)$-szel jelölünk. Be lehet bizonyítani, hogy a P_l polinomok a $G(r, x) = (1 - 2rx + r^2)^{-\frac{1}{2}}$ kifejezés r szerinti hatványsorának együtthatóival azonosak, tehát

$$(1 - 2rx + r^2)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x)r^l.$$

Ebből elemi számítással kapjuk, hogy

$$P_0(x) = 1, \qquad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x),$$

$$P_1(x) = x, \qquad P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3),$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \qquad P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x).$$

Mindez az $m = 0$ esetre vonatkozott. Ha $m \neq 0$, a (8.13) egyenlet megoldásai akkor is kifejezhetők a $P_l(x)$ polinomokkal. Közvetlen behelyettesítéssel meggyőződhetünk arról, hogy $m \neq 0$ esetén

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}P_l(x)}{dx^{|m|}} \qquad (23.8.14)$$

kielégíti a differenciálegyenletet. A $P_l^m(x)$ függvényeket *hozzárendelt gömbfüggvény*eknek nevezzük.

Végeredményben tehát a (8.7) egyenlet megoldásai

$$Y_l^m(\vartheta, \phi) = A_{lm}P_l^m(\cos\vartheta)\,e^{im\phi}, \qquad (23.8.15)$$

ahol l egy nemnegatív egész szám és m szintén egész szám, melyre fennáll, hogy $|m| \leq l$. Az A_{lm} állandó egy normálási együttható, melyet úgy választunk meg, hogy

$$\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\vartheta, \phi)|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\phi = 1 \qquad (23.8.16)$$

legyen. Az első néhány normált $Y_l^m(\vartheta, \phi)$ gömbfüggvény kifejezése

$$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad Y_2^{\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\phi},$$

$$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \vartheta, \qquad Y_3^0 = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta),$$

$$Y_1^{\pm 1} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \vartheta e^{\pm i\phi}, \qquad Y_3^{\pm 1} = \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (5 \cos^2 \vartheta - 1) \sin \vartheta e^{\pm i\phi},$$

$$Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (3 \cos^2 \vartheta - 1), \qquad Y_3^{\pm 2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \vartheta \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\phi},$$

$$Y_2^{\pm 1} = \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\phi}, \qquad Y_3^{\pm 3} = \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\phi}.$$

Végül megadjuk az l mellékkvantumszám esetére vonatkozó radiális *Schrödinger*-egyenletet. $\lambda = l(l+1)$ miatt (8.6) a következő lesz

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E - V(r))R = 0. \qquad (23.8.17)$$

9. §. Az impulzusmomentum

Egy tömegpont háromdimenziós mozgásának vizsgálatakor mind a klasszikus, mind a kvantummechanikában fontos jelentősége van a pályaimpulzusmomentumnak. A pályamozgáshoz tartozó impulzusmomentummal a huszonkettedik fejezet 9. §-ban már foglalkoztunk és láttuk, hogy az impulzusmomentum derékszögű komponenseihez rendelt operátorok a következők:

$$N_x = \frac{h}{2\pi i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),$$

$$N_y = \frac{h}{2\pi i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),$$

$$N_z = \frac{h}{2\pi i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

Vezessünk be térbeli polárkoordinátákat a (7.1) transzformációval. A differenciáloperátorok transzformációs szabálya ekkor

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\vartheta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\vartheta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\phi},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\vartheta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\vartheta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{\cos\vartheta}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\phi},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\vartheta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\vartheta}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}.$$

Az impulzusmomentum-operátorokra ezzel az

$$N_x = \frac{h}{2\pi i}\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \operatorname{ctg}\vartheta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right),$$

$$N_y = \frac{h}{2\pi i}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \operatorname{ctg}\vartheta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \tag{23.9.1}$$

$$N_z = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

kifejezéseket kapjuk, az impulzusmomentum négyzete pedig

$$N^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \operatorname{ctg}\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right). \tag{23.9.2}$$

Nem nehéz meggyőződnünk arról, hogy az Y_l^m gömbfüggvények sajátfüggvényei az N_z és N^2 operátoroknak. Mivel Y_l^m a ϕ azimutszöget $e^{im\phi}$ alakban tartalmazza, ezért az N_z operátor hatása

$$N_z Y_l^m(\vartheta,\phi) = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial Y_l^m}{\partial\phi} = \frac{mh}{2\pi}Y_l^m(\vartheta,\phi). \tag{23.9.3}$$

Az eredmény tehát az, hogy az N_z operátor Y_l^m-t átviszi Y_l^m-nek $mh/2\pi$-szeresébe. N_z sajátértékei tehát

$$\frac{mh}{2\pi}, \tag{23.9.4}$$

ahol

$$m = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l.$$

Az m kvantumszám tehát megadja, hogy a pályamozgás impulzusmomentumának a z-tengely irányában mért komponense mekkora. Mint a fenti eredmény mutatja, ez a komponens $h/2\pi$-nek (pozitív vagy negatív) egész számú többszöröse. m azonos a *Bohr*-elméletben bevezetett mágneses kvantumszámmal.

Az N^2 operátor hatását Y_l^m-re a (9.2) és (8.7) képletek összevetésével állapíthatjuk meg. Az utóbbiban $\lambda = l(l+1)$-et írva, kapjuk, hogy

$$N^2 Y_l^m(\vartheta, \phi) = \frac{l(l+1)h^2}{4\pi^2} Y_l^m(\vartheta, \phi). \tag{23.9.5}$$

Tehát az Y_l^m gömbfüggvények az N^2 operátornak is sajátfüggvényei. A sajátértékek

$$\frac{l(l+1)h^2}{4\pi^2}, \tag{23.9.6}$$

ahol

$$l = 0, 1, 2, \ldots$$

Innen következik, hogy N-nek, az impulzusmomentum abszolút értékének sajátértékei $\sqrt{l(l+1)}h/2\pi$. Az l kvantumszám az impulzusmomentum abszolút értékét határozza meg és azonos a *Bohr*-elmélet mellékkvantumszámával.

Megjegyezzük, hogy a (9.4) sajátértékek nemcsak a z-tengely, hanem az x- és y-tengelyek irányában mért komponensek esetében is érvényesek. (Ez természetes is, hiszen a z-tengely nem lehet kitüntetve más térirányokhoz képest). Az N_x és N_y komponensek hatását az Y_l^m gömbfüggvényekre a (9.1), (8.15) és (8.14) képletekből számíthatjuk ki. Az eredmény a következő

$$N_x Y_l^m = \frac{h}{4\pi}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\, Y_l^{m+1} + \frac{h}{4\pi}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\, Y_l^{m-1},$$

$$N_y Y_l^m = -\frac{ih}{4\pi}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\, Y_l^{m+1} + \frac{ih}{4\pi}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\, Y_l^{m-1}. \tag{23.9.7}$$

Láthatjuk, hogy az N_x és N_y komponenseknek az Y_l^m gömbfüggvények nem sajátfüggvényei. E komponensek sajátfüggvényei a különböző mágneses kvantumszámokhoz tartozó Y_l^m-ek lineáris kombinációi lesznek. Hogy N_z sajátfüggvényei sokkal egyszerűbbek, mint N_x-é és N_y-é, az annak következménye, hogy polárkoordinátarendszerünk tengelyéül éppen a z-tengelyt választottuk.

Vizsgáljuk most meg egy elektron teljes impulzusmomentumát, mely a pálya-impulzusmomentumból és a spinből tevődik össze

$$\mathbf{J} = \mathbf{N} + \mathbf{S}. \tag{23.9.8}$$

Meg fogjuk mutatni, hogy $\mathbf{J}$ kvantálására hasonló szabályok érvényesek, mint a pályamomentum esetében. Tehát $\mathbf{J}^2$ sajátértékei (9.6) mintájára

$$\frac{j(j+1)h^2}{4\pi^2}, \tag{23.9.9}$$

ahol azonban a j belső kvantumszám l-lel ellentétben nem egész, hanem fél egész

értékeket vehet fel:

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$$

A J_z komponens sajátértékei pedig (9.4)-hez hasonlóan

$$\frac{m_j h}{2\pi}, \tag{23.9.10}$$

ahol

$$m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \ldots, \pm j.$$

(9.9) igazolásához képezzük elsősorban a $\mathbf{J} = \mathbf{N} + \mathbf{S}$ operátor négyzetét

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{N} + \mathbf{S})^2 = N^2 + S^2 + 2\mathbf{NS}.$$

Figyelembe véve az S spinoperátorra vonatkozó (22.10.12) és (22.10.22) eredményeket, írhatjuk, hogy

$$J^2 = N^2 + \frac{3h^2}{16\pi^2} + \frac{h}{2\pi}(N_x\sigma_x + N_y\sigma_y + N_z\sigma_z). \tag{23.9.11}$$

A teljes impulzusmomentum sajátfüggvényeit szokás szerint F-el jelöljük. Fennáll tehát, hogy

$$J^2 F = \frac{\beta h^2}{4\pi^2} F, \tag{23.9.12}$$

ha a sajátértéket $\beta h^2/4\pi^2$-tel jelöljük. Az F sajátfüggvény természetesen térbeli koordinátákon kívül a spinváltozót is tartalmazza. Általános alakját (22.10.4) mintájára írhatjuk fel

$$F = F_+(x, y, z)\chi_{+\frac{1}{2}} + F_-(x, y, z)\chi_{-\frac{1}{2}}. \tag{23.9.13}$$

Ha ezt behelyettesítjük a (9.12) sajátértékegyenletbe és tekintetbe vesszük J^2 (9.11) kifejezését, úgy a következő egyenletet kapjuk

$$\left[\left(N^2 + \frac{3h^2}{16\pi^2} + \frac{h}{2\pi}N_z\right)F_+ + \frac{h}{2\pi}(N_x - iN_y)F_-\right]\chi_{+\frac{1}{2}} +$$

$$+\left[\left(N^2 + \frac{3h^2}{16\pi^2} - \frac{h}{2\pi}N_z\right)F_- + \frac{h}{2\pi}(N_x + iN_y)F_+\right]\chi_{-\frac{1}{2}} =$$

$$= \frac{\beta h^2}{4\pi^2}(F_+\chi_{+\frac{1}{2}} + F_-\chi_{-\frac{1}{2}}). \tag{23.9.14}$$

Itt felhasználtuk a *Pauli*-mátrixoknak a χ_{m_s} alapspinorokra való hatását megadó táblázatot (255. oldal). Ez az egyenlet csak úgy teljesülhet az s spinváltozó mindkét értékére, ha a jobb- és baloldalon a $\chi_{+\frac{1}{2}}$ és $\chi_{-\frac{1}{2}}$ spinorok együtthatói különkülön megegyeznek. Ilymódon a következő két egyenletet kapjuk

$$\begin{aligned}\left(N^2+\frac{3h^2}{16\pi^2}+\frac{h}{2\pi}N_z\right)F_+ + \frac{h}{2\pi}(N_x-iN_y)F_- &= \frac{\beta h^2}{4\pi^2}F_+,\\ \left(N^2+\frac{3h^2}{16\pi^2}-\frac{h}{2\pi}N_z\right)F_- + \frac{h}{2\pi}(N_x+iN_y)F_+ &= \frac{\beta h^2}{4\pi^2}F_-.\end{aligned} \tag{23.9.15}$$

Ez egy parciális differenciálegyenletrendszer az F_+, F_- függvényekre. Kiemeljük, hogy (9.15) már nem tartalmazza a spinváltozót, csak a térkoordináták kifejezéseit. Keressük a megoldást a következő alakban

$$F_+ = C_+ Y_l^m(\vartheta,\phi), \quad F_- = C_- Y_l^{m+1}(\vartheta,\phi), \tag{23.9.16}$$

ahol C_+ és C_- egyelőre határozatlan együtthatók. Az N_x, N_y és N_z derékszögű komponensek, valamint N^2 hatását az Y_l^m gömbfüggvényekre már ismerjük, az eredményeket a (9.3), (9.7) és (9.5) képletek adják meg. A (9.16) próbakifejezés behelyettesítésével így azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\left[l(l+1)+\frac{3}{4}+m\right]C_+ + \sqrt{(l+m+1)(l-m)}\,C_- &= \beta C_+,\\ \left[l(l+1)+\frac{3}{4}-m-1\right]C_- + \sqrt{(l+m+1)(l-m)}\,C_+ &= \beta C_-.\end{aligned} \tag{23.9.17}$$

Ez egy lineáris homogén egyenletrendszer a C_+ és C_- együtthatókra. A megoldhatóság feltételéből, az egyenletrendszer determinánsának zérus voltából, a sajátértéket megszabó β paraméterre egy másodfokú egyenletet kapunk

$$\beta^2 - 2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\beta + \left(l^2+l+\frac{1}{4}\right)\left(l^2+l-\frac{3}{4}\right) = 0. \tag{23.9.18}$$

Figyelemre méltó, hogy az m mágneses kvantumszámot nem tartalmazza ez az egyenlet, m a determináns képzésekor kiesik. E másodfokú egyenlet gyökei

$$\beta = l^2+2l+\frac{3}{4} = \left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)$$

és

$$\beta = l^2-\frac{1}{4} = \left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right).$$

A két megoldás mindegyikét a

$$\beta = j(j+1) \tag{23.9.19}$$

alakban írhatjuk fel, az első esetben $j = l + \frac{1}{2}$, a másodikban pedig $j = l - \frac{1}{2}$. Ezzel (9.9) állításunkat teljes mértékben igazoltuk.

A $j = l + \frac{1}{2}$ érték az l pályamomentum és az $\frac{1}{2}$-es spin vektoriális összeadásának, $j = l - \frac{1}{2}$ pedig azok kivonásának felel meg. A sajátértékeket beírva a (9.17) egyenletekbe, a C_+ és C_- együtthatók viszonya egyszerű számítással meghatározható. Ha a sajátfüggvényt úgy normáljuk, hogy $C_+^2 + C_-^2 = 1$ legyen, akkor az elemi számítások elvégzésével a következő eredményt kapjuk

$$C_+ = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}, \quad C_- = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}, \quad \text{ha} \quad j = l + \frac{1}{2},$$
$$C_+ = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}, \quad C_- = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}, \quad \text{ha} \quad j = l - \frac{1}{2}. \tag{23.9.20}$$

Az F sajátfüggvényt pedig (9.13) és (9.16) szerint képezzük

$$F = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\, Y_l^m \chi_{+\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\, Y_l^{m+1} \chi_{-\frac{1}{2}}, \quad \text{ha} \quad j = l + \frac{1}{2},$$
$$F = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\, Y_l^m \chi_{+\frac{1}{2}} - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\, Y_l^{m+1} \chi_{-\frac{1}{2}}, \quad \text{ha} \quad j = l - \frac{1}{2}. \tag{23.9.21}$$

Ezek után határozzuk meg a J_z komponens sajátértékeit. A $J_z = N_z + S_z$ operátor hatását a (9.21) sajátfüggvényekre az $N_z Y_l^m = \frac{mh}{2\pi} Y_l^m$ és $S_z \chi_{m_s} = \frac{m_s h}{2\pi} \chi_{m_s}$ szabályok alapján rögtön felírhatjuk. Mindkét j érték esetén az eredmény

$$J_z F = \left(m + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2\pi} F. \tag{23.9.22}$$

A sajátérték megfelel a (9.10) állításunknak, ha bevezetjük az $m_j = m + \frac{1}{2}$ rövidítést. Ha még figyelembe vesszük, hogy (9.21) első függvényében az m kvantumszám befuthatja az $m = -(l+1), -l, -(l-1), \ldots, -1, 0, 1, \ldots, l$ értékeket, a második megoldásban az $m = -l, -(l-1), \ldots, -1, 0, 1, \ldots (l-1)$ értékeket, úgy láthatjuk, hogy m_j mindkét megoldásban a (9.10) alatti $-j, \ldots, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \ldots, j$ értékeket veszi fel.

Összefoglalva eredményeinket, mondhatjuk, hogy a (9.21) alatti F függvények közös sajátfüggvényei az N^2, J^2 és J_z operátoroknak. A megfelelő sajátértékek rendre $l(l+1)h^2/4\pi^2$, $j(j+1)h^2/4\pi^2$ és $m_j h/2\pi$. A kvantumszámok lehetséges értékei a következők:

$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots,$$

$$j = l + \frac{1}{2}, \quad l - \frac{1}{2}, \tag{23.9.23}$$

$$m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \ldots, \pm j.$$

Az F sajátfüggvényhez indexként odaírjuk ezeket a kvantumszámokat, tehát az impulzusmomentum sajátfüggvény jele F_{ljm_j} lesz.

10. §. A mágneses momentum

Az elektrodinamikának jól ismert tétele szerint egy $-e$ töltésű, zárt pályán mozgó részecske mágneses tere egy olyan mágneses dipólus terével egyenlő, melynek dipólmomentuma

$$\mu_N = -\frac{e}{2m_0 c}\mathbf{N}. \tag{23.10.1}$$

Elektron esetében ehhez még a spinnel kapcsolatos mágneses momentumot is hozzá kell adnunk. Ez utóbbi kifejezése, mint már láttuk,

$$\mu_s = -\frac{e}{m_0 c}\mathbf{S}.$$

A mozgó elektron teljes dipólmomentuma tehát

$$\mu = \mu_N + \mu_s = -\frac{e}{2m_0 c}(\mathbf{N} + 2\mathbf{S}). \tag{23.10.2}$$

E mágneses momentum z-komponensének sajátértékeit és sajátfüggvényeit egyszerűen megkaphatjuk. Alkalmazzuk ugyanis μ_z-t az $Y_l^m \chi_{m_s}$ függvényre. Kapjuk, hogy

$$\mu_z(Y_l^m \chi_{m_s}) = -\frac{e}{2m_0 c}(N_z + 2S_z)(Y_l^m \chi_{m_s}) = -\frac{eh}{4\pi m_0 c}(m + 2m_s)(Y_l^m \chi_{m_s}).$$

Láthatjuk, hogy $Y_l^m \chi_{m_s}$ sajátfüggvénye μ_z-nek, a hozzátartozó sajátérték pedig

$$-\frac{eh}{4\pi m_0 c}(m + 2m_s). \tag{23.10.3}$$

Mivel az m mágneses kvantumszám csak egész értékeket vehet fel, az m_s spin kvantumszám lehetséges értéke pedig $\pm \frac{1}{2}$, ezért a (10.3) értékek a

$$\mu_B = \frac{eh}{4\pi m_0 c}$$

Bohr-féle magneton egész számú többszörösei.

A teljes impulzusmomentum sajátfüggvényei, a (9.21) alatti F_{ljm_j} függvények két mágneses momentum sajátfüggvényből, nevezetesen $Y_l^m \chi_{+\frac{1}{2}}$-ből és $Y_l^{m+1} \chi_{-\frac{1}{2}}$-ből kombinálódnak össze. Ezek a mágneses momentum z-komponensének két különböző értékéhez, a $-\mu_B(m+1)$, illetve a $-\mu_B m$ értékhez tartoznak. Következésképpen az F_{ljm_j} állapotban az elektronnak nincs meghatározott mágneses momentuma. Az atomokban mozgó elektronok esetében mindig ez a helyzet, mert az atom gömbszimmetriája miatt az impulzusmomentum mozgásállandó lesz és ezért az elektron állapotát egy F_{ljm_j} impulzusmomentum-sajátfüggvény írja le. Képezhetjük azonban a μ_z mágneses momentum kvantummechanikai várható értékét. F_{ljm_j} kifejezésében az előbb említett $Y_l^m \chi_{+\frac{1}{2}}$ és $Y_l^{m+1} \chi_{-\frac{1}{2}}$ mágneses momentum sajátfüggvények a C_+, illetve C_- együtthatóval szerepelnek, ezért a várható érték

$$\bar{\mu}_z = -\mu_B [\, |\, C_+ \,|^2 (m+1) + |\, C_- \,|^2 m].$$

A C_+ és C_- együtthatók (9.20) kifejezéseit ide beírva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_z &= -\mu_B \frac{(l+1)(2m+1)}{2l+1}, \quad \text{ha} \quad j = l + \frac{1}{2}, \\ \bar{\mu}_z &= -\mu_B \frac{l(2m+1)}{2l+1}, \quad \text{ha} \quad j = l - \frac{1}{2}. \end{aligned} \tag{23.10.4}$$

Megjegyezzük, hogy $\bar{\mu}_z$-nek fenti két képlete egyetlen formulába tömöríthető, ha bevezetjük a

$$g_L = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}}{2j(j+1)} \tag{23.10.5}$$

rövidítő jelölést, melyet az elektron *Landé-féle* g_L *faktorának* nevezzük. Ennek értéke

$$\begin{aligned} g_L &= \frac{2(l+1)}{2l+1}, \quad \text{ha} \quad j = l + \frac{1}{2}, \\ g_L &= \frac{2l}{2l+1}, \quad \text{ha} \quad j = l - \frac{1}{2}. \end{aligned} \tag{23.10.6}$$

A mágneses momentum várható értékét most már az egyszerű

$$\bar{\mu}_z = -\mu_B g_L m_j \tag{23.10.7}$$

alakban írhatjuk fel, ahol ismét $m_j = m + \frac{1}{2}$.

Hasonló gondolatmenettel állapíthatjuk meg az atommagokban mozgó protonok és neutronok mágneses momentumát is. Az egyedüli lényeges eltérés a mágneses momentum operátorának kifejezésében van. A pályamozgásból származó mágneses momentum protonok esetében (10.1) mintájára

$$\mu_N = \frac{e}{2M_0 c}\mathbf{N},$$

ahol M_0 a proton tömege. Neutronoknál a pályamozgásból nem származik mágneses tér, mert a neutron elektromosan semleges. Neutronokra tehát $\mu_N = 0$. A két esetet egyetlen képletben foglalhatjuk össze a τ töltéskvantumszám bevezetésével:

$$\mu_N = \frac{\tau e}{2M_0 c}\mathbf{N}, \tag{23.10.8}$$

ahol $\tau = 1$ protonokra és $\tau = 0$ neutronokra.

A spintől származó mágneses momentum sem olyan egyszerű alakú, mint az elektronokra érvényes $-\frac{e}{m_0 c}\mathbf{S}$ kifejezés. A mérések szerint a protonok saját mágneses momentuma $2{,}793\frac{e}{M_0 c}\mathbf{S}$, a neutronoké pedig $-1{,}913\frac{e}{M_0 c}\mathbf{S}$. (Kiemeljük, hogy az elektromosan semleges neutronnak is van saját mágneses tere.) A mágneses spinmomentum és az $\mathbf{S}$ spinvektor kapcsolata tehát

$$\mu_s = \frac{ge}{2M_0 c}\mathbf{S}, \tag{23.10.9}$$

ahol g a *giromágneses viszony*. Ennek értéke protonokra $g = 5{,}585$ és neutronokra $g = -3{,}827$.

Az eredő mágneses momentum a pálya- és spinmomentumok összege

$$\mu = \mu_N + \mu_s = \frac{e}{2M_0 c}(\tau\mathbf{N} + g\mathbf{S}). \tag{23.10.10}$$

A z-komponens sajátértékeit, éppúgy, mint elektronok esetében, a

$$\mu_z(Y_l^m\chi_{m_s}) = \frac{e}{2M_0 c}(\tau N_z + gS_z)(Y_l^m\chi_{m_s}) = \frac{eh}{4\pi M_0 c}(\tau m + gm_s)(Y_l^m\chi_{m_s})$$

sajátértékegyenletből olvashatjuk le. A sajátértékek képlete eszerint

$$\mu_z = \mu_M(\tau m + gm_s), \tag{23.10.11}$$

ahol

$$\mu_M = \frac{eh}{4\pi M_0 c} = 5{,}05 \cdot 10^{-24} \text{ gauss cm}^3,$$

az elektronok *Bohr*-magnetonának magfizikai megfelelője, az ún. *mag-magneton.*

Állapítsuk meg most μ_z várható értékét az F_{ljm_j} állapotban. Ugyanúgy járhatunk el, mint az előbbiekben az elektronoknál tettük. Felírjuk először a (10.11) sajátértékeket az $Y_l^m \chi_{+\frac{1}{2}}$ és az $Y_l^{m+1} \chi_{-\frac{1}{2}}$ álapotokra:

$$\mu_M \left(\tau m + \frac{1}{2} g\right), \qquad \mu_M \left(\tau m + \tau - \frac{1}{2} g\right).$$

Mivel $Y_l^m \chi_{+\frac{1}{2}}$ $|C_+|^2$ valószínűséggel fordul elő az F_{ljm_j} állapotban, $Y_l^{m+1} \chi_{-\frac{1}{2}}$ valószínűsége pedig $|C_-|^2$, ezért a várható érték

$$\bar{\mu}_z = \mu_M \left[|C_+|^2 \left(\tau m + \frac{1}{2} g\right) + |C_-|^2 \left(\tau m + \tau - \frac{1}{2} g\right)\right].$$

A végleges kifejezést C_+ és C_- képleteinek behelyettesítésével kapjuk. Bevezetve ismét az $m_j = m + \frac{1}{2}$ kvantumszámot, továbbá a (10.6) *Landé*-faktort, az eredmény a következő

$$\bar{\mu}_z = \mu_M [(2 - g_L)\tau + (g_L - 1)g] m_j. \tag{23.10.12}$$

Ez felírható a (9.7)-tel analóg

$$\bar{\mu}_z = \mu_M g_s m_j \tag{23.10.13}$$

alakban is, ahol a *Schmidt*-féle g_s-faktor a következő kifejezést jelenti:

$$g_s = (2 - g_L)\tau + (g_L - 1)g. \tag{23.10.14}$$

g_s részletes képleteit az alábbi táblázatban állítottuk össze.

A *Schmidt*-féle g_s-faktor

Részecske	Belső kvantumszám	g_s
proton	$j = l + \frac{1}{2}$	$g_s = \frac{j + 2{,}29}{j}$
proton	$j = l - \frac{1}{2}$	$g_s = \frac{j - 1{,}29}{j + 1}$
neutron	$j = l + \frac{1}{2}$	$g_s = -\frac{1{,}91}{j}$
neutron	$j = l - \frac{1}{2}$	$g_s = \frac{1{,}91}{j + 1}$

11. §. A háromdimenziós potenciálvölgy

A következőkben a radiális *Schrödinger*-egyenlet megoldásával fogunk foglalkozni. Háromdimenziós, gömbszimmetrikus potenciálvölgy esetén a potenciális energia

$$V(r) = -V_0, \text{ ha } r < a,$$

$$V(r) = 0, \quad \text{ha } r > a. \tag{23.11.1}$$

V_0 a potenciálvölgy mélysége és a a sugara. Kötött állapotok esetén $-V_0 < E < 0$. Ekkor a (8.17) radiális *Schrödinger*-egyenlet a következő:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left(\alpha^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R = 0, \quad \text{ha} \quad r < a,$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \left(\kappa^2 + \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R = 0, \quad \text{ha} \quad r > a. \tag{22.11.2}$$

Itt ismét bevezettük a (4.2)-vel megadott α és κ jelöléseket.

Vizsgáljuk először az $l = 0$ esetet, tehát az s állapotot. Ekkor a (11.2) differenciálegyenletek igen egyszerűek, az általános megoldást azonnal felírhatjuk

$$R(r) = \frac{1}{r}\left[b_1 \sin(\alpha r) + c_1 \cos(\alpha r)\right], \quad \text{ha} \quad r < a,$$

$$R(r) = \frac{1}{r}\left[b_2 e^{\kappa r} + c_2 e^{-\kappa r}\right], \quad \text{ha} \quad r > a.$$

Minthogy $R(r)$-nek el kell tűnnie az $r \to \infty$ esetben, ezért b_2 zérus kell, hogy legyen. Továbbá $R(r)$ nem válhat végtelenné az $r = 0$ helyen, ezért c_1 értéke is zérus. A b_1 és c_2 állandókat pedig úgy kell megválasztanunk, hogy mind R, mind dR/dr folytonosan változzon az $r = a$ helyen. A folytonosság feltétele

$$b_1 \sin(\alpha a) = c_2 e^{-\kappa a},$$

$$b_1 \alpha \cos(\alpha a) = -c_2 \kappa e^{-\kappa a}.$$

A két egyenletet elosztva egymással, a következő sajátértékfeltételhez jutunk

$$\kappa = -\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a). \tag{23.11.3}$$

Ez ugyanaz, mint (4.6) második egyenlete, következésképpen az energiasajátértékek ugyanazok, mint az egydimenziós potenciálvölgyben a páratlan sajátfüggvényekhez tartozó energiaértékek. Meghatározásuk a 68. ábrán bemutatott grafikus eljárással végezhető el.

Valamivel komplikáltabb sajátértékfeltételeket kapunk, ha az $l \neq 0$ eseteket vizsgáljuk. Ekkor a (11.2) differenciálegyenletek megoldásai a *Bessel*-függvényekkel fejezhetők ki. A potenciálvölgy belsejére, az $r < a$ esetre vonatkozó megoldás,

figyelembe véve, hogy a megoldásnak az $r = 0$ helyen is végesnek kell maradnia:

$$R(r) = br^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(\alpha r) . \tag{23.11.4}$$

Az $r > a$-ra vonatkozó megoldás pedig, figyelembe véve, hogy $R(r)$ zérushoz tart az $r \to \infty$ esetben

$$R(r) = cr^{-\frac{1}{2}} [J_{l+\frac{1}{2}}(i\kappa r) + iN_{l+\frac{1}{2}}(i\kappa r)] , \tag{23.11.5}$$

melyben i az imaginárius egység és $N_{l+\frac{1}{2}}$ a *Neumann*-függvény. A (11.4) és (11.5) függvényeknek és deriváltjaiknak folytonosan kell csatlakozniok az $r = a$ helyen. A folytonossági feltételekből egy összefüggést kapunk α és κ között, melyet kombinálva (4.13)-mal, egy transzcendens egyenletrendszerhez jutunk, melyből α, κ és így az E energiasajátértékek is kiszámíthatók.

12. §. Merev falú gömbbe zárt részecske

Legyen egy m_0 tömegpont egy a sugarú gömb belsejébe zárva. A gömbön belül a tömegpontra erő nem hat. A potenciál tehát

$$V(r) = 0, \qquad \text{ha } r < a,$$
$$V(r) = +\infty, \text{ ha } r > a. \tag{23.12.1}$$

A radiális *Schrödinger*-egyenlet a gömb belsejében

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left(\frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R = 0 . \tag{23.12.2}$$

Ez az egyenlet alakilag ugyanolyan, mint (11.2) első egyenlete, de most α helyébe a következő kifejezés kerül

$$\alpha = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E} . \tag{23.12.3}$$

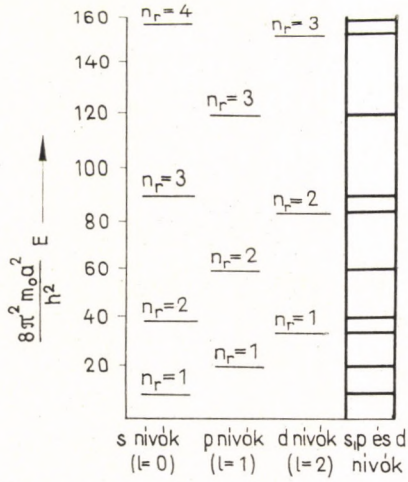
Az $R(r)$ megoldás (11.4) szerint

$$R(r) = br^{-\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(\alpha r) . \tag{23.12.4}$$

Mivel tömegpontunk nem hagyhatja el az a sugarú gömb belsejét, ezért a hullámfüggvény a gömb felszínén (és a gömbön kívül mindenütt) zérus kell, hogy legyen. Az $R(a) = 0$ határfeltételből a következő egyenletet kapjuk

$$J_{l+\frac{1}{2}}(\alpha a) = 0 . \tag{23.12.5}$$

Ebből a transzcendens egyenletből α és (12.3) figyelembevételével az E energiaértékek meghatározhatók. Egy adott l mellékkvantumszám esetén (12.5)-nek végtelen sok megoldása van. Ezek sorszámozására egy n_r radiális kvantumszámot vezethetünk be. A (12.5) egyenlet megoldásait néhány l és n_r értékre az alábbi táblázatban állítottuk össze. Az energiasajátértékeket a 75. ábra szemlélteti.



75. ábra. Merev gömbbe zárt részecske energiasajátértékei

αa értékei a legalacsonyabb l és n_r kvantumszámok esetén

n_r	$l=0$	$l=1$	$l=2$
1	3,142	4,495	5,764
2	6,284	7,72	9,10
3	9,425	10,90	12,32

13. §. A térbeli oszcillátor

A térbeli, háromdimenziós oszcillátor potenciálját (3.3) mintájára írhatjuk fel, de most az x távolság helyébe az erőcentrumtól mért r távolság kerül. A potenciál tehát

$$V(r) = 2\pi^2 m_0 \nu^2 r^2. \tag{23.13.1}$$

Ezt beírva a radiális *Schrödinger*-egyenletbe, kapjuk, hogy

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[\frac{8\pi^2 m_0 E}{h^2} - \frac{16\pi^4 m_0^2 \nu^2}{h^2} r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0. \tag{23.13.2}$$

Vezessük be ismét a (3.5) alatti rövidítő jelöléseket, majd R-t vegyük fel a következő alakban

$$R(r) = r^l e^{-\frac{1}{2}\alpha r^2} v(r). \tag{23.13.3}$$

A (13.2) differenciálegyenlet ezen behelyettesítések után a következőképpen alakul

$$\frac{d^2v}{dr^2} + 2\left(\frac{l+1}{r} - \alpha r\right)\frac{dv}{dr} - \left[2\alpha\left(l+\frac{3}{2}\right) - \lambda\right] v = 0. \tag{23.13.4}$$

Ezek után térjünk át az r változóról a $t = \alpha r^2$ új változóra. A t szerinti differenciálást rövidség kedvéért vesszővel jelölve, kapjuk, hogy

$$tv''(t) + \left(l + \frac{3}{2} - t\right)v'(t) - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{\lambda}{2\alpha}\right)v(t) = 0 . \tag{23.13.5}$$

Ezt az egyenletet a 3. §-ban megismert polinommódszerrel oldjuk meg. Keressük v-t egy n_r-ed fokú polinom alakjában

$$v(t) = \sum_{p=0}^{n_r} a_p t^p . \tag{23.13.6}$$

Helyettesítsük ezt be (13.5)-be és az így kapott egyenletet rendezzük t hatványai szerint

$$\sum_{p=0}^{n_r-1}\left[(p+1)\left(p + l + \frac{3}{2}\right)a_{p+1} - \frac{1}{2}\left(2p + l + \frac{3}{2} - \frac{\lambda}{2\alpha}\right)a_p\right]t^p -$$

$$- \frac{1}{2}\left[2n_r + l + \frac{3}{2} - \frac{\lambda}{2\alpha}\right]a_{n_r}t^{n_r} = 0 . \tag{23.13.7}$$

Ez az egyenlet akkor teljesül t minden értékére, ha t egyes hatványainak együtthatói külön-külön nullával egyenlők. t^p együtthatója a $0 \leq p \leq n_r - 1$ esetekben zérus, ha

$$a_{p+1} = \frac{2p + l + 3/2 - \lambda/2\alpha}{2(p+1)(p + l + 3/2)}\, a_p . \tag{23.13.8}$$

Ez a képlet lehetővé teszi a polinom együtthatóinak szukcesszív meghatározását. (a_0 önkényesen választható, illetőleg ezt a normálási feltételből határozatjuk meg.) Mivel (13.7)-ben t^{n_r} együtthatójának is zérusnak kell lennie, ezért

$$\frac{\lambda}{2\alpha} = 2n_r + l + \frac{3}{2} \tag{23.13.9}$$

kell, hogy legyen. A (13.5) egyenlet tehát csak akkor elégíthető ki egy véges polinommal, ha az egyenletben szereplő $\lambda/2\alpha$ mennyiség egy (13.9) alakú szám, melyben az l mellékkvantumszám és n_r szintén egy nemnegatív egész szám, melyet *radiális kvantumszám*nak nevezünk. Ha (13.9)-be λ és α kifejezéseit behelyettesítjük, kapjuk, hogy

$$E = \left(2n_r + l + \frac{3}{2}\right)h\nu . \tag{23.13.10}$$

Az

$$n = 2n_r + l \tag{23.13.11}$$

definícióval bevezetve az n főkvantumszámot, E kifejezése a következő lesz

$$E = \left(n + \frac{3}{2}\right)h\nu . \tag{23.13.12}$$

Az alapállapot energiáját $n = 0$ esetén kapjuk:

$$E_0 = \frac{3}{2} h\nu .$$

Ez háromszor akkora, mint a lineáris oszcillátor esetében. Az n-edik nívó gerjesztési energiája,

$$E_n - E_0 = nh\nu,$$

$h\nu$ egész számú többszörösével egyezik meg. A (13.11) alatt bevezetett n főkvantumszám minden páros vagy páratlan értéket felvehet, aszerint, hogy l páros vagy pedig páratlan. Egy adott n érték esetén még az n_r és l kvantumszámok többféle kombinációja is megvalósulhat, tehát egy n energiához több sajátfüggvény tartozik. (Az energianívók degeneráltak.) Ha n páros szám, úgy l 0-tól egészen n-ig az összes páros értéket felveheti, ezek száma $\frac{n}{2} + 1$. Minden lehetséges l értékhez még $2l + 1$ különböző sajátfüggvény tartozik, a mágneses kvantumszám $0, \pm 1, \ldots, \pm l$ értékeinek megfelelően. Egy páros n-hez tehát összesen

$$\sum_0^n (2l + 1) = \frac{(n + 1)(n + 2)}{2}$$

számú sajátfüggvény tartozik. (A szummázást csak a páros l-ekre kell elvégezni!) Hasonló eredményre jutunk akkor is, ha n páratlan szám. Ekkor l 1-től n-ig a páratlan számokon futhat végig, az összes sajátfüggvény száma tehát

$$\sum_1^n (2l + 1) = \frac{(n + 1)(n + 2)}{2} .$$

Példaként vizsgáljuk meg részletesen az $n = 3$ esetet. A (13.11) szabály szerint most két lehetőségünk van: vagy $n_r = 0$ és $l = 3$, vagy pedig $n_r = 1$ és $l = 1$. Az első esetben a v polinom nulladfokú, tehát $v = 1$. A radiális hullámfüggvény (13.3) szerint $R = r^3 e^{-\alpha \frac{r^2}{2}}$. A teljes ψ hullámfüggvényt pedig úgy kapjuk meg, ha R-t kiegészítjük még az Y_l^m gömbfüggvényekkel. $l = 3$ esetén hét ilyen gömbfüggvény van, ezek konkrét alakját a 8. §-ban már megadtuk. A második esetben, amikor is $n_r = l = 1$, a v polinom együtthatóit a (13.8) rekurziós formulából állapíthatjuk meg. Kapjuk, hogy

$$v = 1 - \frac{2}{5} t = 1 - \frac{2}{5} \alpha r^2 .$$

A radiális hullámfüggvény pedig

$$R(r) = r \left(1 - \frac{2}{5} \alpha r^2\right) e^{-\alpha \frac{r^2}{2}} .$$

Ezt még meg kell szoroznunk az Y_l^m gömbfüggvények valamelyikével, hogy egy teljes ψ hullámfüggvényhez jussunk. A gömbfüggvények száma most három. Az

így kapott tíz ψ függvényt az x, y és z derékszögű koordinátákkal kifejezve a következő táblázatban állítottuk össze. Az egyszerűség kedvéért a normálási állandókat elhagytuk.

A térbeli oszcillátor sajátfüggvényei $n = 3$ esetén

n_r	l	m	ψ
0	3	0	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} z(2z^2 - 3x^2 - 3y^2)$
0	3	± 1	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} (x \pm iy)(4z^2 - x^2 - y^2)$
0	3	± 2	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} (x \pm iy)^2 z$
0	3	± 3	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} (x \pm iy)^3$
1	1	0	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} \left(1 - \frac{2}{5}\alpha r^2\right) z$
1	1	± 1	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} \left(1 - \frac{2}{5}\alpha r^2\right)(x \pm iy)$

E tíz függvény bármelyike az $E_3 = h\nu\left(3 + \frac{3}{2}\right)$ sajátértékhez tartozik. Természetesen ugyanehhez az energiaértékhez tartozik e függvények tetszés szerinti lineárkombinációja is.

A térbeli oszcillátor fentiekben bemutatott elméletében kihasználtuk a potenciál gömbszimmetriáját és a problémát a térbeli polárkoordinátarendszerben oldottuk meg. Egy másik megoldási módszer is lehetséges, melyben a *Schrödinger*-egyenletet a derékszögű *Descartes*-koordinátarendszerben írjuk fel. Az előzőekben is használt α és λ rövidítések bevezetése után a *Schrödinger*-egyenlet a következő alakot ölti

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + [\lambda - \alpha(x^2 + y^2 + z^2)]\,\psi = 0\,. \qquad (23.13.13)$$

Vegyük fel ψ-t a következő alakban

$$\psi(x, y, z) = f_1(x) f_2(y) f_3(z) \qquad (23.13.14)$$

és helyettesítsünk be a (13.13) egyenletbe. ψ-vel való osztás után kapjuk

$$\frac{1}{f_1(x)}\left(\frac{d^2 f_1}{dx^2} - \alpha x^2 f_1(x)\right) + \frac{1}{f_2(y)}\left(\frac{d^2 f_2}{dy^2} - \alpha y^2 f_2(y)\right) +$$

$$+ \frac{1}{f_3(z)}\left(\frac{d^2 f_3}{dz^2} - \alpha z^2 f_3(z)\right) + \lambda = 0\,.$$

Ez az egyenlet csak úgy állhat fenn az x, y és z változók minden értékére, ha az egyes tagok külön-külön konstansok. Tehát

$$\frac{d^2f_1}{dx^2} + (\lambda_1 - \alpha x^2)f_1(x) = 0\,,$$

$$\frac{d^2f_2}{dy^2} + (\lambda_2 - \alpha y^2)f_2(y) = 0\,, \qquad (23.13.15)$$

$$\frac{d^2f_3}{dz^2} + (\lambda_3 - \alpha z^2)f_3(z) = 0\,,$$

ahol

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = \lambda. \qquad (23.13.16)$$

A (13.15) sajátérték-egyenletek mindegyike a lineáris oszcillátor egyenletével, (3.6)-tal azonos szerkezetű. A megoldásaikat tehát (3.21)- és (3.25)-ből felírhatjuk:

$$\lambda_1 = (2n_1 + 1)\,\alpha\,, \qquad f_1(x) = A_{n1}e^{-\alpha\frac{x^2}{2}}H_{n1}(\sqrt{\alpha}x)\,,$$

$$\lambda_2 = (2n_2 + 1)\,\alpha\,, \qquad f_2(y) = A_{n2}e^{-\alpha\frac{y^2}{2}}H_{n2}(\sqrt{\alpha}y)\,,$$

$$\lambda_3 = (2n_3 + 1)\,\alpha\,, \qquad f_3(z) = A_{n3}e^{-\alpha\frac{z^2}{2}}H_{n3}(\sqrt{\alpha}z)\,.$$

Ezek után az oszcillátor E energiáját és a ψ hullámfüggvényt (13.16), ill. (13.14) szerint állapíthatjuk meg:

$$E = h\nu\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right) = h\nu\left(n + \frac{3}{2}\right), \qquad (23.13.17)$$

$$\psi = Ae^{-\alpha\frac{r^2}{2}}H_{n1}(\sqrt{\alpha}x)H_{n2}(\sqrt{\alpha}y)H_{n3}(\sqrt{\alpha}z)\,. \qquad (23.13.18)$$

Az energiára kapott kifejezés megegyezik (13.12)-vel, de a főkvantumszám most $n = n_1 + n_2 + n_3$ alakban adódik. Egy adott n főkvantumszámhoz annyi ψ hullámfüggvény tartozik, ahányféleképpen az n számot az n_1, n_2 és n_3 nem negatív egész számokból elő tudjuk állítani, tehát

$$\frac{(n+1)(n+2)}{2}\,.$$

(Ugyanerre az eredményre jutottunk a polárkoordinátás tárgyaláskor is.) Az $n = 3$ főkvantumszámhoz tartozó (13.18) sajátfüggvényeket az alábbi táblázatban állítottuk össze. (A normálási állandót most is elhagytuk.)

A két utolsó táblázat ψ sajátfüggvényei eltérnek egymástól. Ez azt jelenti, hogy az előbbi táblázat függvényei sajátfüggvényei ugyan az oszcillátor energia-operátorának, de nem sajátfüggvényei a pályaimpulzusmomentumnak. Az energia és egyben impulzusmomentum-sajátfüggvényeket a 300. oldalon levő táblázat

A térbeli oszcillátor sajátfüggvényei $n = 3$ esetén

n_1	n_2	n_3	ψ
0	0	3	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} z(2\alpha z^2 - 3)$
0	1	2	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} y(2\alpha z^2 - 1)$
0	2	1	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} z(2\alpha y^2 - 1)$
0	3	0	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} y(2\alpha y^2 - 3)$
1	0	2	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} x(2\alpha z^2 - 1)$
1	1	1	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} xyz$
1	2	0	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} x(2\alpha y^2 - 1)$
2	0	1	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} z(2\alpha x^2 - 1)$
2	1	0	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} y(2\alpha x^2 - 1)$
3	0	0	$e^{-\alpha\frac{r^2}{2}} x(2\alpha x^2 - 3)$

adja. meg. Természetesen a két táblázat függvényei egymásból lineárkombinációval előállíthatók. Például az $n_r = 1$, $l = 1$ és $m = 0$ kvantumszámokhoz tartozó megoldás a fenti táblázat $\psi_{n_1 n_2 n_3}$ függvényeivel a következőképpen fejezhető ki:

$$\psi_{(n_r=1,\, l=1,\, m=0)} = -\frac{1}{5}(\psi_{003} + \psi_{021} + \psi_{201}).$$

14. §. A hidrogénatom

Mint tudjuk, a H-atom az atommagból (protonból) és egy elektronból áll. A magot a következőkben nyugvónak tekintjük, ami ekvivalens azzal, hogy tömegét az elektron tömegéhez viszonyítva végtelen nagynak vesszük. Válasszuk a mag töltését Ze-nek, akkor egyszerre tárgyalhatjuk a H-atomot és a He^+, Li^{++}, Be^{+++}, ... ionokat, ha Z-t rendre 1, 2, 3, ...-nak választjuk.

A potenciális energiára tehát nyerjük, hogy

$$V(r) = +\frac{Ze}{r}(-e) = -\frac{Ze^2}{r}, \qquad (23.14.1)$$

ahol $-e$ az elektron töltése, r pedig a magtól való távolsága. A radiális *Schrödinger*-egyenlet a következő:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left(\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}E + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}\frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R = 0. \qquad (23.14.2)$$

Vezessük be a következő egyszerűsítő jelöléseket

$$A = \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E, \qquad B = \frac{4\pi^2 m_0 Z e^2}{h^2}, \qquad C = -l(l+1). \tag{23.14.3}$$

Ekkor

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left(A + \frac{2B}{r} + \frac{C}{r^2}\right) R = 0. \tag{23.14.4}$$

A megoldások pozitív és negatív E, vagyis A esetében lényegesen különböznek egymástól, amit nagy r-ek esetére azonnal láthatunk az egyenlet alakjából. Nagy r-ek esetében ugyanis az egyenlet a következő alakú

$$\frac{d^2R}{dr^2} + AR = 0. \tag{23.14.5}$$

Aszerint, hogy A-nak előjele pozitív vagy negatív, az R függvény r-nek oszcilláló vagy exponenciális függvénye, ami lényeges különbséget jelent. Mi a kötött állapotokkal, tehát a negatív E-nek, vagyis A-nak megfelelő esettel foglalkozunk részletesen.

Vezessük be A számára a következő jelölést

$$A = -\frac{1}{r_0^2}, \tag{23.14.6}$$

ahol r_0 egy meghatározott hossz. Ez megfelel annak, hogy A dimenziója [hossz]$^{-2}$, amint ez az egyenletből is közvetlenül látható. Az egyenletből ugyanis következik, hogy A dimenziója ugyanaz, mint C/r^2 dimenziója, mivel pedig C dimenzió nélküli szám, következik, hogy C/r^2 és így A dimenziója is [hossz]$^{-2}$. Vezessük be továbbá a ρ dimenzió nélküli mennyiséget a következőképpen

$$\rho = \frac{2r}{r_0}. \tag{23.14.7}$$

Az R számára nyert differenciálegyenletből ezekkel a formulákkal nyerjük, hogy

$$\left(\frac{2}{r_0}\right)^2 \frac{d^2R}{d\rho^2} + \left(\frac{2}{r_0}\right)^2 \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[-\frac{1}{r_0^2} + \frac{2}{r}\frac{2B}{\rho} + \left(\frac{2}{r_0}\right)^2 \frac{C}{\rho^2}\right] R = 0,$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{r_0 B}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] R = 0. \tag{23.14.8}$$

Innen következik, hogy az $r = \infty$, ill. $\rho = \infty$ esetre fennálló egyenlet a következő alakú

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} = \frac{1}{4} R. \tag{23.14.9}$$

Ennek megoldása egy állandó tényezőtől eltekintve $R = e^{\pm \frac{\varrho}{2}}$. Mivel a sajátfüggvénynek a végtelenben el kell tűnni, az exponensben csak a negatív előjel jöhet számításba, tehát $R = e^{-\frac{\varrho}{2}}$.

A véges r-ekre, ill. ρ-kra fennálló egyenlet megoldását a következő alakban vesszük fel

$$R = e^{-\frac{\varrho}{2}} u(\rho), \tag{23.14.10}$$

amelyből

$$\frac{dR}{d\rho} = \left(-\frac{1}{2}u + \frac{du}{d\rho}\right) e^{-\frac{\varrho}{2}}, \quad \frac{d^2R}{d\rho^2} = \left(\frac{1}{4}u - \frac{du}{d\rho} + \frac{d^2u}{d\rho^2}\right) e^{-\frac{\varrho}{2}}.$$

Ezeket a kifejezéseket helyettesítve a fenti egyenletbe és $e^{-\frac{\varrho}{2}}$-vel osztva

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right)\frac{du}{d\rho} + \left[(r_0 B - 1)\frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] u = 0. \tag{23.14.11}$$

Ez egy differenciálegyenlet u számára, amelynél a $\rho = 0$ hely, amint látható, szinguláris. A megoldást hatványsorral akarjuk előállítani. A differenciálegyenletek elmélete szerint a fenti esetben, mivel a $\rho = 0$ hely pólus, u-t egy olyan hatványsorral állíthatjuk elő, amelynél a legalacsonyabb rendű tag egy állandó tényezőtől eltekintve ρ^l. Tehát u-t a következőképpen vesszük fel

$$u = \rho^l w(\rho) = \rho^l (a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 + \ldots),$$

vagyis

$$u = \sum_{p=1}^{\infty} a_p \rho^{p+l}. \tag{23.14.12}$$

Helyettesítsük be u-t az u számára nyert differenciálegyenletbe. Evégből számítsuk ki a következő mennyiségeket: $\frac{u}{\rho}$, $\frac{u}{\rho^2}$, $\frac{du}{d\rho}$, $\frac{d^2u}{d\rho^2}$ és $\frac{1}{\rho}\frac{du}{d\rho}$.

$$\frac{u}{\rho} = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \rho^{p+l-1},$$

$$\frac{u}{\rho^2} = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \rho^{p+l-2},$$

$$\frac{du}{d\rho} = \sum_{p=0}^{\infty} (p+l) a_p \rho^{p+l-1},$$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \sum_{p=0}^{\infty} (p+l)(p+l-1) a_p \rho^{p+l-2},$$

$$\frac{1}{\rho}\frac{du}{d\rho} = \sum_{p=0}^{\infty} (p+l) a_p \rho^{p+l-2}.$$

Tehát a helyettesítés eredménye, ha a megfelelő tagokat rögtön összevonjuk

$$\sum_{p=0}^{\infty} [(p+l+1)(p+l)a_{p+1} + 2(p+l+1)a_{p+1} - (p+l)a_p + \\ + (r_0B - 1)a_p - l(l+1)a_{p+1}] \rho^{p+l-1} = 0. \qquad (23.14.13)$$

Ez csak úgy állhat fenn minden ρ-ra, ha ρ egyes hatványainak együtthatói eltűnnek, tehát

$$(p+l+1)(p+l)a_{p+1} + 2(p+l+1)a_{p+1} - (p+l)a_p + \\ + (r_0B - 1)a_p - l(l+1)a_{p+1} = 0. \qquad (23.14.14)$$

Rendezve ezt a kifejezést, az a_p együtthatók meghatározására a következő kéttagú rekurziós formulához jutunk

$$[(p+l+1)(p+l+2) - l(l+1)]a_{p+1} = \\ = (p+l+1-r_0B)a_p, \qquad (23.14.15)$$

amely formula az a_p koefficienseket, vagyis u-t, egy állandó tényezőtől eltekintve, teljesen mghatározza. Hogy R a végtelenben eltűnjön, azt úgy biztosíthatjuk, hogy nem engedjük p-t végtelenné válni, vagyis megköveteljük, hogy u polinom legyen. (Hogy ez a feltétel nemcsak elegendő, hanem szükséges is, azt itt nem bizonyítjuk be.) Mint a fenti rekurziós formulából láthatjuk, $a_{p+1}, a_{p+2}, a_{p+3}, \ldots$ mind eltűnnek, ha $a_p = 0$. Ha tehát azt akarjuk, hogy az $a_{n_r+1}, a_{n_r+2}, \ldots$ tagok eltűnjenek, akkor kell, hogy

$$n_r + l + 1 - r_0B = 0 \qquad (23.14.16)$$

legyen. Vagyis

$$r_0B = n_r + l + 1 = n. \qquad (23.14.17)$$

Tehát

$$r_0^2B^2 = -\frac{B^2}{A} = (n_r + l + 1)^2 = n^2,$$

$$-\frac{\left(\frac{4\pi^2 m_0 Ze^2}{h^2}\right)^2}{\frac{8\pi^2 m_0 E}{h^2}} = -\frac{2\pi^2 m_0 Z^2 e^4}{h^2 E} = (n_r + l + 1)^2 = n^2.$$

Ha E helyébe E_n-et írunk, nyerjük, hogy

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m_0 Z^2 e^4}{h^2} \cdot \frac{1}{(n_r + l + 1)^2} = -\frac{2\pi^2 m_0 Z^2 e^4}{h^2} \frac{1}{n^2}. \qquad (23.14.18)$$

Ezek az E_n értékek pedig $Z = 1$-re éppen a H energianívói.

Mielőtt a megoldás részletes diszkussziójára rátérnénk, foglalkoznunk kell még R-rel. Mint láttuk,

$$R = e^{-\frac{\varrho}{2}} \rho^l w(\rho) = e^{-\frac{\varrho}{2}} u(\rho),$$

$$u(\rho) = \rho^l w(\rho).$$

Ha az u differenciálegyenletébe u-nak ezt az alakját behelyettesítjük és figyelembe vesszük, hogy $r_0 B = n$, akkor egy differenciálegyenletet kapunk w-re, amelyet egyszerű számításokkal a következő alakra hozhatunk:

$$\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + [2(l+1) - \rho] \frac{dw}{d\rho} + (n + l + 1) w = 0 . \tag{23.14.19}$$

Ez az ún. $(n + l)$-edik *Laguerre*-féle polinom $(2l + 1)$-edik deriváltjának differenciálegyenlete. A k-adik *Laguerre*-féle polinom a következő

$$L_k(\rho) = e^{\varrho} \frac{d^k}{d\rho^k} (\rho^k e^{-\varrho}) . \tag{23.14.20}$$

Mint említettük, w az $(n + l)$-edik *Laguerre*-féle polinom $(2l + 1)$-edik deriváltja, tehát

$$w = \frac{d^{2l+1}}{d\rho^{2l+1}} L_{n+l}(\rho) = \frac{d^{2l+1}}{d\rho^{2l+1}} \left[e^{\varrho} \frac{d^{n+l}}{d\rho^{n+l}} (\rho^{n+l} e^{-\varrho}) \right] . \tag{23.14.21}$$

Ezt röviden $L_{n+l}^{(2l+1)}$-gyel jelöljük. Így tehát arra jutunk, hogy

$$R = R_{nl} = e^{-\frac{\varrho}{2}} \rho^l L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho) . \tag{23.14.22}$$

A teljes sajátfüggvény pedig

$$\psi_{nlm} = N e^{-\frac{\varrho}{2}} \rho^l L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho) Y_l^m(\vartheta, \phi) , \tag{23.14.23}$$

ahol N egy állandó, az ún. normálási tényező, amelyet a normálási feltételekből lehet meghatározni. N-re azt kapjuk, hogy

$$N = \sqrt{\left(\frac{2Z}{n a_{\mathrm{H}}}\right)^3 \frac{(n - l - 1)!}{2n[(n + l)!]^3}} , \tag{23.14.24}$$

ahol

$$a_{\mathrm{H}} = \frac{h^2}{4\pi^2 m_0 e^2} ,$$

vagyis a_{H} az első *Bohr*-féle H-rádiusz, amelyet atomi hosszegység gyanánt a kvantummechanikában is használni szokás.

Ezek után állapítsuk meg, hogy egy megadott energiasajátértékhez, vagyis egy megadott n-hez hány különböző sajátfüggvény tartozik. Mivel, mint láttuk,

$$n = n_r + l + 1,$$

l maximális értéke megadott n-nél $n-1$, minimális értéke pedig zérus. Tehát egy megadott n esetében l felvehet n számú különböző értéket. Mindegyik l értékhez még m következő értékei tartoznak: $-l$, $-(l+1), \ldots, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, \ldots, +(l-1), +l$, ami összesen $2l+1$ számú érték. Tehát egy megadott E_n-hez, ill. n-hez tartozó különböző, vagyis egymástól lineárisan független sajátfüggvények száma

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = [1+2(n-1)+1]\frac{n}{2} = n^2. \qquad (23.14.25)$$

Tehát mindegyik E_n energiájú állapot n^2-1-szeresen degenerált.

Megemlítjük még, hogy számításaink nem tartalmazzák a spint. Ha azt is figyelembe vesszük és az energianívók finomstruktúrájától eltekintünk, akkor mindegyik E_n energianívóhoz $2n^2$ különböző sajátfüggvény tartozik.

Ezek után rátérünk a negatív E energiaállapotoknak megfelelő megoldások diszkussziójára. Először is a kvantumszámokkal és azok jelentésével foglalkozunk.

Az E_n energia csak n-től függ, tehát n a főkvantumszám. Mint láttuk,

$$n = n_r + l + 1.$$

Innen látható, hogy n_r felel meg a *Bohr*-elméletben a radiális, l pedig a mellékkvantumszámnak. l minimális értéke zérus, maximális értéke pedig megadott n esetében $n-1$. Vagyis egy megadott n esetében l a $0, 1, 2, \ldots, n-1$ értékeket veheti fel. A mellékkvantumszámot már a *Bohr*-féle elméletben is bevezettük, de megindokolni ott az emélet alapján nem sikerült. l-nek a *Bohr*-féle elméletbe való bevezetése úgy történt, hogy a második kvantumfeltételből adódó k azimutális kvantumszámot, amely az $1, 2, 3, \ldots, n$ értékeket veheti fel, hivatkozással különböző tapasztalati okokra, 1-gyel redukáltuk, ami az $l = k-1$ kvantumszámot eredményezte. Itt ezzel szemben l-nek a tapasztalattal megegyező értékei közvetlenül az elméletből adódnak.

Foglalkozzunk ezek után az n_r kvantumszámmal. A sajátfüggvénynek r-től, ill. ρ-tól függő részében szerepel az

$$L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho)$$

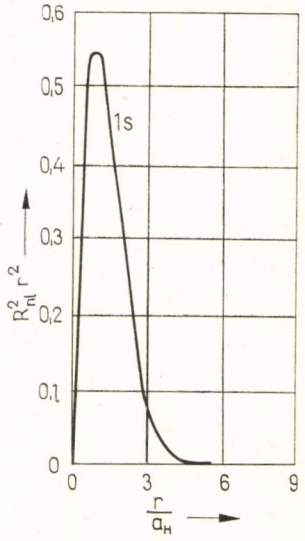
polinom, amelynek fokszáma

$$n + l - (2l+1) = n - l - 1 = n_r. \qquad (23.14.26)$$

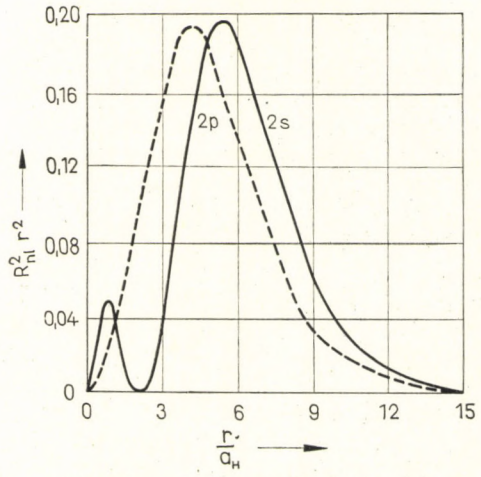
Egy ilyen polinomnak általában n_r zérushelye van. Az $L_{n+l}^{(2l+1)}$ polinomokról kimutatható, hogy a zérushelyek közül egyik sem eshet össze egy másikkal. Tehát n_r számú gömbfelület létezik, amelyeken az n, l kvantumszámoknak megfelelő R ill. ψ állandóan zérus. Tehát n_r, vagyis a régi radiális kvantumszám azoknak a gömbfelületeknek száma, amelyeken ψ állandóan zérus. Vagy ha áttérünk az idő-

től függő sajátfüggvényre, $\Psi = \psi e^{-\frac{2\pi i}{h} E_n t}$ -re, akkor azt mondhatjuk, hogy n, a Ψ hullám csomófelületeinek száma. Hasonló jelentése van a többi kvantumszámnak is.

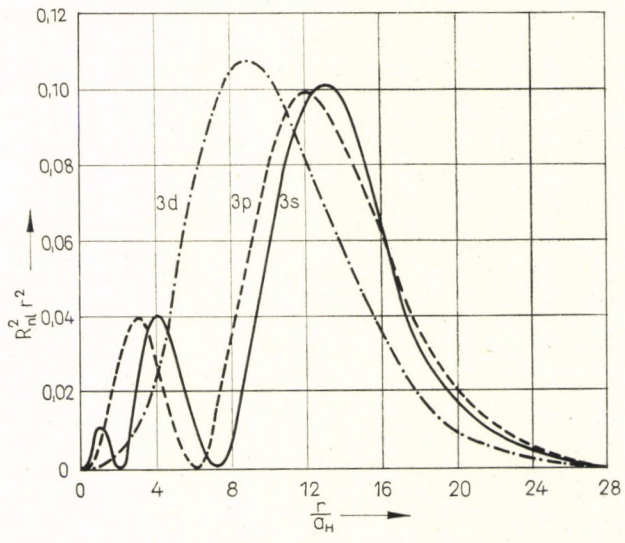
A sajátfüggvény ϑ-tól való függését a P_l^m adja, amely cos ϑ és sin ϑ-nak l-edfokú polinomja. A csomófelületek itt kúpok, melyeknek közös tengelye a z-ten-



76/a ábra A H-atom 1*s* elektronjainak radiális valószínűségi eloszlása



76/b ábra. A H-atom 2*s* és 2*p* elektronjainak radiális valószínűségi eloszlása



76/c ábra. A H-atom 3*s*, 3*p* és 3*d* elektronjainak radiális valószínűségi eloszlása

gely. A kúpok száma egyenlő l-lel. A sajátfüggvénynek ϕ-től való függését cos $m\phi$ és sin $m\phi$ adja. Az m tehát a z-tengelyen átmenő csomósíkok száma.

A következőkben még röviden a H-atomra kapott hullámmechanikai eredmények értelmezésével kell foglalkoznunk. Mint a tárgyalás folyamán láttuk, a *Bohr*-féle modellszerű elképzelés, az elektronpályák fogalma, sehol sem szerepel. Itt már csak annak a valószínűségét tudjuk megadni, hogy az elektron egy bizonyos térfogatelemben jelen van. Mint tudjuk, annak a valószínűségét, hogy az elektron egy dv térfogatelemben jelen van, $\psi^*\psi dv$ adja. Különösen szemléletes képet kapunk egy stacionárius állapotban ennek a valószínűségnek r-től való függéséről, ha a $\psi^*\psi dv$ kifejezést ϑ-ra és ϕ-re integráljuk, amidőn $R_{nl}^2 r^2 dr$-et kapunk eredményül. Az $R_{nl}^2 r^2$ radiális eloszlásokat több állapotra a 76. ábrák mutatják. Ezek a valószínűségi eloszlások egy-egy főmaximummal bírnak. Érdekes, hogy ezeknek a maximális valószínűségű helyeknek megfelelő r-ek többé-kevésbé megegyeznek a megfelelő *Bohr*-féle körpályák rádiuszával. Az $R_{nl}^2 r^2$ a valószínűségi eloszlásnak csak az r-től való függését adja. Azt, hogy a mag körül valamely dv térfogatelemben milyen valószínűséggel található az elektron, a

$$\psi^*\psi dv = \left(\frac{2Z}{na_H}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \frac{2l+1}{4\pi} \frac{[(l-m)!}{(l+m)!} \left[\left(\frac{2Zr}{na_H}\right)^l \times \right.$$

$$\left. \times L_{n+l}^{(2l+1)}\left(\frac{2Zr}{na_H}\right) P_l^m(\cos\vartheta)\right]^2 dv$$

kifejezés adja meg, amely ϑ-től is függ, de nem függ ϕ-től, vagyis ez a kifejezés olyan eloszlást ad, amely a z-tengely körül szimmetrikus.

Végül megemlítjük még, hogy a H-atomra vonatkozó tárgyalásunk bizonyos fokig közelítő jellegű, ugyanis nem ad számot a H-atom spektrumának finomstruktúrájáról és a spinről. A spektrum finomstruktúrájáról és a spinről az ún. *Dirac*-féle elmélet, a relativisztikus kvantummechanika tud felvilágosítást adni, amelynek alapja az ún. *Dirac*-féle egyenlet. Ez, szemben a *Schrödinger*-egyenlettel, relativisztikusan invariáns és a *Schrödinger*-egyenlet általánosításának tekinthető.

15. §. A Kratzer-féle potenciál

Oldjuk meg a *Schrödinger*-egyenletet a következő, *Kratzer*-típusú potenciál esetében

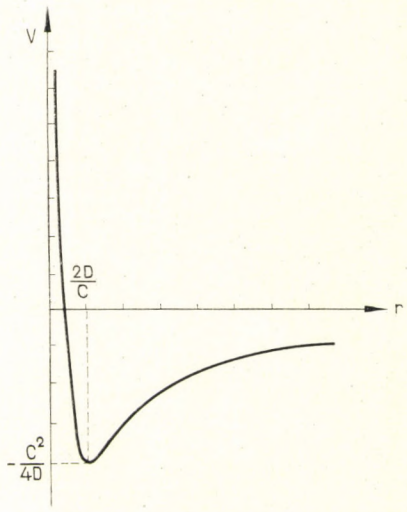
$$V(r) = -\frac{C}{r} + \frac{D}{r^2}. \qquad (23.15.1)$$

melyben C és D pozitív konstansok. Ilyen potenciállal írható le, jó közelítéssel, egy kétatomos molekula két atomjának kölcsönhatása. A potenciálgörbét a 77. ábra szemlélteti. A görbe mélypontja nyilván a molekula egyensúlyi helyzetének felel meg. A radiális *Schrödinger*-egyenletbe a következő rövidítő jelöléseket

vezetjük be:

$$u = rR(r), \qquad \rho = \frac{C}{2D} r,$$

$$\gamma^2 = \frac{8\pi^2 m_0 D}{h^2}, \qquad \kappa^2 = -\frac{32\pi^2 m_0 D^2}{h^2 C^2} E. \tag{23.15.2}$$



77. ábra. A Kratzer-féle potenciál

Ily módon a következő egyenletet kapjuk

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(-\kappa^2 + \frac{2\gamma^2}{\rho} - \frac{\gamma^2 + l(l+1)}{\rho^2}\right) u = 0. \tag{23.15.3}$$

Ezt az egyenletet hasonlóképpen oldhatjuk meg, mint ahogyan az oszcillátor és a H-atom esetében eljártunk. $\rho \to \infty$ esetén az u függvény aszimptotikus alakja nyilván $u = e^{-\kappa\varrho}$. A $\rho \to 0$ esetben pedig $u = \rho^\lambda$ alakban keresve a megoldást, a λ indexre (15.3)-ból a következő egyenletet kapjuk

$$\lambda(\lambda - 1) = \gamma^2 + l(l + 1).$$

Ez λ-ra egy másodfokú egyenlet, melynek azonban csak egy pozitív gyöke van éspedig

$$\lambda = \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}. \tag{23.15.4}$$

Ezek után keressük (15.3) pontos megoldását a következő alakban

$$u(\rho) = \rho^\lambda e^{-\kappa\varrho} v(\rho), \tag{23.15.5}$$

ahol $v(\rho)$ egy polinom. Ezt a kifejezést (15.3)-ba helyettesítve, a következő differenciálegyenletet kapjuk

$$\rho \frac{d^2v}{d\rho^2} + 2(\lambda - \kappa\rho) \frac{dv}{d\rho} + 2(\gamma^2 - \lambda\kappa)\, v = 0\,. \tag{23.15.6}$$

Ez az egyenlet szerkezetileg igen rokon a térbeli oszcillátor problémájánál vizsgált (13.5) egyenlettel. Valóban, bevezetve a $t = 2\kappa\rho$ változót, (15.6) a következő alakot ölti:

$$t \frac{d^2v}{dt^2} + (2\lambda - t) \frac{dv}{dt} + \left(\frac{\gamma^2}{\kappa} - \lambda\right) v(t) = 0\,. \tag{23.15.7}$$

Ez az egyenlet azonos szerkezetű, mint (13.5). Mint a 13. §-ban láttuk, ennek az egyenletnek akkor van polinommegoldása, ha az utolsó tagban v együtthatója egy nemnegatív egész számmal, n_r-el egyezik meg. (n_r lesz a polinom fokszáma.) A sajátértékfeltétel esetünkben tehát

$$\frac{\gamma^2}{\kappa} - \lambda = n_r,$$

vagy

$$\kappa = \frac{\gamma^2}{n_r + \lambda}\,. \tag{23.15.8}$$

Ebből az E energiasajátérték

$$E = -\frac{2\pi^2 m_0 C^2}{h^2} \frac{\kappa^2}{\gamma^4} = -\frac{2\pi^2 m_0 C^2}{h^2} \frac{1}{\left[n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}\right]^2}\,. \tag{23.15.9}$$

Érdemes megvizsgálni az energianívók alakulását a $\gamma \ll 1$ és $\gamma \gg 1$ esetekben. Az első esetben fejtsük sorba E-t γ^2 hatványai szerint. A hatványsor első két tagját kiírva kapjuk, hogy

$$E = -\frac{2\pi^2 m_0 C^2}{h^2} \frac{1}{n^2} \left\{1 - \frac{\gamma^2}{n(2l+1)} + \ldots\right\}, \tag{23.15.10}$$

ahol $n = n_r + l + 1$. A $\gamma = 0$ határesetben az energianívók a H-atom nívószerkezetének, (14.18)-nak felelnek meg. Ez természetes is, hiszen a (15.1) *Kratzer*-potenciál a $D = 0$ és $C = Ze^2$ helyettesítéssel átmegy a (14.1) *Coulomb*-potenciálba. Most vizsgáljuk meg a $\gamma \gg 1$ esetet. Ekkor E-t $\frac{1}{\gamma}$ hatványai szerint fejt-

hetjük sorba:

$$E = \frac{C^2}{4D}\left\{-1 + \frac{2\left(n_r + \frac{1}{2}\right)}{\gamma} + \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\gamma^2} - \frac{3\left(n_r + \frac{1}{2}\right)^2}{\gamma^2} - \right.$$

$$\left. - \frac{3\left(n_r + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\gamma^3} + \ldots\right\}. \qquad (23.15.11)$$

A $\gamma \to \infty$ határesetben $E = -C^2/4D$. Ez az érték, mint a 77. ábráról leolvasható, éppen a potenciálgörbék legmélyebb pontjának felel meg. A potenciál konstansának rögzített értéke mellett a $\gamma \to \infty$ határesethez úgy juthatunk, ha (15.2)-ben a *Planck*-féle h állandóval zérushoz tartunk. A $h \to 0$ klasszikus határesetben tehát a molekula kötési energiája az egyensúlyi helyzetnek megfelelő potenciálértékkel egyezik meg. A $h \neq 0$-nak megfelelő kvantummechanikai érték eltér ettől, ennek oka az, hogy a *Heisenberg*-féle bizonytalansági reláció szerint a molekula nem lehet nyugalomban az egyensúlyi helyzetben, hanem ezen állapot környezetében oszcillál. Az oszcillációk vizsgálata végett fejtsük sorba a (15.1) potenciált az egyensúlyi helyzetnek megfelelő $r_0 = 2D/C$ távolság környezetében:

$$V(r) = -\frac{C^2}{4D} + \frac{C^2}{4Dr_0^2}(r - r_0)^2.$$

Látjuk, hogy a mélypontnak megfelelő $-C^2/4D$ értékhez egy oszcillátorpotenciál adódik, melynek klasszikus frekvenciája a (3.1) formula szerint

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{C^2}{2Dr_0^2 m_0}}. \qquad (23.15.12)$$

A *Kratzer*-potenciálban levő C és D konstansok helyett paraméterekként vezessük be az imént meghatározott ν frekvenciát, valamint a

$$\Theta = m_0 r_0^2 \qquad (23.15.13)$$

tehetetlenségi momentumot. A γ állandónak ezekkel a mennyiségekkel kifejezett alakja

$$\gamma = \frac{4\pi^2 \nu \Theta}{h}. \qquad (23.15.14)$$

Ezt beírva (15.11)-be, az E energiára a következő sorfejtést kapjuk

$$E = -\frac{C^2}{4D} + h\nu\left(n_r + \frac{1}{2}\right) + \frac{h^2}{8\pi^2\Theta}\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{3h^2}{8\pi^2\Theta}\left(n_r + \frac{1}{2}\right)^2 -$$

$$- \frac{3h^2}{32\pi^4\nu\Theta^2}\left(n_r + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \ldots \qquad (23.15.15)$$

Az első tag a klasszikus határesetnek megfelelő konstans energiaérték, a második tag a lineáris oszcillátor energiaképletével egyezik meg és az $n_r = 0, 1, 2, 3, \ldots$ értékek behelyettesítésével a különböző vibrációs energiákat adja meg, a harmadik tag pedig az $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$ mellékkvantumszámoknak megfelelő rotációs energiákat szolgáltatja. A negyedik tagról be lehet bizonyítani, hogy az oszcillációk anharmonicitásából, míg az ötödik, az utolsó kiírt tag, a vibrációs és rotációs gerjesztések csatolásából származik.

A molekula alapállapotának megfelelő legmélyebb energiát az $n_r = l = 0$ esetben kapjuk. Alapállapot esetén a (15.15) sorfejtés a következőképpen alakul:

$$E_0 = -\frac{C^2}{4D} + \frac{hv}{2} - \frac{h^2}{16\pi^2\Theta} - \frac{3h^2}{256\pi^4 v\Theta^2} + \ldots$$

Ez a képlet az E_0 energiának a h *Planck*-állandó hatványai szerint haladó sorát adja meg. Az első tag a $h = 0$ -nak megfelelő klasszikus energia, a második a v frekvenciának megfelelő nullpont-rezgés energiája (l. a (3.22)-t követő diszkussziót), a további tagok pedig a magasabb rendű kvantummechanikai effektusokat írják le.

16. §. A térbeli rotátor

Térbeli rotátoron egy olyan tömegpontot értünk, amely egy másik pont körül állandó távolságban mozoghat. A térbeli rotátornál tehát a tömegpont egy gömbfelületen mozog, szemben a síkbeli rotátorral, amelynél a tömegpont állandóan egy síkban marad és körpályán mozog.

A térbeli rotátor *Schrödinger*-egyenletét könnyen felírhatjuk. Legyen a pont tömege m_0 és távolsága a rotáció középpontjától r_0, vagyis $r = r_0$. Mivel $V = 0$, a *Schrödinger*-egyenlet a következő

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E\psi = 0. \qquad (23.16.1)$$

Figyelembe véve, hogy az egyenlet r-től nem függ, polárkoordinátákban nyerjük:

$$\frac{1}{r_0^2}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \operatorname{ctg}\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right] + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E\psi = 0. \qquad (23.16.2)$$

Ha az $r_0^2 m_0$ tehetetlenségi momentumot Θ-val jelöljük, következik, hogy

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \operatorname{ctg}\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{8\pi^2\Theta}{h^2} E\psi = 0. \qquad (23.16.3)$$

Ezzel az egyenlettel (8.7) alatt már találkoztunk és láttuk, hogy megoldása

$$\psi = Y_l^m(\vartheta, \phi), \qquad (23.16.4)$$

továbbá azt is láttuk, hogy ψ együtthatójának a baloldali utolsó tagban $l(l+1)$-gyel kell egyenlőnek lenni, tehát

$$\frac{8\pi^2\Theta}{h^2}E = l(l+1),$$

ahol l egész szám. Tehát az energiasajátértékek

$$E_l = l(l+1)\frac{h^2}{8\pi^2\Theta}. \tag{23.16.5}$$

Az eredmény alkalmazható kétatomos molekulákra, ha Θ jelenti a forgás centrumán, vagyis a súlyponton átmenő és a magokat összekötő egyenesre merőleges tengelyre vonatkozó tehetetlenségi momentumot. Az E_l-re kapott formula, mint a kétatomos molekulák rotációs spektrumai mutatják, a tapasztalattal megegyező eredményre vezet, szemben a *Bohr*-féle elmélettel, ahol

$$E_l = l^2\frac{h^2}{8\pi^2\Theta}$$

adódott (itt l-et írtunk a *Bohr*-elméletben használt m rotációs kvantumszám helyett).

Kiemeljük még, hogy a kvantummechanika szerint a síkbeli rotátornak mások az energianívói, mint a térbelinek. A síkbeli rotátornál az energiasajátértékek formulájában l^2 szerepel, míg a térbelinél $l(l+1)$.

17. §. A kéttest-probléma

Az előzőekben egy m_0 tömegpont mozgását vizsgáltuk adott külső erőterekben. Most be fogjuk bizonyítani, hogy ezek az eredmények felhasználhatók két részecskéből álló rendszerek leírására is, ahol a részecskék kölcsönhatásban állnak egymással. A két részecske tömegét jelölje m_1 és m_2, a kölcsönhatási energiájuk pedig csak a koordináták különbségétől függ: $V = V(x_1 - x_2,\ y_1 - y_2,\ z_1 - z_2)$. A kéttest-probléma energiakifejezése a kölcsönhatás mellett a kinetikus energiákat tartalmazza:

$$H = \frac{1}{2m_1}(p_{1x}^2 + p_{1y}^2 + p_{1z}^2) + \frac{1}{2m_2}(p_{2x}^2 + p_{2y}^2 + p_{2z}^2) + \\ + V(x_1 - x_2, y_1 - y_2, z_1 - z_2). \tag{23.17.1}$$

A *Schrödinger*-egyenletet a (22.6.8) általános szabály alapján szerkeszthetjük meg. A ψ hullámfüggvény az x_1, y_1, z_1 és az x_2, y_2, z_2 koordináták függvénye lesz. A *Schrödinger*-egyenlet:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m_1}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z_1^2}\right) - \frac{h^2}{8\pi^2 m_2}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z_2^2}\right) + \\ + V(x_1 - x_2, y_1 - y_2, z_1 - z_2)\psi = E\psi. \tag{23.17.2}$$

Célszerű lesz új változóként bevezetni a két részecske súlypontjának koordinátáit, valamint az első részecskének a második részecskére vonatkozó relatív koordinátáit. A súlypont koordinátái:

$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}, \quad Y = \frac{m_1 y_1 + m_2 y_2}{m_1 + m_2}, \quad Z = \frac{m_1 z_1 + m_2 z_2}{m_1 + m_2}, \tag{23.17.3}$$

a relatív koordináták pedig

$$x = x_1 - x_2, \quad y = y_1 - y_2, \quad z = z_1 - z_2. \tag{23.17.4}$$

Felhasználva a differenciáloperátorok

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x} \tag{23.17.5}$$

transzformációs szabályait (hasonló kifejezések érvényesek az y és z koordinátákra), a *Schrödinger*-egyenlet a következő alakot ölti

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 M}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial Z^2}\right) -$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + V(x, y, z)\psi = E\psi. \tag{23.17.6}$$

Itt $M = m_1 + m_2$ a rendszer össztömege és $m = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ a két részecske redukált tömege. A *Schrödinger*-egyenlet ezen új formájára már alkalmazható az előzőekben is többször használt szeparációs módszer. Keressük ugyanis ψ-t a következő alakban:

$$\psi(X, Y, Z, x, y, z) = \chi(X, Y, Z)\,\phi(x, y, z).$$

Behelyettesítés és ψ-vel való osztás után kapjuk, hogy

$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 M}\frac{1}{\chi}\left(\frac{\partial^2\chi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\chi}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2\chi}{\partial Z^2}\right)\right] +$$

$$+\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{1}{\phi}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right) + V(x, y, z)\right] = E.$$

Az első szögletes zárójelben csak a súlyponti, a másodikban pedig csak a relatív koordináták szerepelnek. Ez az egyenlet nyilván csak úgy állhat fenn, ha a szögletes zárójeles kifejezések mindegyike konstans. Tehát

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 M}\left(\frac{\partial^2\chi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\chi}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2\chi}{\partial Z^2}\right) = \varepsilon_k\chi, \tag{23.17.7}$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right) + V(x, y, z)\phi = \varepsilon\phi, \tag{23.17.8}$$

$$\varepsilon_k + \varepsilon = E. \tag{23.17.9}$$

Az első egyenlet a szabad tömegpont (1.4) *Schrödinger*-egyenletével azonos, a megoldás tehát

$$\chi = e^{ik(\alpha X+\beta Y+\gamma Z)}, \qquad \varepsilon_k = \frac{h^2k^2}{8\pi^2 M}. \tag{23.17.10}$$

A súlypont tehát teljesen szabadon mozog, állapotát egy síkhullám írja le. A súlypont impulzusa (1.8) szerint $p = \frac{hk}{2\pi}$. Ha a kéttest-rendszer súlypontját nyugvónak tekintjük, úgy $p = 0$, tehát $k = 0$ és így (17.10) szerint $\chi = 1$ és $\varepsilon_k = 0$. Igen érdekes a relatív koordináták mozgását leíró (17.8) egyenlet. Ez ugyanis azonos a (22.6.3) *Schrödinger*-egyenlettel, mely egyetlen részecske mozgását írja le egy V potenciálú külső erőtérben. A kéttest-problémát ezzel visszavezettük az egyrészecske *Schrödinger*-egyenlet megoldására, a változás mindössze annyi, hogy egyrészt a külső erőtér V potenciálja helyébe most a két részecske kölcsönhatási energiáját kell írnunk, másrészt az m_0 tömeg helyébe a két részecske redukált tömege kerül.

A 14. §-ban a H-atom elméletét úgy tárgyaltuk, hogy az atom magját koordinátarendszerünk középpontjában rögzítettnek képzeltük. Most már könnyen figyelembe tudjuk venni a mag mozgásából származó korrekciót. A (14.18) eredmény szerint a H-atom energianívói

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m_0 Z^2 e^4}{h^2 n^2}.$$

Ha itt most m_0 helyébe az elektron-proton redukált tömeget, az

$$m = \frac{m_0 M_0}{m_0 + M_0} = \frac{m_0}{1 + \frac{m_0}{M_0}}$$

kifejezést írjuk, akkor megkapjuk a H-atom energianívóinak pontos értékét. Az eltérés mindössze annyi, hogy az E_n értékeket az

$$\frac{1}{1 + \frac{m_0}{M_0}} = 0{,}9994556$$

mennyiséggel kell megszoroznunk. Ez az eredmény teljesen megfelel a (21.1.16) szerintinek.

A kétatomos molekulákban az atomokat olyan erők tartják össze, melyeket jó közelítéssel harmonikus erőknek tekinthetünk és a következő potenciállal írhatunk le:

$$V = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2 = \frac{1}{2}kx^2.$$

Itt r a két atommag egymástól való távolsága, r_0 az egyensúlyi helyzetnek megfelelő magtávolság, x pedig az egyensúlyi helyzetből való elmozdulás mértéke. Ez a potenciál azonos a 3. §-ban tárgyalt harmonikus oszcillátor potenciáljával. Ez azt jelenti, hogy a kétatomos molekula is harmonikus oszcillátornak tekinthető, az oszcillátor energianívói a molekula vibrációs gerjesztésének felelnek meg. Ezeket a nívókat (3.22) és (3.1) szerint a következőképpen számíthatjuk:

$$E_n = h\nu\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

melyben m helyébe a két atom redukált tömege kerül. A vibrációs színkép megfigyelésével meghatározhatjuk a ν frekvenciát és ebből következtethetünk a molekulát összetartó erő nagyságára. Például a HCl sósavmolekula esetében a vibrációs nívók spektroszkópiai megfigyelése a $h\nu = 0{,}358$ eV értéket adja, a molekula m redukált tömege pedig a proton tömegének 17/18-szorosa. Ebből az összetartó erő állandója

$$k = 4\pi^2 m\nu^2 = 0{,}490 \text{ kp/cm}.$$

Ez egy meglehetősen erős makroszkopikus rugó állandójának felel meg.

A kétatomos molekula rotációs nívóit a térbeli rotátor (16.5) energiáiból határozhatjuk meg. A $\Theta = mr_0^2$ képletben r_0 a két mag távolságát, m pedig a redukált tömeget jelenti. Megjegyezzük, Θ-nak ez a képlete megegyezik a molekulának a súlyponton átmenő és a magokat összekötő egyenesre merőleges tengelyre vonatkozó tehetetlenségi momentumával. Ugyanis a

$$\Theta = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2,$$

$$r_1 = \frac{m_2}{m_1+m_2} r_0, \qquad r_2 = \frac{m_1}{m_1+m_2} r_0$$

képletekből azonnal adódik, hogy

$$\Theta = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2} r_0^2 = m r_0^2.$$

A (16.5) képlet lehetővé teszi a Θ tehetetlenségi momentum kísérleti meghatározását a rotációs nívók megfigyelése alapján. Az m redukált tömeg ismeretében azután ebből az r_0 egyensúlyi magtávolságot állapíthatjuk meg. Például a HCl molekula esetében r_0-ra ily módon az $r_0 = 1{,}29$ Å érték adódik.

HUSZONNEGYEDIK FEJEZET

A LEGEGYSZERŰBB KÖZELÍTŐ MÓDSZEREK ÉS ALKALMAZÁSAIK

1. §. Perturbációszámítás

Az atomi rendszerek *Schrödinger*-egyenletét, a fellépő matematikai nehézségek miatt, sok esetben nem tudjuk egzaktul megoldani. Bonyolultabb rendszerek esetén ugyanis a *Schrödinger*-egyenlet olyan parciális differenciálegyenlet lesz, melynek megoldásához a matematikai analízisben tanulmányozott speciális függvények nem elegendőek. Ilyen esetekben fontos szerephez jutnak a *Schrödinger*-egyenlet közelítő megoldását lehetővé tevő módszerek. Ebben a szakaszban a legegyszerűbb ilyen módszert, a perturbációszámítást fogjuk bemutatni. Ez akkor alkalmazható, ha a vizsgált rendszer *Schrödinger*-egyenlete csak kevéssé különbözik egy olyan egyszerű rendszer *Schrödinger*-egyenletétől, melynek megoldásait már ismerjük.

Vizsgált rendszerünk energiaoperátora a mondottak értelmében

$$H = H_0 + \mathcal{H}, \tag{24.1.1}$$

ahol H_0 az az egyszerű energiaoperátor, melynek megfelelő *Schrödinger*-egyenlet

$$H_0\psi_k^0 = E_k^0\psi_k^0. \tag{24.1.2}$$

E_k^0 sajátértékeket és ψ_k^0 sajátfüggvényeket ismertnek tételezzük fel. A H operátor második tagját, $\mathcal{H}$-t pedig kis perturbációnak tekintjük. A megoldandó *Schrödinger*-egyenlet

$$H\psi \equiv (H_0 + \mathcal{H})\psi = E\psi. \tag{24.1.3}$$

Mivel a $\mathcal{H}$ perturbáció hatását kicsinynek tételezzük fel, ezért azt várjuk, hogy az E sajátérték közel fog esni a H_0 operátor valamelyik E_k^0 sajátértékéhez. Ezért E-t keressük a következő alakban:

$$E = E_k^0 + w, \tag{24.1.4}$$

ahol a w korrekció a perturbáció hatására létrejövő energiaváltozást jelenti. ψ-ről is feltételezzük, hogy az E_k^0-nak megfelelő sajátfüggvény közelébe esik. Itt azonban meg kell különböztetnünk két esetet, attól függően, hogy az E_k^0 sajátérték egyszerű-e, tehát csak egy sajátfüggvény tartozik hozzá, vagy pedig degenerált sajátértékről van-e szó, melyhez egynél több sajátfüggvény tartozik. Először az egyszerű sajátértékekkel fogunk foglalkozni. Ekkor ψ a ψ_k^0 sajátfüggvénytől csak egy kis ϕ korrekcióval fog különbözni

$$\psi = \psi_k^0 + \phi. \tag{24.1.5}$$

Helyettesítsük be az (1.3) *Schrödinger*-egyenletbe az (1.4) és (1.5) kifejezéseket. Figyelembe véve, hogy ψ_k^0 kielégíti a H_0-hoz tartozó (1.2) *Schrödinger*-egyenletet, kapjuk, hogy

$$H_0\phi + \mathcal{H}\psi_k^0 + \mathcal{H}\phi = E_k^0\phi + w\psi_k^0 + w\phi. \tag{24.1.6}$$

Fejtsük ki a ϕ korrekciót a perturbálatlan ψ_n^0 sajátfüggvények szerint:

$$\phi = \sum_n a_n\psi_n^0 \tag{24.1.7}$$

és helyettesítsük ezt az (1.6) egyenletbe:

$$\sum_n a_n E_n^0\psi_n^0 + \mathcal{H}\psi_k^0 + \sum_n a_n\mathcal{H}\psi_n^0 = w\psi_k^0 + (E_k^0 + w)\sum_n a_n\psi_n^0. \tag{24.1.8}$$

A baloldali első tagban ismét felhasználhattuk az (1.2) sajátértékegyenletet. Szorozzuk meg ezt az egyenletet először ψ_k^{0*}-gal, majd integráljunk az egész koordinátatérre. Tekintettel a (22.8.7) normálási és a (22.8.8) ortogonalitási relációkra, az eredmény a

$$\mathcal{H}_{kn} = \int \psi_k^{0*}\mathcal{H}\psi_n^0 dv \tag{24.1.9}$$

rövidítő jelölés bevezetésével a következő:

$$\mathcal{H}_{kk} + \sum_n a_n\mathcal{H}_{kn} = (1 + a_k)w. \tag{24.1.10}$$

Ez az egyenlet lehetővé teszi, hogy a w energiakorrekciót kifejezzük az a_n sorfejtési együtthatók segítségével. Ha bevezetjük a

$$b_n = \frac{a_n}{1 + a_k} \tag{24.1.11}$$

jelölést, úgy (1.10)-ből az energiakorrekcióra a

$$w = \mathcal{H}_{kk} + \sum_n{}' \mathcal{H}_{kn}b_n \tag{24.1.12}$$

kifejezést kapjuk, melyben a Σ jel mellett alkalmazott vessző azt jelöli, hogy az összeg k-adik tagja elhagyandó. (1.12)-vel az energiakorrekció meghatározását visszavezettük az a_n együtthatók (vagy ami ugyanaz, a ϕ sajátfüggvénykorrekció) kiszámítására. Az a_n együtthatók kiszámítása céljából szorozzuk meg (1.8)-at ψ_m^{0*}-gal ($m \neq k$) és integráljunk. Az eredmény

$$a_m E_m^0 + \mathcal{H}_{mk} + \sum_n a_n\mathcal{H}_{mn} = (E_k^0 + w)a_m\,.$$

Ebből egyszerű átalakítással a b_m konstansokra a

$$b_m = \frac{\mathcal{H}_{mk}}{E_k^0 - E_m^0 + w} + \sum_n{}' \frac{\mathcal{H}_{mn}}{E_k^0 - E_m^0 + w} b_n \tag{24.1.13}$$

egyenletet vezethetjük le. Ez az egyenlet a szukcesszív approximációk módszerével igen könnyen megoldható. Kiinduló lépésként b_n-et a jobb oldalon zérusnak

tekintjük, ekkor $b_m = \dfrac{\mathcal{H}_{mk}}{E_k^0 - E_0^m + w}$. A következő lépésben a jobb oldalon b_n-nek ezen első közelítéses kifejezését használjuk, ekkor azt kapjuk, hogy

$$b_m = \frac{\mathcal{H}_{mk}}{E_k^0 - E_m^0 + w} + \sum_n{}' \frac{\mathcal{H}_{mn}\mathcal{H}_{nk}}{(E_k^0 - E_m^0 + w)(E_k^0 - E_n^0 + w)}.$$

Az eljárás hasonló módon folytatható, és végeredményül b_m-re végtelen sort kapunk:

$$b_m = \frac{\mathcal{H}_{mk}}{E_k^0 - E_m^0 + w} + \sum_n{}' \frac{\mathcal{H}_{mn}\mathcal{H}_{nk}}{(E_k^0 - E_m^0 + w)(E_k^0 - E_n^0 + w)} + \\ + \sum_{n,l}{}' \frac{\mathcal{H}_{mn}\mathcal{H}_{nl}\mathcal{H}_{lk}}{(E_k^0 - E_m^0 + w)(E_k^0 - E_n^0 + w)(E_k^0 - E_l^0 + w)} + \ldots \qquad (21.1.14)$$

Ha végül ezt (1.12)-be helyettesítjük, úgy az energiakorrekcióra egy transzcendens egyenletet kapunk:

$$w = S(w) \equiv \mathcal{H}_{kk} + \sum_m{}' \frac{\mathcal{H}_{km}\mathcal{H}_{mk}}{E_k^0 - E_m^0 + w} + \\ + \sum_{m,n}{}' \frac{\mathcal{H}_{km}\mathcal{H}_{mn}\mathcal{H}_{nk}}{(E_k^0 - E_m^0 + w)(E_k^0 - E_n^0 + w)} + \ldots \qquad (24.1.15)$$

Kiemeljük, hogy ez ideig semmilyen közelítő lépést nem alkalmaztunk, a fenti transzcendens egyenlet megoldásával (1.3) egzakt sajátértékeit kapnánk meg. Kis $\mathcal{H}$ perturbációk esetén azonban (1.15) jobb oldalán álló végtelen sor az első néhány tagjával közelíthető; az N-edik tag ugyanis N db $\mathcal{H}$ mátrixelem szorzatát tartalmazza, és így nagyobb N-nél már igen kicsi lesz. A perturbációszámítás első közelítésében csak a legelső tagot vesszük figyelembe, ekkor

$$w = \mathcal{H}_{kk} = \int \psi_k^{0*} \mathcal{H} \psi_k^0 dv. \qquad (24.1.16)$$

Az energiakorrekció a $\mathcal{H}$ perturbációnak a ψ_k^0 állapotban vett kvantummechanikai középértékével egyezik meg. Második közelítésben (1.15)-ből már két tagot veszünk figyelembe, a második korrekciós tag nevezőjében azonban w-t elhanyagolhatjuk az $E_k^0 - E_m^0$ energiakülönbség mellett, tehát

$$w = \mathcal{H}_{kk} + \sum_m{}' \frac{\mathcal{H}_{km}\mathcal{H}_{mk}}{E_k^0 - E_m^0}. \qquad (24.1.17)$$

Most foglalkozzunk a sajátfüggvény ϕ korrekciójával. Első közelítésben az (1.14) sorból csak az első tagot vesszük figyelembe és itt is a nevezőben $w = 0$-t írunk

$$b_m = \frac{\mathcal{H}_{mk}}{E_k^0 - E_m^0}. \qquad (24.1.18)$$

(1.11) szerint $a_m = (1 + a_k)b_m$ lesz, a sajátfüggvénykorrekció pedig

$$\phi = \sum_m a_m \pi_m^0 = a_k \psi_k^0 (1 + a_k) \sum_m{}' b_m \psi_m^0 .$$

Ha ide beírjuk az (1.18) közelítő kifejezést, úgy a teljes $\psi = \psi_k^0 + \phi$ sajátfüggvényre a következőt kapjuk:

$$\psi = (1 + a_k)\left[\psi_k^0 + \sum \frac{\mathcal{H}_{mk}}{E_k^0 - E_m^0}\psi_m^0\right]. \tag{24.1.19}$$

Az $(1 + a_k)$ szorzótényező értékét a (22.8.7) normálási feltételből állapíthatjuk meg. Ha nem törekszünk normált ψ sajátfüggvény meghatározására, úgy egyszerűen $a_k = 0$-t vehetünk és a sajátfüggvény az (1.19)-ben szereplő szögletes zárójelben levő kifejezés lesz.

Ezek után térjünk rá a degenerált sajátértékek esetére. Ha az E_k^0 sajátértékhez f számú

$$\psi_{k1}^0, \psi_{k2}^0, \ldots, \psi_{kf}^0 \tag{24.1.20}$$

egymástól lineárisan független sajátfüggvény tartozik, akkor nem tudjuk minden további vizsgálat nélkül megmondani, hogy a $\psi_{k\alpha}^0$ függvények melyik lineáris kombinációja lesz a $H = H_0 + \mathcal{H}$-hoz tartozó ψ sajátfüggvény nulladik közelítése. Nyilvánvaló, hogy most (1.5) helyébe a

$$\psi = \sum_{\alpha=1}^{f} c_\alpha \psi_{k\alpha}^0 + \phi \tag{24.1.21}$$

kifejezést kell írnunk, ahol c_α-k egyelőre ismeretlen kombinálási együtthatók. A $(H_0 + \mathcal{H})\psi = (E_k^0 + w)\psi$ *Schrödinger*-egyenletbe való helyettesítéssel most (1.6) helyett a következő egyenletet kapjuk:

$$H_0\phi + \sum_{\alpha=1}^{f} c_\alpha \mathcal{H}\psi_{k\alpha}^0 + \mathcal{H}\phi = E_k^0\phi + w\sum_{\alpha=1}^{f} c_\alpha \psi_{k\alpha}^0 + w\phi . \tag{24.1.22}$$

Az egyszerűség kedvéért a w energiakorrekciót a perturbációszámításnak csak az első közelítésében határozzuk meg. Ekkor (1.22)-ből a másodrendűen kicsiny $\mathcal{H}\phi$ és $w\phi$ tagok elhagyhatók. A maradék egyenletet szorozzuk meg $\psi_{k\beta}^{0*}$-gal és integráljunk az egész térre. Ha bevezetjük egyrészt az (1.9)-hez hasonló

$$\mathcal{H}_{\beta\alpha}^{(k)} = \int \psi_{k\beta}^{0*} \mathcal{H} \psi_{k\alpha} dv \tag{24.1.23}$$

jelölésmódot, másrészt tekintetbe vesszük, hogy az (1.20) függvényekre is érvényesek a (22.8.7) és (22.8.8) relációk:

$$\int \psi_{k\alpha}^{0*}\psi_{k\alpha}^0 dv = 1 \quad \text{és} \quad \int \psi_{k\beta}^{0*}\psi_{k\alpha}^0 dv = 0, \quad \text{ha } \beta \neq \alpha,$$

úgy a következő eredményt kapjuk:

$$\sum_{\alpha=1}^{f} (\mathcal{H}_{\beta\alpha}^{(k)} - w\delta_{\beta\alpha})c_\alpha = 0. \tag{24.1.24}$$

Itt $\delta_{\beta\alpha}$ az ún. *Kronecker-féle szimbólum*, melynek értéke 1, ha $\beta = \alpha$ és 0, ha $\beta \neq \alpha$. (1.24) lineáris homogén egyenletrendszer, amelyből az ismeretlen c_α együtthatók kiszámíthatók. A megoldhatóság feltétele, hogy az egyenletrendszer determinánsa eltűnjék:

$$\begin{vmatrix} \mathcal{H}_{11}^{(k)} - w & \mathcal{H}_{12}^{(k)} & \mathcal{H}_{1f}^{(k)} \\ \mathcal{H}_{21}^{(k)} & \mathcal{H}_{22}^{(k)} - w & \mathcal{H}_{2f}^{(k)} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathcal{H}_{f1}^{(k)} & \mathcal{H}_{f2}^{(k)} & \mathcal{H}_{ff}^{(k)} - w \end{vmatrix} = 0. \qquad (24.1.25)$$

A determináns kifejtésével w-re f-ed fokú algebrai egyenletet kapunk, melyet szekuláris egyenletnek szokás nevezni. Ennek megoldásai, a $w_1, w_2, \ldots, w_f$ gyökök adják meg az E_k^0 energiaérték korrekcióit. Ha mind az f gyök különböző, akkor a degeneráció megszűnik. Mivel a $\mathcal{H}_{\beta\alpha}^{(k)}$ mátrixelemek feltevéseink értelmében kicsinyek, ezért a szekuláris egyenlet gyökei is kicsinyek lesznek. Következésképpen a perturbáció hatására a degenerált E_k^0 energiérték egymáshoz közeleső

$$E_k^0 + w_1,\ E_k^0 + w_2, \ldots, E_k^0 + w_f \qquad (24.1.26)$$

nívókra esik szét. Ha a w gyökök nem mind különbözők, úgy az energia felhasadása csak részleges lesz.

A w energiakorrekciók mindegyikéhez (1.24)-nek egy megoldásrendszere tartozik. A c_α együtthatók kiszámításával lehetővé válik (1.21) első tagjának, a

$$\psi^0 = \sum_{\alpha=1}^{f} c_\alpha \psi_{k\alpha}^0 \qquad (24.1.27)$$

helyes kiindulófüggvény felírása is.

A következő paragrafusokban a perturbációszámítás egyszerű alkalmazásait fogjuk bemutatni.

2. §. Az anharmonikus lineáris oszcillátor

Egy egyenes mentén rezgő tömegpont potenciális energiája csak egészen idealizált esetben adható meg a harmonikus oszcillátorra jellemző $V = \frac{1}{2} kx^2$ kifejezéssel. A rezgés realisztikusabb leírását kapjuk, ha V-t még egy anharmonikus, x-ben negyedfokú taggal is kiegészítjük:

$$V = \frac{1}{2} kx^2 + \lambda x^4. \qquad (24.2.1)$$

Ha λ kicsiny, akkor a járulékos $\mathcal{H} = \lambda x^4$ tag perturbációnak tekinthető a harmonikus oszcillátor energiája mellett. A harmonikus oszcillátor sajátértékeit és saját-

függvényeit a 23. fejezet 3. §-ban megtárgyaltuk. Az eredményeket a (23.3.22) és (23.3.25) képletek adják meg. Számítsuk ki az $E_n^0 = h\nu\left(n+\frac{1}{2}\right)$ energianívó korrekcióját a perturbációszámítás első közelítésében. Az (1.16) formula szerint:

$$w = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^0 \mathcal{H} \psi_n^0 dx = \frac{A_n^2}{\alpha^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi)\, \xi^4 d\xi\,, \tag{24.2.2}$$

melyben az említett paragrafus jelöléseit alkalmaztuk. Az itt szereplő integrál a *Hermite*-féle polinomok (23.3.24) képletének felhasználásával kiszámítható, az eredmény $3\sqrt{\pi}2^{n-2}n!(2n^2+2n+1)$ lesz. Beírva még az A_n normálási tényező (23.3.26) kifejezését is, az energiakorrekcióra a következő kifejezést kapjuk:

$$w = \frac{3h^2\lambda}{64\pi^4 m_0^2 v^2}(2n^2+2n+1)\,. \tag{24.2.3}$$

Perturbációs eljárásunk csak akkor jogosult, ha w valóban csak kis korrekciót jelent az E_n^0 energianívóhoz képest, azaz ha $w \ll h\nu\left(n+\frac{1}{2}\right)$. Ebből λ-ra a következő feltételt kapjuk:

$$\lambda \ll \frac{32\pi^4 m_0^2 v^3}{3h} \frac{2n+1}{2n^2+2n+1}\,. \tag{24.2.4}$$

Az $n = 0$ alapnívónál ez a $\lambda \ll 32\pi^4 m_0^2 v^3/3h$ feltételt jelenti. A gerjesztett nívóknál ezt a korlátot még meg kell szorozni egy 1-nél kisebb $\frac{2n+1}{2n^2+2n+1}$ tényezővel, ami nagy n értékekre már igen kicsi lesz. A (2.3) energiakorrekció ezért csak az alapállapotra és az alacsonyan fekvő gerjesztett állapotokra alkalmazható.

3. §. Síkbeli rotátor elektromos erőtérben

Helyezzük az m_0 tömegű és a sugarú síkbeli rotátort egy, a rotátor síkjával párhuzamos, homogén elektromos térbe. Ha a rotátor elektromos töltését e-vel, az alkalmazott térerősséget pedig $\mathfrak{E}$-vel jelöljük, úgy a rotátor potenciális energiája nyilván

$$\mathcal{H} = -e\mathfrak{E}a\cos\phi. \tag{24.3.1}$$

Ha a térerősség nem túl nagy, úgy ezt perturbációnak tekinthetjük a rotátor forgási energiája mellett. A perturbálatlan rotátor *Schrödinger*-egyenletét a 23. fejezet 2. §-ban már megoldottuk:

$$\psi_n^0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\phi}\,, \qquad E_n^0 = \frac{h^2 n^2}{8\pi^2 \Theta}\,, \tag{24.3.2}$$

ahol $\Theta = m_0 a^2$, a rotátor tehetetlenségi momentuma. Képezzük most a $\mathcal{H}$ perturbációs energia mátrixelemeit az (1.9) szabály szerint:

$$\mathcal{H}_{nm} = -\frac{e\mathfrak{E}a}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-in\phi}\cos\phi e^{im\phi}\,d\phi = -\frac{1}{2}e\mathfrak{E}a(\delta_{m,n-1} + \delta_{m,n+1} + \delta_{m,n+1}), \tag{24.3.3}$$

ahol δ ismét a *Kronecker*-szimbólum. A $\mathcal{H}_{mn}$ mátrixelemek ismeretében felírhatjuk a perturbáció okozta w energiakorrekciót. Első közelítésben $w = \mathcal{H}_{nn}$, ez azonban (3.3) szerint zérussal egyenlő; első közelítésben az E_n^0 energianívó megegyezik a perturbált rotátor energiájával is. Második közelítésben az energiakorrekciót (1.17) adja meg, melybe a (3.3) mátrixelemeket behelyettesítve kapjuk, hogy

$$w = \frac{e^2\mathfrak{E}^2a^2}{4}\left(\frac{1}{E_n^0 - E_{n-1}^0} + \frac{1}{E_n^0 - E_{n+1}^0}\right).$$

A perturbálatlan energianívók (2.2) képletével a végeredmény

$$w = \frac{4\pi^2\Theta e^2\mathfrak{E}^2a^2}{h^2}\frac{1}{4n^2 - 1}. \tag{24.3.4}$$

Alapállapotban, tehát $n=0$ esetén ez a korrekció negatív, a külső tér a rotátor energiáját csökkenti. Az $n \geq 1$ gerjesztett állapotoknál pedig w pozitív, a perturbáció az energianívókat megemeli.

4. §. A mag véges kiterjedésének hatása az atom energianívóira

Az atomfizikában általában az atom magját mint egy Ze ponttöltést vesszük figyelembe. Ez azonban idealizáció, hiszen tudjuk, hogy az atomok magjai véges kiterjedésűek. Tekintsük az atom magját egy R sugarú, homogén töltéseloszlású gömbnek. A magcentrumtól r távolságban levő elektron potenciális energiája ekkor

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{R}\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right), \qquad \text{ha} \quad r \leq R,$$
$$V(r) = -\frac{Ze^2}{R}, \qquad \text{ha} \quad r \geq R. \tag{24.4.1}$$

Ebből levonva a pontszerű magnak megfelelő $V^0 = -\dfrac{Ze^2}{r}$ potenciális energiát, megkapjuk a mag véges kiterjedéséből származó perturbációt:

$$\mathcal{H} = \frac{Ze^2}{R}\left(\frac{R}{r} - \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right), \tag{24.4.2}$$

ha $r \leq R$, és zérus az $r \geq R$ esetben. Az energiakorrekciót az $1s$, tehát a legbelső elektronpályára számítjuk ki, melynek megfelelő hullámfüggvényt a (23.14.23) és (23.14.24) képletekből $n=1$, $l = m = 0$ helyettesítéssel kapjuk:

$$\psi^0 = \left(\frac{Z^3}{\pi a_H^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_H}}.$$

Az energiakorrekció a perturbációszámítás első közelítésében

$$w = \int \psi^0 H \psi^0 dv = \frac{Z^4 e^2}{\pi a_H^3 R} \int_0^R \left(\frac{R}{r} - \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right) e^{-\frac{2Zr}{a_H}} 4\pi r^2 dr.$$

Az integrál elemi úton kiszámítható, az eredmény

$$w = \frac{Z^2 e^2}{a_H}\left[1 - 3\,\frac{(4 + 4x + x^2)e^{-x} - (4 - x^2)}{x^3}\right], \tag{24.4.3}$$

ahol

$$x = \frac{2ZR}{a_H} = \frac{8\pi^2 Z m_0 e^2 R}{h^2}. \tag{24.4.4}$$

A pontszerű mag körül az $1s$ pályán mozgó elektron energiája $E_{1s}^0 = -Z^2e^2/2a_H$. A relatív energiaváltozás tehát

$$\eta = \frac{w}{|E_{1s}^0|} = 2\left[1 - 3\,\frac{(4 + 4x + x^2)e^{-x} - (4 - x^2)}{x^3}\right]. \tag{24.4.5}$$

Nézzük például az ólomatom esetét. Az ólom rendszáma $Z = 82$, magjának sugara $R = 7{,}1 \cdot 10^{-13}$ cm, ezekből az $x = 0{,}022$ értéket kapjuk. (Az ólomnál könnyebb elemek esetén még ennél is nagyságrendekkel kisebb értékek adódnak.) Ilyen kis x-ekre (4.5)-öt hatványsorának első el nem tűnő tagjával approximálhatjuk:

$$\eta = \frac{1}{5}x^2. \tag{24.4.6}$$

A példaként felhozott ólomatomnál a relatív energiaváltozás $\eta = 0{,}97 \cdot 10^{-4}$ lesz, tehát az eltérés mindössze tizedrésznyi a pontszerűnek feltételezett maggal számított energiától. A spektroszkópiai megfigyelés mégis ki tudja mutatni ezt az energiakorrekciót: az azonos Z rendszámú, de különböző atomsúlyú, következésképpen különböző R magsugarú izotópok esetében az energiakorrekciók különbözők lesznek, és így színképvonalaik sem fognak teljesen egybeesni. Ezt a jelenséget hívják *izotópeltolódás*nak.*

* A megfigyelt izotópeltolódás csak részben származik a mag véges kiterjedéséből, az izotópeltolódás másik oka az, hogy a mag mozgása az atom súlypontja körül, különböző tömegü izotópok esetén, különböző mértékű lesz.

Egészen más nagyságrendi viszonyokat találunk az ún. müon-atomokban. Ha egy kozmikus eredetű vagy egy gyorsító nyalábjából származó negatív müon fékezési sugárzás révén elveszti kinetikus energiáját, úgy az, élettartamának megfelelő időre, befogódhat egy atommag körüli pályára. Az ily módon létrejött müon-atom kvantumelmélete a közönséges atomokéhoz teljesen hasonlóan alakul, az egyetlen, de lényeges különbség az, hogy a müon tömege az elektronénál 207-szer nagyobb. Az ólommag köré befogott müon esetében (4.4)-ből az $x = 207 \cdot 0{,}022 = 4{,}6$ értéket kapjuk, az ennek megfelelő relatív energiakorrekció pedig (4.5) szerint $\eta = 0{,}90$. Az energiakorrekció tehát 90%-os. Ez természetesen azt jelenti, hogy nem is szabad a mag véges kiterjedéséből származó effektusokat perturbációnak tekinteni: a müon-atom reális elméletében a müon *Schrödinger*-egyenletét a (4.1) potenciállal egzaktul kell megoldani. Az, hogy a müonra a mag véges kiterjedése ilyen nagy hatással van, rögtön érthetővé válik, ha figyelembe vesszük, hogy a müon 207-szeres tömege miatt a neki megfelelő a_H *Bohr*-rádiusz 207-szer kisebb, mint az elektroné: a müonpályák sugara a mag sugarának nagyságrendjébe esik.

5. §. A spin-pálya kölcsönhatása

Az atomban mozgó elektronok, a spintől származó mágneses momentumuk révén, mágneses kölcsönhatásba kerülnek az atomban uralkodó elektromos erőtérrel. Ezt nevezzük spin-pálya kölcsönhatásnak. Az elektrodinamikából tudjuk, hogy egy $\mathfrak{E}$ elektrosztatikus térben mozgó, μ_s saját mágneses momentumú elektron mágneses energiája

$$\frac{1}{c}\mu_s[\mathbf{v}, \mathfrak{E}], \tag{24.5.1}$$

ahol $\mathbf{v}$ az elektron sebessége. Az atom elektrosztatikus terét

$$\mathfrak{E} = -\operatorname{grad}\Phi = \frac{1}{e}\frac{\mathbf{r}}{r}\frac{dV}{dr} \tag{24.5.2}$$

adja meg, melyben Φ az atommag és az elektronfelhő által kialakított elektrosztatikus potenciál és $V = -e\Phi$ az elektron potenciális energiája ebben az erőtérben. Az $\mathfrak{E}$ térerősség fenti képletét (5.1)-be írva, a spinpálya kölcsönhatásra a következő kifejezést kapjuk:

$$\frac{1}{ec}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mu_s[\mathbf{v}, \mathbf{r}] = \frac{1}{m_0^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{NS}, \tag{24.5.3}$$

ahol $\mathbf{N} = [\mathbf{r}, m_0\mathbf{v}]$ a pályaimpulzusmomentum és $\mathbf{S}$ a spin. Ha az elektron mozgását a σ elektrosztatikus térben a korrekt relativisztikus egyenletekkel írjuk le, akkor, THOMAS vizsgálata szerint, (5.3)-hoz még egy $\frac{1}{2}$-es faktor is járul. A spin-

pálya kölcsönhatás végleges kifejezése tehát:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_0^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{NS}. \tag{24.5.4}$$

Ez az energia általában igen kicsiny az elektron elektrosztatikus energiájához képest, úgyhogy perturbációnak tekinthető.

Tudjuk, hogy az atomban az elektronállapotok általában degeneráltak: az n főkvantumszámmal és l mellékkvantumszámmal jellemzett héjban $2(2l+1)$ elektronállapot van. Ezek megkülönböztetésére két lehetőséget ismertünk meg. A héj állapotait vagy az m mágneses és m_s spinkvantumszámmal, vagy pedig a belső kvantumszámmal és az m_j vetülettel jellemezhetjük. Az első esetben az (n, l) héj állapotait a

$$\psi_{nlmm_s} = R_{nl}(r)Y_l^m(\vartheta, \phi)\chi_{m_s}(s),$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l \quad \text{és} \quad m_s = \pm\frac{1}{2} \tag{24.5.5}$$

függvények adják meg, míg a második esetben a sajátfüggvények a következők lesznek:

$$\psi_{nljm_j} = R_{nl}(r)F_{ljm_j}(\vartheta, \phi, s),$$

$$j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{és} \quad m_j = \pm\frac{1}{2}, \ \pm\frac{3}{2}, \ldots, \ \pm j. \tag{24.5.6}$$

E két függvényrendszer egymással teljesen egyenértékű, hiszen a 23. fejezet 9. §-ban láttuk, hogy egyik a másikból lineáris kombinációval nyerhető. Egy konkrét probléma vizsgálatakor mindig a célszerűbbet választhatjuk. Esetünkben előnyös lesz (5.6)-ból, a teljes impulzusmomentum sajátfüggvényeiből kiindulni, ugyanis ezek egyben sajátfüggvényei a spin-pálya kölcsönhatás kifejezésében előforduló **NS** operátornak is:

$$(\mathbf{NS})R_{nl}F_{ljm_j} = \frac{1}{2}[J^2 - N^2 - S^2]R_{nl}F_{ljm_j}$$

$$= \frac{h}{8\pi^2}\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]R_{nl}F_{ljm_j}.$$

Vagy a (23.10.6) *Landé*-féle g_L-faktorral kifejezve:

$$(\mathbf{NS})R_{ln}F_{ljm_j} = \frac{h^2}{16\pi^2}\frac{2-g_L}{g_L-1}R_{nl}F_{ljm_j}. \tag{24.5.7}$$

Képezzük most a $\mathcal{H}$ perturbáció mátrixelemeit az (1.23) szabály szerint. Ekkor (5.7) miatt a következő eredményre jutunk:

$$\mathcal{H}^{(nl)}_{jm_j, jm'_j} = \frac{1}{2}\frac{2-g_L}{g_L-1}\zeta_{nl}\delta_{jj'}\delta_{m_jm'_j}, \tag{24.5.8}$$

ahol kihasználtuk a különböző indexű F_{ljm_j} függvények ortogonalitását. ζ_{nl}-lel a következő integrált jelöltük:

$$\zeta_{nl} = \frac{h^2}{16\pi^2 m_0^2 c^2} \int_0^\infty \frac{1}{r}\frac{dV}{dr} R_{nl}^2(r) r^2 dr . \tag{24.5.9}$$

(5.8) mutatja, hogy a perturbáció mátrixa diagonális: csak a $j = j'$ és $m_j = m_j'$ esetben lesz a mátrixelem zérustól különböző. Ilyenkor a diagonális elemek lesznek egyben a szekuláris egyenlet megoldásai is:

$$w = \frac{1}{2}\frac{2 - g_L}{g_L - 1}\zeta_{nl} . \tag{24.5.10}$$

Mivel g_L függ a j belső kvantumszámtól, ezért a $j = l + \frac{1}{2}$ és a $j = l - \frac{1}{2}$ esetek-

nek megfelelően két különböző w energiakorrekciót kapunk. Ezzel szemben g_L független az m_j kvantumszámtól, emiatt a w értékek $2j + 1$-szeresen elfajultak maradnak. Ha g_L kifejezését behelyettesítjük (5.10)-be, úgy a végeredmény a következő:

$$w = l\zeta_{nl}, \quad \text{ha} \quad j = l + \frac{1}{2} \qquad (2l + 2\text{-szeres gyök})$$

és (24.5.11)

$$w = -(l + 1)\zeta_{nl}, \quad \text{ha} \quad j = l - \frac{1}{2} \qquad (2l\text{-szeres gyök}).$$

Összefoglalva mondhatjuk, hogy a spin-pálya kölcsönhatás következtében az eredetileg $2(2l + 1)$-szeresen elfajult term két nívóra hasad fel, melyeket a belső kvantumszám különböztet meg egymástól. Mindkét nívó $2j + 1$-szeresen elfajult, a két nívónak a multiplicitásokkal súlyozott középértéke:

$$\frac{(2l + 2)l\zeta_{nl} - 2l(l + 1)\zeta_{nl}}{2(2l + 1)} = 0 ,$$

tehát a két nívó „súlypontja" a perturbálatlan termértékkel esik egybe. (5.9)-ből következik, hogy vonzó potenciál esetén ζ_{nl} pozitív lesz, ilyenkor a $j = l - \frac{1}{2}$-

nek megfelelő nívó mélyebben van, mint a $j = l + \frac{1}{2}$-es.

6. §. A Zeeman-effektus kvantumelmélete

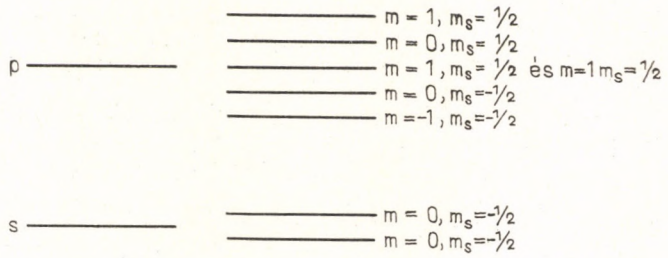
A *Zeeman*-féle vonalfelhasadás jelenségével a 21. fejezet 5. §-ban már megismerkedtünk, most a jelenség kvantummechanikai értelmezésével fogunk foglalkozni. A $\mathfrak{H}$ külső mágneses térben levő elektron mágneses energiája $-\mu\mathfrak{H}$, ahol

μ az elektron teljes mágneses momentuma, mely (23.10.2) szerint a pálya- és spinmomentumokból tevődik össze. Fektessük koordinátarendszerünk z-tengelyét a mágneses tér irányába, úgy a mágneses energia

$$\mathcal{H} = -\mathfrak{H}\mu_z = \frac{e\mathfrak{H}}{2m_0c}(N_z + 2\mathfrak{S}_z), \tag{24.6.1}$$

ahol $\mathfrak{H}$ a mágneses tér erőssége. Az elektronoknak ezt a mágneses energiáját perturbációnak fogjuk tekinteni az atom összenergiájához képest.

Az n, l elektronhéj állapotait most célszerű lesz az (5.5) függvényekkel leírni. Ezek ugyanis sajátfüggvényei a (6.1) perturbációnak, és emiatt az (1.23)-nak megfelelő $\mathcal{H}^{(nl)}_{mm_s,m'm'_s}$ mátrix diagonális lesz. A diagonális elemek, melyek egyben a



78. ábra. Az s és p termek *Zeeman*-felhasadása

szekuláris egyenlet megoldásai is, a perturbáció sajátértékeivel egyeznek meg:

$$w = \frac{e\mathfrak{H}}{2m_0c}\frac{h}{2\pi}(m + 2m_s) = \mu_B\mathfrak{H}(m + 2m_s),$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l \quad \text{és} \quad m_s = \pm\frac{1}{2}. \tag{24.6.2}$$

Az energiakorrekció függ az m mágneses és az m_s spinkvantumszámtól, (6.3) tehát számot ad a termek felhasadásáról. Mivel $m + 2m_s$ csak egész szám lehet, ezért a felhasadás egyenlő hosszú, $\mu_B\mathfrak{H}$ nagyságú intervallumokra történik. A felhasadás csak az $l = 0$ mellékkvantumszámú s termek esetében teljes, ez a dublett term ugyanis (6.2) szerint, az m_s két lehetséges értékének megfelelően, két részre hasad. Az $l > 0$ termek esetében a *Zeeman*-felhasadás csak részben oldja fel a degenerációt. Ha (6.2)-be m és m_s összes lehetséges értékeit beírjuk, úgy csak $2l + 3$ különböző w értéket kapunk: $w = 0, \pm\mu_B\mathfrak{H}, \pm 2\mu_B\mathfrak{H}, \ldots, \pm(l + 1)\mu_B\mathfrak{H}$. Az s és p termek felhasadását az 78. ábra szemlélteti.

A *Zeeman*-effektus csak viszonylag erős ($\mathfrak{H} \geq 5 \cdot 10^4$ gauss) mágneses terekben jön létre a fentiekben leírt módon. Ez esetben normális *Zeeman*-effektusról beszélünk. Gyengébb mágneses terekben az ún. anomális *Zeeman*-effektust figyelhetjük meg, melynél a termek felhasadását (6.2)-nél jóval bonyolultabb törvény fejezi ki. Az anomális *Zeeman*-effektusnak az a magyarázata, hogy ha a mágneses

tér nem nagyon erős, úgy a (6.1) mágneses energia mellett nem hanyagolható el a spin-pálya kölcsönhatás. Az anomális *Zeeman*-effektus tehát az (5.4) és (6.1) perturbációk együttes hatására jön létre:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_0^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{NS} + \frac{e\mathfrak{H}}{2m_0c}(N_z + 2S_z).$$

Példaként vizsgáljuk meg a p termek anomális *Zeeman*-felhasadását. Mivel $l + 1$ esetén a degeneráció mértéke $2(2 \cdot 1 + 1) = 6$, ezért a szekuláris egyenletben egy 6×6 méretű determináns fog szerepelni. Ennek elemeit (1.23) szerint kell képeznünk a $\mathcal{H}$ perturbációból, ahol most a ψ^0 függvények akár (5.5), akár (5.6)-ból vehetők. Most még célszerűségi szempontok sem tűntetik ki az egyik függvényrendszert a másikhoz képest. Induljunk ki az (5.5) függvényekből. A spin-pálya kölcsönhatásban szereplő **NS** operátor hatását az $Y_1^m\chi_{m_s}$ függvényekre egyrészt (23.9.7)-ből, másrészt a 255. oldalon levő táblázatból állapíthatjuk meg. Az elemi számítások elvégzése után a szekuláris egyenlet a következő alakot ölti:

$$\begin{vmatrix}
\zeta + 2\mu_B\mathfrak{H} - w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\zeta - w & \sqrt{2}\zeta & 0 & 0 & 0 \\
0 & \sqrt{2}\zeta & \mu_B\mathfrak{H} - w & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -\mu_B\mathfrak{H} - w & \sqrt{2}\zeta & 0 \\
0 & 0 & 0 & \sqrt{2}\zeta & -\zeta - w & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \zeta - 2\mu_B\mathfrak{H} - w
\end{vmatrix} = 0,$$

ahol ζ az (5.9) integrált jelöli. A szekuláris egyenlet megoldásával hat különböző w értéket kapunk, a degeneráció tehát teljesen feloldódik. A megoldások a következők lesznek:

$$\begin{aligned}
w &= \zeta + 2\mu_B\mathfrak{H}, \\
w &= \frac{1}{2}\left[-\zeta - \mu_B\mathfrak{H} + \sqrt{9\zeta^2 + 2\mu_B\mathfrak{H}\zeta + \mu_B^2\mathfrak{H}^2}\right], \\
w &= \frac{1}{2}\left[-\zeta + \mu_B\mathfrak{H} + \sqrt{9\zeta^2 + 2\mu_B\mathfrak{H}\zeta + \mu_B^2\mathfrak{H}^2}\right], \\
w &= \frac{1}{2}\left[-\zeta - \mu_B\mathfrak{H} + \sqrt{9\zeta^2 + 2\mu_B\mathfrak{H}\zeta + \mu_B^2\mathfrak{H}^2}\right], \\
w &= \frac{1}{2}\left[-\zeta - \mu_B\mathfrak{H} - \sqrt{9\zeta^2 + 2\mu_B\mathfrak{H}\zeta + \mu_B^2\mathfrak{H}^2}\right], \\
w &= \zeta - 2\mu_B\mathfrak{H}.
\end{aligned} \tag{24.6.4}$$

Az energiakorrekciókat a mágneses tér függvényében az 79. ábra szemlélteti. Ha $\mathfrak{H} = 0$, tehát nincs külső mágneses tér, úgy visszakapjuk a spin-pálya kölcsön-

hatásnak megfelelő

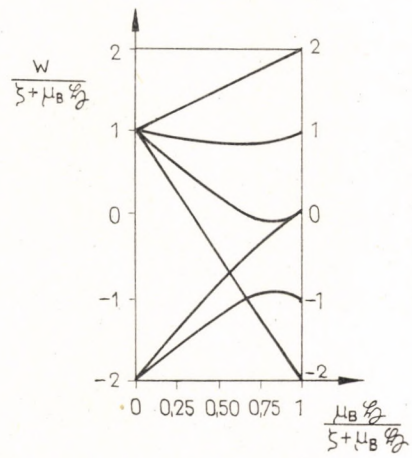
$$w = \zeta \text{ (négyszeres gyök)},$$

$$w = -2\zeta \text{ (kétszeres gyök)}$$

felhasadást, míg a $\mu_B \mathfrak{H} \gg \zeta$ esetben (6.4) átmegy a normális *Zeeman*-effektust leíró értékekbe:

$$w = 2\mu_B \mathfrak{H}, \quad w = \mu_B \mathfrak{H}, \quad w = 0 \text{ (kétszeres gyök)},$$

$$w = -\mu_B \mathfrak{H}, \quad w = -2\mu_B \mathfrak{H}.$$



79. ábra. A p termek anomális *Zeeman*-felhasadása

Hogy a normális *Zeeman*-effektus milyen erős mágneses terekben következik be, ahhoz tájékozódásul számítsuk ki ζ értékét a hidrogénatom $2p$ termjének esetében. A V potenciál hidrogénben csak a magtól származik: $V = -e^2/r$ a radiális hullámfüggvényt pedig (23.14.22)-ből olvashatjuk ki:

$$R_{2p}(r) = (25a_{\mathrm{H}}^5)^{-\frac{1}{2}} r e^{-\frac{r}{2a_{\mathrm{H}}}}.$$

Ezeket (5.9)-be írva, a

$$\zeta = \frac{2\pi^4 e^8 m_0}{3h^4 c^2} = 6{,}04 \cdot 10^{-5}\,\mathrm{eV}$$

értéket kapjuk. A normális *Zeeman*-effektus akkor következik be, ha $\mu_B \mathfrak{H}$ sokkal nagyobb ζ-nál, tehát ha

$$\mathfrak{H} \gg \frac{\zeta}{\mu_B} = 1{,}04 \cdot 10^4 \,\mathrm{gauss}\,.$$

7. §. A hidrogénatom Stark-effektusa

A kvantummechanikai perturbációszámítással a 21. fejezet 5. §-ban leírt *Stark*-effektusról is számot adhatunk. Csak a legegyszerűbb esettel, a hidrogénszerű atomok termjeinek *Stark*-effektusával fogunk részletesen foglalkozni. A perturbálatlan atom *Schrödinger*-egyenletét a 23. fejezet 14. §-ban már megoldottuk. Ha a koordinátarendszerünk z-tengelyét a külső elektromos tér irányába fektetjük, úgy a perturbáció energiája

$$\mathcal{H} = -e\mathfrak{E}z = -e\mathfrak{E}r\cos\vartheta, \tag{24.7.1}$$

ahol $\mathfrak{E}$ az elektromos tér erőssége. Mivel sem a perturbálatlan atom energiája, sem a perturbáció nem tartalmaz az elektronspinnel kapcsolatos mennyiségeket, ezért a *Stark*-effektusnál a spintől eltekinthetünk.

A perturbálatlan atom alapállapotához (tehát az $n = 1$ főkvantumszámhoz) egyetlen sajátfüggvény tartozik:

$$\psi_{100} = R_{10}(r)Y_0^0(\vartheta, \phi) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_H^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_H}}.$$

Az alapállapot perturbációját első közelítésben (1.16) adja meg:

$$w = \int \psi_{100}^* \mathcal{H}\psi_{100}\, dv = 0, \tag{24.7.2}$$

mert a ψ sajátfüggvény gömbszimmetrikus, a $\mathcal{H}$ perturbáció pedig páratlan függvény. Foglalkozzunk most az első gerjesztett állapottal ($n = 2$). Ennek energiája $E_2 = -e^2/8a_H$ és ehhez négy sajátfüggvény tartozik:

$$\psi_{200} = R_{20}(r)Y_0^0(\vartheta, \phi) = \left(\frac{Z^3}{8\pi a_H^3}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a_H}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_H}},$$

$$\psi_{211} = R_{21}(r)Y_1^1(\vartheta, \phi) = \left(\frac{Z^3}{8\pi a_H^3}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{Zr}{2a_H} e^{-\frac{Zr}{2a_H}} \sin\vartheta \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}},$$

$$\psi_{210} = R_{21}(r)Y_1^0(\vartheta, \phi) = \left(\frac{Z^3}{8\pi a_H^3}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{Zr}{2a_H} e^{-\frac{Zr}{2a_H}} \cos\vartheta,$$

$$\psi_{21,-1} = R_{21}(r)Y_1^{-1}(\vartheta, \phi) = \left(\frac{Z^3}{8\pi a_H^3}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{Zr}{2a_H} e^{-\frac{Zr}{2a_H}} \sin\vartheta \frac{e^{-i\phi}}{\sqrt{2}}.$$

Képezzük ezek segítségével a perturbáció $\mathcal{H}^{(2)}_{lm,l'm'}$ mátrixelemeit az (1.23) szabály szerint. A mátrixelemek közül csak kettő, éspedig

$$\mathcal{H}^{(2)}_{10,00} = \mathcal{H}^{(2)}_{00,10} = \int \psi_{210}^* \mathcal{H}\psi_{200} dv \tag{24.7.3}$$

lesz zérustól különböző, a többiben ugyanis az integrandus a koordináták páratlan függvénye. A (7.3) integrál elemi úton kiszámítható, az eredmény $-3e\mathfrak{E}a_H$

lesz. A w energiakorrekcióra így a következő szekuláris egyenletet kapjuk:

$$\begin{vmatrix} -w & -3e\mathfrak{E}a_H & 0 & 0 \\ -3e\mathfrak{E}a_H & -w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -w & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -w \end{vmatrix} = 0. \qquad (24.7.4)$$

Vagy kifejtve:

$$w^2(w^2 - 9e^2\mathfrak{E}^2a_H^2) = 0. \qquad (24.7.5)$$

Ennek a negyedfokú algebrai egyenletnek megoldásai a következők:

$$w = 3e\mathfrak{E}a_H,$$

$$w = 0 \text{ (kétszeres gyök)},$$

$$w = -3e\mathfrak{E}a_H. \qquad (24.7.6)$$

Az $n = 2$ energiaterm tehát elektromos térben három részre hasad fel, melynek energiái rendre

$$-\frac{e^2}{8a_H} + 3e\mathfrak{E}a_H, \quad -\frac{e^2}{8a_H}, \quad -\frac{e^2}{8a_H} - 3e\mathfrak{E}a_H.$$

Végeredményben az $n = 2 \to n = 1$ kvantumátmenet spektrumvonala helyett elektromos erőtérben három vonalat kapunk. Ezt a kísérleti adatok is alátámasztják. Megjegyezzük, hogy a *Stark*-effektus nívófelhasadása igen kicsiny a perturbálatlan energiához képest. A relatív energiakorrekció ugyanis

$$\eta = \frac{3e\mathfrak{E}a_H}{e^2/8a_H} = 0{,}466 \cdot 10^{-8}\,\mathfrak{E},$$

ha $\mathfrak{E}$-t Vcm^{-1} egységekben mérjük. Ez még $\mathfrak{E} = 2 \cdot 10^4\,\mathrm{Vcm}^{-1}$ térerősség esetén sem éri el az egy tízezreléket.

8. §. A kételektron-probléma

Tekintsünk egy konzervatív erőteret, melynek potenciálja $V(\mathbf{r})$. Ebben az erőtérben mozgó m_0 tömegű részecske energiaoperátora

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\Delta + V(\mathbf{r}). \qquad (24.8.1)$$

A továbbiakban feltételezzük, hogy ehhez az operátorhoz tartozó *Schrödinger*-egyenletet megoldottuk már, tehát ismeretesek az E_k sajátértékek és $\psi_k(\mathbf{r})$ sajátfüggvények. Most azzal a problémával fogunk foglalkozni, amikor a $V(\mathbf{r})$ erőtérben két egyforma részecske mozog. (Ilyen rendszer például a He-atom vagy a

H_2-molekula.) A két részecskéből álló rendszer energiaoperátora

$$\mathsf{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\Delta_1 - \frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\Delta_2 + V(\mathbf{r}_1) + V(\mathbf{r}_2) + v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \qquad (24.8.2)$$

ahol $v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ a két részecske kölcsönhatási energiája. A H operátor a következő alakban írható:

$$\mathsf{H} = H^0 + \mathcal{H}, \qquad (24.8.3)$$

$$H^0 = H(1) + H(2), \qquad (24.8.4)$$

$$\mathcal{H} = v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \qquad (24.8.5)$$

ahol $H(1)$ és $H(2)$ az 1-es illetve a 2-es részecskére vonatkozó (8.1) energiakifejezést jelöli. A H operátor sajátértékeit és sajátfüggvényeit perturbációszámítással fogjuk meghatározni, perturbációnak a két részecske kölcsönhatását tekintjük. Mindenek előtt ismernünk kell a H^0 operátorhoz tartozó *Schrödinger*-egyenlet megoldását:

$$H^0\psi^0 = E^0\psi^0. \qquad (24.8.6)$$

Könnyen beláthatjuk, hogy a

$$\psi^0_{kl}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_l(\mathbf{r}_2) \qquad (24.8.7)$$

függvény megoldása a (8.6) *Schrödinger*-egyenletnek:

$$H^0\psi^0_{kl}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_l(\mathbf{r}_2)H(1)\psi_k(\mathbf{r}_1) + \psi_k(\mathbf{r}_1)H(2)\psi_l(\mathbf{r}_2) =$$
$$= (E_k + E_l)\psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_l(\mathbf{r}_2) = (E_k + E_l)\psi^0_{kl}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

és a megfelelő sajátérték, amint látjuk:

$$E^0_{kl} = E_k + E_l. \qquad (24.8.8)$$

Ez a sajátérték degenerált, mert a (8.7) alatti ψ^0_{kl} sajátfüggvényen kívül a

$$\psi^0_{lk}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_l(\mathbf{r}_1)\psi_k(\mathbf{r}_2) \qquad (24.8.9)$$

sajátfüggvény is ugyanehhez a sajátértékhez tartozik. Kivétel ez alól csak a $k = l$ eset, mert ekkor (8.7) és (8.9) azonosak. Az $E^0_{kk} = 2E_k$ sajátértékhez tehát csak egy sajátfüggvény, éspedig

$$\psi^0_{kk}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_k(\mathbf{r}_2) \qquad (24.8.10)$$

tartozik.

Most térjünk rá a kölcsönhatásból származó w energiakorrekció meghatározására. Tekintsük először a $k = l$ esetet. Ekkor alkalmazható az egyszerű sajátértékekre vonatkozó (1.16) képlet, az integrált természetesen a hullámfüggvényben előforduló valamennyi változóra ki kell terjeszteni:

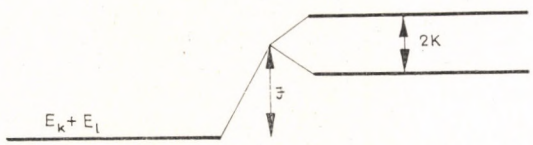
$$w = \int \psi^{0*}_{kk}\mathcal{H}\psi^0_{kk}dv = \int\int \psi^*_k(\mathbf{r}_1)\,\psi^*_k(\mathbf{r}_2)\,v(\mathbf{r}_1, r_2)\,\psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_k(\mathbf{r}_2)\,dv_1dv_2\,. \qquad (24.8.11)$$

Tekintsük ezután a $k \neq l$ esetet. Most két sajátfüggvényünk van, ψ^0_{kl} és ψ^0_{lk}, ennek megfelelően a w energiakorrekciót egy 2×2 méretű szekuláris egyenlet adja meg:

$$\begin{vmatrix} J_1 - w & K_1 \\ K_2 & J_2 - w \end{vmatrix} = 0 . \tag{24.8.12}$$

A mátrixelemek kifejezései a következők:

$$\begin{aligned} J_1 &= \int \psi^{0*}_{kl} \mathcal{H} \psi^0_{kl} dv = \int\int \psi^*_k(\mathbf{r}_1)\psi^*_l(\mathbf{r}_2)\, v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_l(\mathbf{r}_2) dv_1 dv_2 , \\ K_1 &= \int \psi^{0*}_{kl} \mathcal{H} \psi^0_{lk} dv = \int\int \psi^*_k(\mathbf{r}_1)\psi^*_l(\mathbf{r}_2)\, v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi_l(\mathbf{r}_1)\psi_k(\mathbf{r}_2) dv_1 dv_2 , \\ K_2 &= \int \psi^{0*}_{lk} \mathcal{H} \psi^0_{lk} dv = \int\int \psi^*_l(\mathbf{r}_1)\psi^*_k(\mathbf{r}_2)\, v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_l(\mathbf{r}_2) dv_1 dv_2 , \\ J_2 &= \int \psi^{0*}_{lk} \mathcal{H} \psi^0_{lk} dv = \int\int \psi^*_l(\mathbf{r}_1)\psi^*_k(\mathbf{r}_2)\, v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi_l(\mathbf{r}_1)\psi_k(\mathbf{r}_2) dv_1 dv_2 . \end{aligned} \tag{24.8.13}$$



80. ábra. A kölcsönhatás okozta energiaperturbáció

Azonos, egymástól megkülönböztethetetlen részecskék kölcsönhatási energiája nem változik meg, ha a két részecskét felcseréljük:

$$v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = v(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1).$$

A kölcsönhatás e tulajdonságának a továbbiak szempontjából igen fontos következménye van. Ha (8.13) két első képletében elvégezzük az $\mathbf{r}_1 \rightleftarrows \mathbf{r}_2$ helyettesítést, és figyelembe vesszük v fenti szimmetriáját, úgy meggyőződhetünk arról, hogy $J_1 = J_2$ és $K_1 = K_2$. A szekuláris egyenlet tehát a következő alakú:

$$\begin{vmatrix} J - w & K \\ K & J - w \end{vmatrix} = 0 . \tag{24.8.14}$$

Szokás J-t a két részecske közönséges, K-t pedig kicserélődési kölcsönhatásának nevezni. A fenti determinánst kifejtve a

$$w^2 - 2Jw + J^2 - K^2 = 0$$

másodfokú egyenletet kapjuk, melynek megoldása

$$w = J \pm K. \tag{24.8.15}$$

A H energiaoperátor sajátértéke ezek szerint

$$E = E_k + E_l + J \pm K. \tag{24.8.16}$$

Az $E_k + E_l$ perturbálatlan energiákból és a J közönséges energiából adódik össze, és még hozzá kell venni a K kicserélődési energiát + vagy − előjellel. A kölcsön-

hatás következtében az energianívó eltolódik J-vel és felhasad két részre, a felhasadás mértéke $2K$.

Határozzuk meg a (8.16) sajátértékekhez tartozó sajátfüggvényeket. Nulladik közelítésben (1.27) szerint

$$\psi^0 = c_1\psi^0_{kl} + c_2\psi^0_{lk}, \tag{24.8.17}$$

ahol a c_1 és c_2 együtthatók kielégítik a következő homogén egyenletrendszert:

$$\begin{aligned}(J - w)c_1 + Kc_2 &= 0,\\ Kc_1 + (J - w)c_2 &= 0.\end{aligned} \tag{24.8.18}$$

Vegyük először a $w = J + K$ gyököt. Most (8.18) mindkét egyenlete azt mutatja, hogy $c_1 = c_2$. Közös értéküket a (8.17) sajátfüggvényre vonatkozó normáltsági követelmény szabja meg, melyből erre a $\sqrt{1/2}$ értéket kapjuk. A normált sajátfüggvény tehát

$$\psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_l(\mathbf{r}_2) + \psi_l(\mathbf{r}_1)\psi_k(\mathbf{r}_2)]. \tag{24.8.19}$$

Ez a sajátfüggvény a két részecske koordinátáinak szimmetrikus függvénye:

$$\psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi^0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1).$$

A szekuláris egyenlet másik megoldása $w = J - K$. Ekkor (8.18) mindkét egyenlete a $c_1 = -c_2$ eredményre vezet. Az ennek megfelelő normált sajátfüggvény

$$\psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_k(\mathbf{r}_1)\psi_l(\mathbf{r}_2) - \psi_l(\mathbf{r}_1)\psi_k(\mathbf{r}_2)]. \tag{24.8.20}$$

Ez a sajátfüggvény pedig a koordináták antiszimmetrikus függvénye:

$$\psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\psi^0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1).$$

Alkalmazzuk eredményeinket a héliumatom és a héliumszerű ionok esetére, melyekben egy Ze töltésű mag körül két elektron kering. A (8.1) egyrészecske-operátor most

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\Delta - \frac{Ze^2}{r}$$

lesz, tehát a hidrogénszerű ionok energiakifejezése. Ennek sajátértékeit és sajátfüggvényeit a 23. fejezet 14. §-ban meghatároztuk.

Vizsgáljuk először a hélium alapállapotát. Ekkor mindkét elektron az $1s$ állapotban van, tehát a kölcsönhatás-mentes operátor sajátértéke

$$E^0_{11} = 2E_1 = -\frac{4\pi^2 m_0 Z^2 e^4}{h^2} = -\frac{Z^2 e^2}{a_H}, \tag{24.8.21}$$

a hidrogén ionizációs energiájának duplája. Az ehhez tartozó (8.10) perturbálatlan sajátfüggvény:

$$\psi^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\,\psi_{100}(\mathbf{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi a_H^3} e^{-\frac{Z}{a_H}(r_1+r_2)}. \tag{24.8.22}$$

Számítsuk ki most a kölcsönhatásból származó (8.11) energiakorrekciót. v most a két elektron *Coulomb*-kölcsönhatását jelöli: $v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^2/r_{12}$, ahol $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ rövidítő jele

$$w = \frac{Z^6 e^2}{\pi^2 a_H^6} \iint \frac{e^{-\frac{2Z}{a_H}(r_1+r_2)}}{r_{12}}\, dv_1 dv_2\,. \tag{24.8.23}$$

Az elektrosztatikai potenciálelmélet egy jól ismert tétele szerint bármely $\rho(r)$ gömbszimmetrikus függvényre igaz, hogy

$$\int \frac{\rho(r_2)}{r_{12}}\, dv_2 = \frac{1}{r_1}\int_0^{r_1} \rho(r_2)\, 4\pi r_2^2 dr_2 + \int_{r_1}^{\infty} \rho(r_2)\, 4\pi r_2 dr_2\,, \tag{24.8.24}$$

így

$$\int \frac{e^{-\frac{2Z}{a_H} r_2}}{r_{12}}\, dv_2 = \frac{\pi a_H^2}{Z^2}\left\{\frac{a_H}{Zr_1} - \left(1 + \frac{a_H}{Zr_1}\right) e^{-\frac{2Zr_1}{a_H}}\right\}.$$

Ennek felhasználásával (8.23) kettős integrálja könnyen kiszámítható:

$$w = \frac{Z^6 e^2}{\pi^2 a_H^6} \cdot \frac{\pi a_H^2}{Z^2} \int_0^{\infty} \left\{\frac{a_H}{Zr_1} - \left(1 + \frac{a_H}{Zr_1}\right)\right\} e^{-\frac{2Zr_1}{a_H}} 4\pi r_1^2 dr_1 = \frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a_H}. \tag{24.8.25}$$

A héliumatom, ill. a héliumszerű ionok alapállapotának energiáját tehát a következő képlet adja meg:

$$E_{11} = -\left(Z^2 - \frac{5}{8}Z\right)\frac{e^2}{a_H}. \tag{24.8.26}$$

Az ionizációs energia az a munka, amit az egyik elektron leszakításakor végezni kell. Ionizáció után egy egyelektronos, hidrogénszerű ion marad vissza, melynek energiája $E_1 = -Z^2 e^2/2a_H$. Az ionizációs munka tehát:

$$I = E_1 - E_{11} = \left(\frac{1}{2}Z^2 - \frac{5}{8}Z\right)\frac{e^2}{a_H}. \tag{24.8.27}$$

Az itt fellépő e^2/a_H univerzális állandó az elméleti atom- és molekulafizika legtermészetesebb energiaegysége. Értéke: $e^2/a_H = 27{,}23$ eV.

Az alapállapot után következő első gerjesztett állapotban az egyik elektron már $2s$ nívóra kerül, a másik az $1s$ nívón marad. A kölcsönhatásmentes H^0 operátor

megfelelő sajátértéke most

$$E_{12}^0 = E_1 + E_2 = -\frac{Z^2e^2}{2a_H}\left(\frac{1}{1^2}+\frac{1}{2^2}\right) = -\frac{5Z^2e^2}{8a_H}. \qquad (24.8.28)$$

A kölcsönhatásból származó energiakorrekció (8.15) szerint a J közönséges és a K kicserélődési energiából épül fel. Ezek értékét a (8.13) integrálok adják meg, melyekben most ψ_k és ψ_l helyébe a hidrogén $1s$ és $2s$ állapotának megfelelő sajátfüggvények kerülnek:

$$J = \int\int \psi_{100}^*(\mathbf{r}_1)\psi_{200}^*(\mathbf{r}_2)\frac{e^2}{r_{12}}\psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{200}(\mathbf{r}_2)dv_1dv_2,$$

$$K = \int\int \psi_{100}^*(\mathbf{r}_1)\psi_{200}^*(\mathbf{r}_2)\frac{e^2}{r_{12}}\psi_{200}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)dv_1dv_2.$$

Ha ide még beírjuk a hidrogén-sajátfüggvények kifejezéseit:

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_H^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_H}},$$

$$\psi_{200}(\mathbf{r}) = \left(\frac{Z^3}{8\pi a_H^3}\right)^{\frac{1}{2}}\left(1-\frac{Zr}{2a_H}\right)e^{-\frac{Zr}{2a_H}},$$

úgy olyan integrálokat kapunk, melyek a (8.24) tétel segítségével könnyen kiszámíthatók. Az eredmény:

$$J = \frac{17}{81}\frac{Ze^2}{a_H} \quad \text{és} \quad K = \frac{16}{729}\frac{Ze^2}{a_H}. \qquad (24.8.29)$$

A héliumatom (és a héliumszerű ionok) első gerjesztett energiája tehát:

$$E_{12} = E_{12}^0 + J \pm K = \left(-\frac{5}{8}Z^2 + \frac{17}{81}Z \pm \frac{16}{729}Z\right)\frac{e^2}{a_H}. \qquad (24.8.30)$$

A felső előjel a szimmetrikus, az alsó az antiszimmetrikus sajátfüggvényhez tartozik. A (8.26) és (8.29) különbsége megadja a gerjesztéshez szükséges energiát. A semleges héliumatom esetén a következő értékeket kapjuk:

	Szimmetrikus állapot	Antiszimmetrikus állapot
$\Delta E = E_{12} - E_{11}$:	$0{,}7135\frac{e^2}{a_H}$,	$0{,}6257\frac{e^2}{a_H}$.
Kísérleti adat:	$0{,}7571\frac{e^2}{a_H}$,	$0{,}7279\frac{e^2}{a_H}$.

Ennél jobb egyezést a perturbációszámítás első közelítéséből nem is várhatunk, hiszen a két elektron e^2/r_{12} kölcsönhatása nem nagyságrendekkel kisebb, mint a perturbálatlan energia.

Ez ideig csak a két elektron térbeli mozgását vizsgáltuk, most foglalkozzunk a két elektron spinállapotaival. Két elektron a két elehetséges spinállapotot összesen négyféleképpen foglalhatja el:

$$\begin{aligned}
\chi_{++}(s_1, s_2) &= \chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\,\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2),\\
\chi_{+-}(s_1, s_2) &= \chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\,\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2),\\
\chi_{-+}(s_1, s_2) &= \chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\,\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2),\\
\chi_{--}(s_1, s_2) &= \chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\,\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2).
\end{aligned} \tag{24.8.31}$$

E függvények helyett sokszor célszerű a belőlük alkotott szimmetrikus és antiszimmetrikus kombinációkat használni:

$$\begin{aligned}
\chi_{11}(s_1, s_2) &= \chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\,\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2),\\
\chi_{10}(s_1, s_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\,\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2) + \chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\,\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2)\right],\\
\chi_{1,-1}(s_1, s_2) &= \chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\,\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2),\\
\chi_{00}(s_1, s_2) &+ \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\,\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2) - \chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\,\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2)\right].
\end{aligned} \tag{24.8.32}$$

Az első három spinfüggvény s_1, s_2-nek szimmetrikus, a negyedik pedig antiszimmetrikus kombinációja. Könnyen beláthatjuk, ezek a függvények sajátfüggvényei a két elektron $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ eredő spinjének. Az 255. oldalon levő táblázatban összefoglalt formulák szerint ugyanis

$$\begin{aligned}
(S_1 + S_2)^2\,\chi_{\mathcal{S},\mathcal{M}} &= \frac{\mathcal{S}(\mathcal{S}+1)h^2}{4\pi^2}\,\chi_{\mathcal{S}\mathcal{M}},\\
(S_{1z} + S_{2z})\,\chi_{\mathcal{S}\mathcal{M}} &= \frac{\mathcal{M}h}{2\pi}\,\chi_{\mathcal{S}\mathcal{M}},\\
(\mathcal{S} = 0 \text{ vagy } 1 \text{ és } \mathcal{M} &= -\mathcal{S}, 0, \mathcal{S}).
\end{aligned} \tag{24.8.33}$$

Ezek a képletek mutatják, hogy az eredő spin a 23. fejezet 9.§-ban megismert általános szabályoknak megfelelően kvantálódik. (8.32)-ben a szimmetrikus függvények az $\mathcal{S} = 1$ eredő spinértékhez tartoznak, és az $\mathcal{M}$ vetületkvantumszám három lehetséges értéke különbözteti meg őket. Az antiszimmetrikus kombináció pedig az $\mathcal{S} = \mathcal{M} = 0$ értékekhez tartozik. Külső mágneses térben a különböző $\mathcal{M}$ értékekhez tartozó állapotoknak különböző lesz a mágneses energiája. Emiatt az $\mathcal{S} = 1$-nek megfelelő szimmetrikus állapotok három különböző nívóra hasadnak fel (triplett term), az $S = 0$ értékű antiszimmetrikus állapot pedig nem hasadhat fel (szinglett term).

A hélium *Zeeman*-effektusának analízise arra az érdekes tapasztalatra vezet, hogy a hélium alapállapota mindig szinglett állapot, a triplett spinkombináció alapállapotú héliumatomban sohasem valósul meg. A gerjesztett állapotok közül azok, melyeknél a térbeli mozgást leíró $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ szimmetrikus $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$-ben, szintén mindig szinglett termek, antiszimmetrikus $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$-höz pedig minden esetben triplett term tartozik. A héliumatom állapotai tehát két nagy csoportra oszthatók. Az első csoportot szimmetrikus térbeli és antiszimmetrikus spinfüggvény jellemzi, a második csoportban pedig fordított a helyzet, a sajátfüggvény antiszimmetrikus térfüggvényből és szimmetrikus spinfüggvényből épül fel. A két csoport állapotai között az átmenet valószínűsége rendkívül kicsiny, ezért látszatra a természetben kétféle hélium van. Az első fajtát, amelyben a termek szinglettek, *para-héliumnak* nevezik, a másodikat, a triplett termekkel rendelkezőt pedig *orto-héliumnak*.

Mindkét termcsoportra közösen jellemző, hogy ha az elektronoknak mind a hely-, mind a spinkoordinátáját felcseréljük, akkor a sajátfüggvény antiszimmetrikusan viselkedik:

$$\psi(\mathbf{r}_1 s_1; \mathbf{r}_2 s_2) = -\psi(\mathbf{r}_2 s_2; \mathbf{r}_1 s_1). \tag{24.8.34}$$

(Para-héliumban ugyanis a spin-, orto-héliumban a helyfüggvény vált jelet.) A tapasztalat szerint ez a törvényszerűség kivétel nélkül minden atom és molekula elektronfelhőjére, általában minden elektronrendszerre igaz: az állapotfüggvények antiszimmetrikusak, azaz két elektron koordinátáinak felcserélésekor előjelet váltanak. Ez a *Pauli*-elv általános kvantummechanikai megfogalmazása. Az eredeti *Pauli*-féle megfogalmazás, melyet a 21. fejezet 9.§-ban megismertünk, ennek egyszerű következménye.

9. §. Variációs módszer

Az atomok és molekulák kvantumelméletében talán a leghatásosabb közelítő eljárás a variációs módszer. Itt most csak az alapállapot, tehát a legmélyebb energiájú állapot meghatározásával fogunk foglalkozni, a variációs módszer azonban kiterjeszthető a gerjesztett állapotokra is.

Legyen ϕ egy tetszés szerinti függvénye a vizsgált rendszer koordinátáinak, melyről csak azt tételezzük fel, hogy 1-re normálva van, azaz

$$\int \phi^* \phi \, dv = 1. \tag{24.9.1}$$

Fejtsük sorba ϕ-t a H energiaoperátor sajátfüggvényei szerint

$$\phi = \sum_k c_k \psi_k, \tag{24.9.2}$$

ahol tehát ψ_k kielégíti a H-hoz tartozó *Schrödinger*-egyenletet:

$$H\psi_k = E_k \psi_k. \tag{24.9.3}$$

Mivel ϕ normált függvény, ezért a c_k együtthatók négyzetösszege 1 lesz. (9.2) és

(9.1) miatt ugyanis:

$$\int \phi^* \phi dv = \sum_{k,l} c_k^* c_l \int \psi_k^* \psi_l dv = 1.$$

A (22.8.8) ortogonalitási reláció miatt az $\int \psi^*{}_k \psi_l dv$ integrál zérus lesz, ha $k \neq l$, a $k = l$ esetben viszont az integrál értéke 1 lesz, mert a ψ_k sajátfüggények is normáltak. Kapjuk tehát, hogy

$$\sum_k | c_k |^2 = 1. \tag{24.9.4}$$

Képezzük a H operátor kvantummechanikai középértékét a ϕ függvény segítségével:

$$\int \phi^* H \phi dv = \sum_{k,l} c_k^* c_l \int \psi_k^* H \psi_l dv = \sum_{k,l} c_k^* c_l E_l \int \psi_k^* \psi_l dv = \sum_k | c_k |^2 E_k. \tag{24.9.5}$$

Itt felhasználtuk a (9.3) *Schrödinger*-egyenletet, és ismét figyelembe vettük a ψ_k függvények ortogonalitását és normált voltát. A jobb oldalon álló összeg nyilván csökken, ha minden E_k helyébe a legkisebb sajátértéket, az alapállapot energiáját írjuk:

$$\int \phi^* H \phi dv = \sum_k | c_k |^2 E_k \geq E_0 \sum_k | c_k |^2 = E_0, \tag{24.9.6}$$

mert a c_k együtthatók négyzetösszege, amint láttuk, 1. A $\geq$ relációból az egyenlőség csak úgy valósulhat meg, ha az alapállapot c_0 együtthatója 1, az összes többi c_k pedig zérus. Ez viszont a (9.2) sorfejtés szerint azt jelenti, hogy $\phi = \psi_0$. Összefoglalva tehát eredményeinket:

$$\int \phi^* H \phi dv \geq E_0 \qquad \text{ha} \qquad \int \phi^* \phi dv = 1,$$

$$\text{egyenlőség csak } \phi = \psi_0 \text{ esetén.} \tag{24.9.7}$$

Ez azt jelenti, hogy az alapállapot E_0 energiáját és ψ_0 sajátfüggvényét a következő feltételes szélsőérték-probléma megoldásával kapjuk:

$$\int \phi^* H \phi dv = \text{minimum}, \qquad \int \phi^* \phi dv = 1. \tag{24.9.8}$$

Az E_0 sajátértéket és ψ_0 sajátfüggvényt közelítőleg a *Ritz*-eljárással határozhatjuk meg. ϕ számára felveszünk egy próbakifejezést, amely az $\int \phi^* \phi dv = 1$ mellékfeltételt kielégíti és (a koordinátákon kívül) egy vagy több λ variációs paraméter függvénye. Kiszámítjuk az

$$E(\lambda) = \int \phi_\lambda^* H \phi_\lambda dv \tag{24.9.9}$$

integrált, és meghatározzuk a λ paraméter azon értékét, amely mellett $E(\lambda)$ minimális. Legyen ez λ_0. Akkor közelítőleg

$$E_0 = E(\lambda_0) \quad \text{és} \quad \psi_0 = \phi_{\lambda_0}. \tag{24.9.10}$$

Ez a közelítő energiaérték természetesen mindig felülről közelít, tehát sohasem lehet kisebb, mint az egzakt E_0.

A variációs módszer egyik igen gyakran alkalmazott változatánál a ϕ próbakifejezést a

$$\phi = c_1 f_1 + c_2 f_2 + \ldots + c_p f_p \tag{24.9.11}$$

alakban vesszük fel, ahol $f_1, \ldots, f_p$ előre adott függvények és $c_1, \ldots, c_p$ a variációs paraméterek. Az f_α függvényekről nem tételezzük fel sem azt, hogy normáltak, sem pedig azt, hogy egymásra ortogonálisak. A ϕ függvényre vonatkozó normáltsági feltételből a c_α együtthatókra a

$$\sum_{\alpha,\beta=1} S_{\alpha\beta} c_\alpha^* c_\beta = 1 \tag{24.9.12}$$

kikötést kapjuk, ahol

$$S_{\alpha\beta} = \int f_\alpha^* f_\beta dv. \tag{24.9.13}$$

Képezzük most a H energiaoperátor kvantummechanikai középértékét ϕ-vel:

$$E(c_1, c_2, \ldots, c_p) = \sum_{\alpha,\beta=1}^{p} H_{\alpha\beta} c_\alpha^* c_\beta, \tag{24.9.14}$$

melyben $H_{\alpha\beta}$ a következő mátrixelemet jelöli:

$$H_{\alpha\beta} = \int f_\alpha^* H f_\beta dv. \tag{24.9.15}$$

A fenti energiakifejezés minimumának keresésekor tekintettel kell lennünk a (9.18) mellékfeltételre is. LAGRANGE eljárása szerint a

$$W(c_1, c_2, \ldots, c_p) = \sum_{\alpha,\beta=1}^{p} (H_{\alpha\beta} - \varepsilon S_{\alpha\beta}) c_\alpha^* c_\beta$$

kifejezés feltétlen minimumát keressük, ahol ε egy *Lagrange*-multiplikátor. A $\partial W / \partial c_\alpha^* = 0$ szélsőértékfeltételből a következő algebrai egyenletet kapjuk:

$$\sum_{\beta=1}^{p} (H_{\alpha\beta} - \varepsilon S_{\alpha\beta}) c_\beta = 0. \tag{24.9.16}$$

Ez egy lineáris homogén egyenletrendszer a c_β együtthatókra. Triviálistól különböző megoldást csak akkor kapunk, ha az egyenletrendszer D determinánsa eltűnik. Ebből a feltételből az ε *Lagrange*-multiplikátor meghatározható, és ε ismeretében (9.16) megadja a c_β együtthatók egymáshoz való viszonyát. c_β-k tényleges értékének kiszámításához még (9.12)-t is tekintetbe kell vennünk.

A c_α együtthatók és ε ismeretében rátérhetünk az E energia minimumértékének meghatározására. Szorozzuk meg a (9.16) minimumfeltételt c_α^*-gal és összegezzünk $\alpha = 1$-től $\alpha = p$-ig

$$\sum_{\alpha,\beta=1}^{p} H_{\alpha\beta} c_\alpha^* c_\beta - \varepsilon \sum_{\alpha,\beta=1}^{p} S_{\alpha\beta} c_\alpha^* c_\beta = 0.$$

Az első összeg (9.14) szerint éppen az E energiával egyenlő, a második összeg értéke pedig (9.12) szerint 1. Végeredményben tehát $E = \varepsilon$, vagyis az energia

minimumértéke megegyezik a *Lagrange*-multiplikátorral. (9.16) determinánsának eltűnéséből, vagyis a

$$D \equiv \begin{vmatrix} H_{11} - ES_{11} & H_{12} - ES_{12} \dots & H_{1p} - ES_{1p} \\ H_{21} - ES_{21} & H_{22} - ES_{22} \dots & H_{2p} - ES_{2p} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{p1} - ES_{p1} & H_{p2} - ES_{p2} \dots & H_{pp} - ES_{pp} \end{vmatrix} = 0 \qquad (24.9.17)$$

egyenletből E közvetlenül kiszámítható. Megjegyezzük, hogy (9.17) egy p-edfokú algebrai egyenlet lévén, több megoldása is lehet. Az alapállapot energiáját a legkisebb gyök közelíti, a többi gyök a gerjesztett állapotok energiájának felel meg. (Ez utóbbiakra azonban a (9.17) általában elég rossz közelítést jelent.)

10. §. A héliumatom alapállapota

A héliumatom és a héliumszerű ionok problémáját a 8. §-ban a perturbációszámítás segítségével már megoldottuk. Most ugyanezt a problémát a variációs módszerrel fogjuk megvizsgálni. A variációs módszer ugyanis, a ϕ próbakifejezés alkalmas megválasztása esetén, lényegesen pontosabb eredményt ad, mint az egyszerű perturbációszámítás. Az energiaoperátor (8.2) mintájára

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\Delta_1 - \frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\Delta_2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}, \qquad (24.10.1)$$

ahol Z a mag rendszáma. Az alapállapot sajátfüggvényét keressük (8.22)-höz hasonló alakban, csak a Z rendszám helyébe írjunk egy Z^* variációs paramétert:

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{Z^*}{\pi a_H^3} e^{-\frac{Z^*}{a_H}(r_1 + r_2)}. \qquad (24.10\ 2)$$

A H energiaoperátor kvantummechanikai középértéke három tagból tevődik össze: az elektronok kinetikus energiájából (E_k), a Z töltésű atommagtól származó potenciális energiából (E_c) és végül a két elektron egymással való kölcsönhatásának energiájából (E_w). Az egyes energiatagokra egyszerű számítás után a következő kifejezéseket kapjuk:

$$E_k = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\int\int \phi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)(\Delta_1 + \Delta_2)\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)dv_1 dv_2 = \frac{Z^{*2}e^2}{a_H},$$

$$E_c = -\int\int \phi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\left(\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}\right)\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)dv_1 dv_2 = -\frac{2ZZ^*e^2}{a_H},$$

$$E_w = \int\int \phi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\frac{e^2}{r_{12}}\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)dv_1 dv_2 = \frac{5}{8}\frac{Z^*e^2}{a_H}.$$

A teljes $E = E_k + E_c + E_w$ energia a Z^* paraméternek tehát a következő függvénye lesz:

$$E(Z^*) = \left(Z^{*2} - 2ZZ^* + \frac{5}{8}Z^*\right)\frac{e^2}{Z}. \qquad (24.10.3)$$

Ha itt $Z^* = Z$-t írunk, úgy E-re természetesen visszakapjuk a (8.26) kifejezést, a perturbációszámítás eredményét. Mi most Z^*-ot az energiaminimumból fogjuk meghatározni, az eredmény (8.26)-nál csak jobb lehet. Az energiaminimumnak megfelelő Z^*-ot *effektív rendszám*nak szokás nevezni. A minimum feltétele:

$$\frac{dE}{dZ^*} = \left(2Z^* - 2Z + \frac{5}{8}\right)\frac{e^2}{a_H} = 0,$$

ebből az effektív rendszám

$$Z^* = Z - \frac{5}{16}. \qquad (24.10.4)$$

Behelyettesítve az energiakifejezésbe, a következő eredményt kapjuk:

$$E = -\left(Z^2 - \frac{5}{8}Z + \frac{25}{256}\right)\frac{e^2}{a_H}. \qquad (24.10.5)$$

Ha ezt az E értéket levonjuk a hidrogénszerű atom $E_1 = -Z^2e^2/2a_H$ energiájából, úgy megkapjuk az ionizációhoz szükséges munkát:

$$I = E_1 - E = \left(\frac{1}{2}Z^2 - \frac{5}{8}Z + \frac{25}{256}\right)\frac{e^2}{a_H}. \qquad (24.10.6)$$

Az ionizációs munka $\frac{25}{256}\frac{e^2}{a_H}$-val nagyobbnak adódott, mint a perturbációszámítás esetében. A számszerű eredményeket az alábbi táblázatban foglaltuk össze.

A héliumatom és a héliumszerű ionok ionizációs munkája $\frac{e^2}{a_H}$ egységekben

Z	Név	I (8.27)-ből	I (10.6)-ból	I Kísérleti érték
2	He	0,750	0,848	0,9035
3	Li^+	2,625	2,723	2,7798
4	Be^{++}	5,500	5,598	5,6560
5	B^{3+}	9,375	9,473	9,5320
6	C^{4+}	14,250	14,348	14,4070

A héliumatom esetére ($Z = 2$) HYLLERAS igen pontos számításokat végzett. Az alapállapot sajátfüggvényére a

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = Ne^{-\frac{Z^*}{a_H}(r_1+r_2)}[1 + c_1 r_{12} + c_2(r_1 - r_2)^2 + c_3(r_1 + r_2) + \\ + c_4(r_1 + r_2)^2 + c_5 r_{12}^2 + c_6(r_1 + r_2)r_{12}]$$

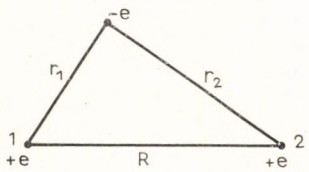
próbakifejezést vette fel, ahol Z^*, c_1, c_2, . . ., c_6 variációs paraméterek, N pedig egy normálási állandó. Az energia minimumára az $E = -2{,}90234\dfrac{e^2}{a_H}$ érték adódott, ebből az ionizációs munka

$$I = 0{,}90324\frac{e^2}{a_H},$$

ami igen jól egyezik a kísérleti értékkel.

11. §. A H_2^+ molekula-ion

A H_2^+ molekula-ion az elképzelhető legegyszerűbb kémiailag kötött rendszer. Két hidrogénmag (proton) körül egyetlen elektron kering. Az egész rendszer eredő elektromos töltése $+ e$, a klasszikus elektromosságtan törvényei szerint egy ilyen rendszernek nincs is stabilis kötött állapota. Az, hogy a természetben mégis megfigyelhető a H_2^+ molekula-ion, az a kvantummechanikai effektusoknak köszönhető. A kvantummechanika nem csak a H_2^+ molekula-ion létét tudja értelmezni, hanem számszerűleg a molekula-ion disszociációs energiájára és az egyensúlyi magtávolságra a tapasztalati adatokkal összhangban álló értékeket ad.



81. ábra. A H_2^+ molekula-ion

Legyenek a H_2^+ molekula-ionban a hidrogénmagok egymástól R távolságban, az elektron távolságát az egyes magoktól pedig jelölje r_1, illetve r_2. Az energia-operátor:

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\Delta - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e_2}{r_2} + \frac{e^2}{R}. \qquad (24.11.1)$$

Az alapállapotot a variációs módszer segítségével akarjuk megkeresni. Ha az R magtávolság igen nagy lenne, úgy nyilván az elektron az egyik maggal egy hidrogénatomot alkotna, melyre a csupaszon maradt mag elhanyagolhatóan kis befo-

lyást gyakorolna. $R \to \infty$ esetén tehát a hullámfüggvény vagy

$$\psi_{100}(r_1) = \left(\frac{1}{\pi a_H^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r_1}{a_H}}, \tag{24.11.2}$$

az 1-es mag körüli $1s$ pályához tartozó sajátfüggvény lesz, vagy pedig

$$\psi_{100}(r_2) = \left(\frac{1}{\pi a_H^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r_2}{a_H}}, \tag{24.11.3}$$

ami a 2-es mag körüli keringésnek felel meg. Véges R magtávolság esetén keressük a sajátfüggvényt a fenti két állapot kombinációjaként:

$$\phi(\mathbf{r}) = c_1\psi_{100}(\mathbf{r}_1) + c_2\psi_{100}(\mathbf{r}_2), \tag{24.11.4}$$

ahol c_1 és c_2 kombinációs együtthatók. Ez a próbakifejezés megfelel a (9.11) általános alaknak, úgyhogy az energiát is a 9. § végén tárgyalt módszerrel határozhatjuk meg. Mivel (11.4) két tagot tartalmaz, ezért a (9.15) energiamátrix és a (9.19) átfedési mátrix 2×2 méretű lesz. A mátrixelemek kifejezései:

$$\begin{aligned}
H_{11} &= \int \psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\, H\psi_{100}(\mathbf{r}_1)dv = -\frac{e^2}{2a_H} + \frac{e^2}{R} - P,\\
H_{12} &= \int \psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\, H\psi_{100}(\mathbf{r}_2)dv = -\frac{e^2}{2a_H}S + \frac{e^2}{R}S - Q,\\
H_{21} &= \int \psi^*_{100}(\mathbf{r}_2)\, H\psi_{100}(\mathbf{r}_1)dv = -\frac{e^2}{2a_H}S + \frac{e^2}{R}S - Q,\\
H_{22} &= \int \psi^*_{100}(\mathbf{r}_2)\, H\psi_{100}(\mathbf{r}_2)dv = -\frac{e^2}{2a_H} + \frac{e^2}{R} - P.
\end{aligned} \tag{24.11.5}$$

Itt egyrészt felhasználtuk, hogy ψ_{100} kielégíti a hidrogénatom *Schrödinger*-egyenletét az $E_1 = -\dfrac{e^2}{2a_H}$ sajátértékkel, másrészt bevezettük a következő rövidítő jelöléseket:

$$P = \int \frac{e^2}{r^2} |\psi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2 dv, \tag{24.11.6}$$

$$Q = \int \frac{e^2}{r_2} \psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)\, dv, \tag{24.11.7}$$

$$S = \int \psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)\, dv. \tag{24.11.8}$$

A (11.5) mátrixelemekben egy érdekes szimmetriát figyelhetünk meg: $H_{11} = H_{22}$ és $H_{12} = H_{21}$. Ennek az az oka, hogy ha a molekula-iont tükrözzük a magokat összekötő távolság felezősíkjára, azaz ha végrehajtjuk az $\mathbf{r}_1 \rightleftarrows \mathbf{r}_2$ transzformációt, akkor a (11.1) alatti H energiaoperátor változatlan marad. Ezért, ha (11.5) utolsó

integráljában végrehajtjuk az $\mathbf{r}_1 \rightleftarrows \mathbf{r}_2$ transzformációt, az átmegy H_{11} kifejezésébe, és hasonlóképpen következik H_{12} és H_{21} egyenlősége is. Ugyanezeket a szimmetriatulajdonságokat figyelhetjük meg az átfedési mátrixban is, melynek elemei (9.13) szerint

$$\begin{aligned} S_{11} &= \int \psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_1)dv = 1 \\ S_{12} &= \int \psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)dv = S, \\ S_{21} &= \int \psi^*_{100}(\mathbf{r}_2)\psi_{100}(\mathbf{r}_1)dv = S, \\ S_{22} &= \int \psi^*_{100}(\mathbf{r}_2)\psi_{100}(\mathbf{r}_2)dv = 1. \end{aligned} \tag{24.11.9}$$

A H_2^+ molekula-ion E energiáját, (9.17) mintájára, a következő másodfokú egyenletből kaphatjuk meg:

$$\begin{vmatrix} -\frac{e^2}{2a_H} + \frac{e^2}{R} - P - E & -\frac{e^2}{2a_H}S + \frac{e^2}{R}S - Q - ES \\ -\frac{e^2}{2a_H} + \frac{e^2}{R}S - Q - ES & -\frac{e^2}{2a_H} + \frac{e^2}{R} - P - E \end{vmatrix} = 0. \tag{24.11.10}$$

Ebből két E értéket kapunk:

$$E_s = -\frac{e^2}{2a_H} + \frac{e^2}{R} - \frac{P+Q}{1+S}, \tag{24.11.11}$$

$$E_a = -\frac{e^2}{2a_H} + \frac{e^2}{R} - \frac{P-Q}{1-S}. \tag{24.11.12}$$

Az első megoldás esetén $c_1 = c_2$, a másik esetben pedig $c_1 = -c_2$. Tehát E_s egy szimmetrikus sajátfüggvényhez tartozik, mely az $\mathbf{r}_1 \rightleftarrows \mathbf{r}_2$ tükrözésnél változatlan marad, az E_a-hoz tartozó sajátfüggvény pedig antiszimmetrikus, a tükrözésnél előjelet vált.

Hátra van még a P, Q és S integrálok kiszámítása. Ez legegyszerűbben a

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \qquad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}, \qquad \phi \tag{24.11.13}$$

elliptikus koordináták bevezetésével történhet, ahol ϕ a magokat összekötő molekulatengely körül mért azimutszöget jelöli. E koordináták a következő értékeket futhatják be:

$$1 \leq \xi < \infty, \qquad -1 \leq \eta \leq 1, \qquad 0 \leq \phi < 2\pi. \tag{24.11.14}$$

A térfogatelem kifejezése az elliptikus koordinátákkal pedig:

$$dv = \frac{1}{8}R^3(\xi^2 - \eta^2)\,d\xi d\eta d\phi. \tag{24.11.15}$$

A P, Q és S integrálok, elliptikus koordináták használata esetén, elemi integrálokra vezethetők vissza. Például S kifejezése a következő:

$$S = \int \psi^*_{100}(\mathbf{r}_1)\, \psi_{100}(\mathbf{r}_2) dv = \frac{1}{\pi a_H^3} \int e^{-(r_1+r_2)/a_H} dv =$$

$$= \frac{\delta^3}{8\pi} \int_1^\infty d\xi e^{-\delta\xi} \int_{-1}^{+1} d\eta(\xi^2 - \eta^2) \int_0^{2\pi} d\phi = \frac{\delta^3}{2} \int_1^\infty d\xi \xi^2 e^{-\delta\xi} - \frac{\delta^3}{6} \int_1^\infty d\xi e^{-\delta\xi} =$$

$$= \left(1 + \delta + \frac{1}{3}\delta^2\right) e^{-\delta}, \tag{24.11.16}$$

ahol a $\delta = R/a_H$ jelölést alkalmaztuk. Hasonlóan egyszerű P és Q kiszámítása is, az eredmény:

$$P = \frac{e^2}{R}[1 - (1 + \delta)e^{-2\delta}] \tag{24.11.17}$$

és

$$Q = \frac{e^2}{a_H}(1 + \delta)e^{-\delta}. \tag{24.11.18}$$

Írjuk be ezeket az E_s és E_a energiakifejezésekbe, úgy megkapjuk a H_2^+ energiáját az R magtávolság függvényeként:

$$E_s = \left[-\frac{1}{2} + \frac{1}{\delta} - \frac{1}{\delta} \cdot \frac{1 - (1 + \delta)e^{-2\delta} + \delta(1 + \delta)e^{-\delta}}{1 + (1 + \delta + \delta^2/3)e^{-\delta}}\right] \frac{e^2}{a_H}, \tag{24.11.19}$$

$$E_a = \left[-\frac{1}{2} + \frac{1}{\delta} - \frac{1}{\delta} \cdot \frac{1 - (1 + \delta)e^{-2\delta} - \delta(1 + \delta)e^{-\delta}}{1 - (1 + \delta + \delta^2/3)e^{-\delta}}\right] \frac{e^2}{a_H}. \tag{24.11.20}$$

A fenti energiakifejezéseket a 82. ábra szemlélteti. Igen nagy R magtávolság esetén, tehát a $\delta \to \infty$ határesetben, $E_s = E_a - e^2/2a_H$. Ez természetes, hiszen igen nagy szeparációnál az elektron az egyik maggal perturbálatlan hidrogénatomot fog alkotni. $R \to 0$ esetén az energiák $+\infty$-hez tartanak. Láthatjuk, hogy E_s mindig mélyebben fekszik, mint E_a, tehát az alapállapot a szimmetrikus állapot lesz. E_s-nek minimuma van az

$$R_0 = 2{,}50 a_H = 1{,}32 \cdot 10^{-8}\ \text{cm} \tag{24.11.21}$$

magtávolságnál, ez az érték fog megfelelni a stabilis egyensúlyi helyzetnek. Az energia értéke ekkor

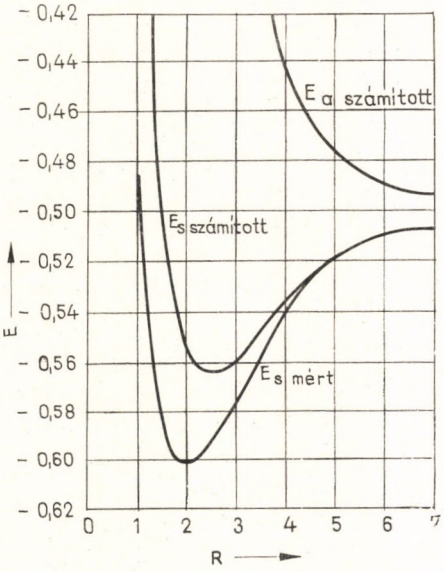
$$E_{s0} = -0{,}5646 \frac{e^2}{a_H} = -15{,}36\ \text{eV}. \tag{24.11.22}$$

Magasabb energiájú antiszimmetrikus állapotban ilyen stabilis helyzet nincs, R növekedtével az energia monoton csökken.

A molekula disszociációs energiájának azt a munkát nevezzük, ami a molekula elszakításához, tehát az R magtávolság végtelen nagyra növeléséhez szükséges. Disszociált állapotban az energia, amint már említettük, a hidrogénatom $-e^2/2a_H$ energiájával lesz azonos. A disszociációs energia tehát

$$D = -\frac{e^2}{2a_H} - E_{s0} = 0{,}646\,\frac{e^2}{a_H} = 1{,}76\,\text{eV}. \qquad (24.11.23)$$

D-re pozitív érték adódott, ami azt mutatja, hogy a molekula stabilis a spontán disszociációval szemben. A kvantummechanika tehát elméletileg meg tudja magya-



82. ábra. A H_2^+ molekula-ion energiája R magtávolság függvényeként. R-t a_H egységekben, az E-t pedig e^2/a_H egységekben mértük fel. (P. GOMBÁS: Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik. Birkhäuser, Basel, 1950.)

rázni a H_2^+ molekula-ion kémiai kötését. Az egyensúlyi magtávolságra és a D disszociációs energiára kapott eredmények összehasonlíthatók a kísérleti adatokkal:

$$R_0 = 1{,}06 \cdot 10^{-8}\,\text{cm} \text{ és } D = 2{,}791\ \text{eV}. \qquad (24.11.24)$$

Ennél jobb egyezést az igen primitív (11.4) próbakifejezéstől nem is várhatunk. Megjegyezzük, hogy a H_2^+ *Schrödinger*-egyenlete – parabolikus koordináták bevezetése után – egzaktul is megoldható. Az egzakt megoldás az $R = 1{,}06 \cdot 10^{-8}$ cm és $D = 2{,}79$ eV eredményre vezet, ami teljesen megegyezik a (11.24) kísérleti adatokkal.

A variációs módszer lehetőséget ad a H_2^+-nál sokkal bonyolultabb molekulák kvantummechanikai vizsgálatára is. A kémiai kötés értelmezése, a molekulák tulajdonságainak elméleti levezetése a kvantummechanika legszebb eredményei közé tartozik.

HUSZONÖTÖDIK FEJEZET

SZÓRÁSSZÁMÍTÁS

1. §. A szóródás elméletének alapjai. A hatáskeresztmetszet

Az előző fejezetekben figyelmünket a tömegpontnak különböző erőterekben kialakuló kötött állapotaira, és az E energiasajátértékek kiszámítására fordítottuk. Ha, az általános szokásnak megfelelően, az energiaskála zérus pontját a potenciálnak a végtelenben felvett értékére helyeztük, akkor a kötött állapotok energiái mindig negatív értékek voltak. A pozitív energiájú állapotok az erőtérben áthaladó, és eközben az erőtéren szóródó részecskéket írnak le. Most ezekkel az állapotokkal fogunk foglalkozni. Szórásproblémák esetén az energiaspektrum folytonos: minden pozitív energiaérték sajátértéke a *Schrödinger*-egyenletnek, a bombázó részecske energiája tetszés szerinti lehet, értékét a kísérlet kezdeti feltételei határozzák meg. Feladatunk most nem az E energiaértékek, hanem a ψ állapotfüggvény vizsgálata lesz. A szórásprobléma alapfeladata a következő: adva van az E energiájú részecskék egy párhuzamos, s_0 áramsűrűségű nyalábja, mely beleszalad egy $V(x, y, z)$ potenciállal leírt erőtérbe. Erről feltételezzük, hogy a térnek csak egy véges tartományában különbözik észrevehetően zérustól. Kérdés, hogy időegység alatt hány részecske szóródik egy olyan $d\Omega$ kúpszögbe, melynek irányát a beeső nyalábhoz képest a ϑ polár- és ϕ azitmutszög jellemzi.

A $d\Omega$ kúpszögben szórt részecskék száma arányos az s_0 áramsűrűséggel és a kúpszög nagyságával:

$$dn = \sigma(\vartheta, \phi)\, s_0 d\Omega\,. \tag{25.1.1}$$

A $\sigma(\vartheta, \phi)$ arányossági tényezőt a *szórás differenciális hatáskeresztmetszetének* nevezzük. Ez természetesen függvénye a szórt részecskék irányát megadó ϑ és ϕ szögeknek. Az összes szórt részecske számát (1.1) integrálásával állapíthatjuk meg:

$$n = s_0 \int \sigma(\vartheta, \phi) d\Omega = \sigma s_0. \tag{25.1.2}$$

σ a *szórás teljes hatáskeresztmetszete*, ez a differenciális hatáskeresztmetszetnek a teljes térszögre vett integráljával egyenlő.

A kvantummechanikai szórásszámítás alapfeladata tehát a szórás hatáskeresztmetszetének meghatározása a *Schrödinger*-egyenlet alapján.

A V potenciállal leírt erőtérben mozgó részecske *Schrödinger*-egyenlete:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E - V(x, y, z))\psi = 0\,.$$

Itt E most egy adott pozitív energiaérték, mely a bombázó részecskék kezdeti

kinetikus energiájával egyenlő. Bevezetve a

$$k = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E} \quad \text{és} \quad U(x, y, z) = \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} V(x, y, z) \tag{25.1.3}$$

jelöléseket, a *Schrödinger*-egyenlet a következő:

$$\Delta\psi + (k^2 - U(x, y, z))\psi = 0. \tag{25.1.4}$$

E differenciálegyenletből természetesen csak akkor lehet egyértelműen a ψ függvényt meghatározni, ha megadjuk a határfeltételeket is. Szóráspróblémák esetén olyan megoldást keresünk, mely a szórócentrumtól igen nagy távolságra a beeső nyalábnak megfelelő síkhullámot és a szórt részecskéket leíró gömbhullámot tartalmazza. Fektessük koordinátarendszerünk tengelyét a beeső nyaláb irányába, úgy a határfeltételt a következő aszimptotikus alakkal adhatjuk meg:

$$\psi(x, y, z) \approx N\left[e^{ikz} + f(\vartheta, \phi)\frac{e^{ikr}}{r}\right], \quad \text{ha} \quad r \to \infty\,. \tag{25.1.5}$$

A szögletes zárójelben az első tag z irányba haladó síkhullámot jelent, melyben a részecskék impulzusa $p = hk/2\pi$, a második tag pedig egy olyan gömbhullám, melynek f amplitúdója függ az iránytól. Az N normálási állandót úgy választjuk meg, hogy a beeső síkhullám áramsűrűsége s_0 legyen; ebből

$$N = \sqrt{\frac{2\pi m_0 s_0}{hk}}\,.$$

A szórt nyaláb radiális áramsűrűségét a (23.9.9) formulából állapíthatjuk meg. Kapjuk, hogy

$$s = \frac{h}{4\pi i m_0} N^2 |f(\vartheta, \phi)|^2 \left(\frac{e^{-ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{-ikr}}{r}\right) = \frac{s_0}{r^2}|f(\vartheta, \phi)|^2\,.$$

A szórócentrumtól r távolságra levő dF felületelem $d\Omega = dF/r^2$ kúpszög alatt látszik, a dF felületen áthaladó szórt részecskék száma:

$$dn = sdF = sr^2 d\Omega = |f(\vartheta, \phi)|^2 s_0 d\Omega.$$

Összehasonlítva (1.1)-gyel, megállapíthatjuk, hogy a szórás differenciális hatáskeresztmetszete

$$\sigma(\vartheta, \phi) = |f(\vartheta, \phi)|^2. \tag{25.1.6}$$

Ha tehát az (1.4) hullámegyenletnek sikerül az (1.5) aszimptotikus viselkedéssel rendelkező megoldását meghatározni, úgy a gömbhullám $f(\vartheta, \phi)$ amplitúdójából a $\sigma(\vartheta, \phi)$ hatáskeresztmetszet azonnal megkapható. Feladatunk tehát az $f(\vartheta, \phi)$ amplitúdó meghatározására redukálódott.

2. §. A parciális hullámok módszere

A továbbiakban csak a centrális erőtereken való szóródás problémájával fogunk foglalkozni, amikor a V potenciál csak az erőcentrumtól mért r távolság függvénye. Ilyen esetben célszerű az ún. parciális hullámok módszerével eljárni, melyek segítségével az (1.4) hullámegyenletet közönséges (egyváltozós) differenciálegyenletek megoldására vezethetjük vissza. E célból fejtsük sorba a ψ függvényt az $Y_l^m(\vartheta, \phi)$ impulzusmomentum-sajátfüggvények szerint. Mivel a beeső nyaláb és a szóró erőtér egyaránt szimmetrikus a z-tengely körül, ezért ψ nem függ a ϕ azimutszögtől. Következésképpen a sorfejtésben csak azok az Y_l^m függvények lépnek fel, melyek szintén függetlenek ϕ-től; ezek az $m = 0$ mágneses kvantumszámhoz tartozók, és egy konstans szorzótól eltekintve a $P_l(\cos\vartheta)$ *Legendre*-polinomokkal azonosak. Sorfejtésünk tehát a következőképpen alakul:

$$\psi = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} C_l u_l(r) P_l(\cos\vartheta). \tag{25.2.1}$$

Behelyettesítve az (1.4) hullámegyenletbe, az $u_l(r)$ függvényre a következő differenciálegyenlet adódik:

$$\frac{d^2u_l(r)}{dr^2} + \left[k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u_l(r) = 0. \tag{25.2.2}$$

E másodrendű differenciálegyenlet megoldása akkor válik egyértelművé, ha két kezdeti feltételt is fűzünk hozzá. Ezek megállapítása céljából vizsgáljuk meg $u_l(r)$ viselkedését az erőcentrum közvetlen környezetében. Ha $r \to 0$, úgy (2.2) szögletes zárójelben az $l(l+1)/r^2$ tag mellett k^2 és $U(r)$ kicsiny lesz, így a differenciálegyenlet aszimptotikusan érvényes alakja

$$\frac{d^2u_l(r)}{dr^2} = \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r), \quad \text{ha} \quad r \to 0. \tag{25.2.3}$$

Ez az egyenlet igen könnyen megoldható; keressük ugyanis a megoldást $u_l(r) = r^p$ alakban. Behelyettesítés után a $p(p-1) = l(l+1)$ egyenlet adódik, amiből p-re két megoldást kapunk: $p_1 = l+1$ és $p_2 = -l$. (2.3) általános megoldása tehát:

$$u_l(r) \approx K_1 r^{l+1} + K_2 \frac{1}{r^l} \qquad \text{ha} \quad r \to 0. \tag{25.2.4}$$

A ψ hullámfüggvénynek mindenütt korlátosnak kell lennie; ez a követelmény az $r = 0$ helyen csak akkor teljesül, ha $u_l(0) = 0$. Ezért (2.4)-ben $K_2 = 0$ és K_1 állandó. Így K_1 az $u_l(r)$-ben normálási állandónak tekinthető, amit önkényesen $K_1 = +1$-nek választunk. (2.2) megoldását tehát a következő határfeltétel teszi egyértelművé:

$$u_l(r) \approx r^{l+1}, \qquad \text{ha} \quad r \to 0. \tag{25.2.5}$$

A továbbiakban ezt az $u_l(r)$ megoldást ismertnek fogjuk feltételezni. Konkrét meghatározása természetesen a (2.2) differenciálegyenlet megoldásával történik,

ami eltekintve a legegyszerűbb $U(r)$ potenciálfüggvényektől, csak numerikus integrálási módszerrel végezhető el.

Az $u_l(r)$ függvények birtokában a szórásprobléma ψ hullámfüggvényét (2.1) szerint építhetjük fel. Az itt szereplő C_l sorfejtési állandókat úgy kell megállapítanunk, hogy ψ kielégítse az (1.5) határfeltételt. C_l-ek kiszámításához vizsgáljuk meg elsősorban, hogy hogyan viselkedik $u_l(r)$, ha r igen nagy. A szórócentrumtól igen nagy távolságban, feltevésünk szerint, az $U(r)$ potenciálfüggvény már zérusnak tekinthető, és $l(l+1)/r^2$ ugyancsak elhanyagolhatóan kicsinnyé válik. Nagy r-ek esetén (2.2) tehát a következőképpen alakul:

$$\frac{d^2u_l(r)}{dr^2} + k^2u_l(r) = 0\,, \quad \text{ha} \quad r \to \infty\,. \tag{25.2.6}$$

Ennek általános megoldása nyilván:

$$u_l(r) \approx \frac{1}{k} A_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), \quad \text{ha} \quad r \to \infty\,. \tag{25.2.7}$$

Az itt fellépő

$$A_l = A_l(k) \quad \text{és} \quad \delta_l = \delta_l(k)$$

integrációs állandókat természetesen nem választhatjuk meg szabadon, hiszen az $u_l(r)$ függvény menetét (2.2) és (2.5) egyértelműen meghatározza, és a numerikus megoldás (2.7)-tel való összehasonlításából A_l és δ_l egyszerűen leolvasható. A_l és δ_l tehát a továbbiakban már ismertnek tekinthető. Ha (2.7)-et beírjuk a teljes hullámfüggvény (2.1) sorfejtésébe, akkor ψ-re a következő aszimptotikus viselkedést kapjuk:

$$\psi \approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} C_l A_l \left[\cos\delta_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + \sin\delta_l \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)\right] P_l(\cos\vartheta)\,,$$

$$\text{ha} \quad r \to \infty\,. \tag{25.2.8}$$

Ahhoz, hogy ezt össze tudjuk hasonlítani az előírt (1.5) kifejezéssel, az utóbbit is sorba kell fejtenünk a $P_l(\cos\vartheta)$ *Legendre*-polinomok szerint. A síkhullám sorfejtését a *Bessel*-függvények elméletéből idézzük:

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\vartheta} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \left(\frac{\pi}{2kr}\right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr)\, P_l(\cos\vartheta)\,.$$

Ugyancsak ismeretes a $J_{l+\frac{1}{2}}$ *Bessel*-függvény $r \to \infty$-re vonatkozó aszimptotikus alakja:

$$J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \approx \left(\frac{2}{\pi kr}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \qquad \text{ha} \quad r \to \infty\,.$$

Így tehát a síkhullám sorfejtésére a következő aszimptotikus képlet érvényes:

$$e^{ikz} \approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\vartheta)\,. \tag{25.2.9}$$

Centrális potenciál esetén a szórt gömbhullám f amplitúdója független lesz a ϕ azimutszögtől, csak a ϑ polárszögnek lesz függvénye. $f(\vartheta)$-t szintén sorbafejthetjük a $P_l(\cos\vartheta)$ *Legendre*-polinomok szerint:

$$f(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} B_l P_l(\cos\vartheta). \tag{25.2.10}$$

Most már könnyen felírhatjuk (1.5) kívánt sorfejtését. (2.9) és (2.10) alapján kapjuk:

$$\psi \approx N \sum_{l=0}^{\infty} \left[(2l+1) i^l \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} + B_l \frac{e^{ikr}}{r} \right] P_l(\cos\vartheta)$$

$$= \frac{N}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \left[(2l + 1 + ikB_l) \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + kB_l \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \right] P_l(\cos\vartheta). \tag{25.2.11}$$

A (2.8) aszimptotikus viselkedés akkor fog megegyezni a határfeltételként előírt (2.11) kifejezéssel, ha a két sorfejtésben mind $\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$, mind pedig $\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$ együtthatói rendre megegyeznek:

$$\begin{aligned} C_l A_l \cos\delta_l &= N i^l (2l + 1 + ikB_l), \\ C_l A_l \sin\delta_l &= N i^l k B_l. \end{aligned} \tag{25.2.12}$$

Amint már említettük, az A_l és δ_l mennyiségeket a (2.2) és (2.5) egyenletek meghatározzák. (2.12) két egyenletében ismeretlennek csak a C_l és B_l sorfejtési együtthatókat tekinthetjük. Az egyenletrendszer megoldása:

$$\begin{aligned} C_l &= \frac{(2l+1) N i^l}{A_l} e^{i\delta_l}, \\ B_l &= \frac{2l+1}{2ik} (e^{i\delta_l} - 1). \end{aligned} \tag{25.2.13}$$

Minket elsősorban B_l, az $f(\vartheta)$ szórásamplitúdó sorfejtési együtthatója érdekel. B_l fenti kifejezését (2.10)-be írva, az eredmény:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos\vartheta). \tag{25.2.14}$$

Ez a képlet jelenti a szórásprobléma megoldását. Sikerült az $f(\vartheta)$ szórásamplitúdót a (2.2) közönséges differenciálegyenlet megoldásaként adódó $u_l(r)$ függvények δ_l fázisállandóival kifejeznünk. A szórás differenciális hatáskeresztmetszete (1.6) szerint:

$$\sigma(\vartheta) = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos\vartheta) \right|^2. \tag{25.2.15}$$

A teljes hatáskeresztmetszetet pedig ennek ϑ szerinti integrálásával kapjuk meg. Felhasználva a *Legendre*-polinomok elméletéből ismert

$$\int_0^\pi P_{l'}(\cos\vartheta)\, P_l(\cos\vartheta)\sin\vartheta d\vartheta = 0, \quad (\text{ha } l \neq l')$$

$$\int_0^\pi P_l^2(\cos\vartheta)\sin\vartheta d\vartheta = \frac{2}{2l+1}$$

integrálokat, kapjuk, hogy:

$$\sigma = \int_0^\pi \sigma(\vartheta)\, 2\pi \sin\vartheta d\vartheta = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \tag{25.2.16}$$

A (2.15) és (2.16) hatáskeresztmetszet-képletek konkrét számításokra különösen olyan esetekben alkalmasak, amikor az l szerinti összegzés gyorsan konvergál, úgyhogy elegendő az első néhány l értékre korlátozódni. Ez az eset áll fenn, ha a bombázó részecskék kis energiájúak. Megjegyezzük, hogy az atomtermek osztályozásánál bevezetett terminológiát a szórásszámításban is szokás használni. (2.14)-ben és (2.16)-ban az $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$-nak megfelelő tagokat rendre az $s, p, d, f, \ldots$ szórás amplitúdójának, ill. hatáskeresztmetszetének nevezzük.

A teljes hatáskeresztmetszet igen érdekes kapcsolatban áll az $f(\vartheta)$ szórásamplitúdónak a $\vartheta = 0$ szöghöz tartozó értékével. Ez utóbbira (2.14)-ből $P_l(1) = 1$ tekintetbevételével kapjuk, hogy:

$$f(0) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin\delta_l(\cos\delta_l + i\sin\delta_l).$$

A teljes hatáskeresztmetszet (2.16) szerint e kifejezés imaginárius részének $\frac{4\pi}{k}$-szorosa:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\,Imf(0). \tag{25.2.17}$$

Ezt a fontos összefüggést „optikai tételnek" szokás nevezni. Fizikai tartalma a következő: a beeső s_0 részecskeáramból $n = \sigma s_0$ szétszóródik a különböző térirányokba; a szórócentrum mögött (tehát a $\vartheta = 0$ irányban) ennyivel csökken a nyaláb intenzitása. Ezt az intenzitáscsökkenést az (1.5) aszimptotikus kifejezés két tagjának, a síkhullámnak és a gömbhullámnak interferenciája írja le. Ez az interferenciatag az előreszórás $f(0)$ amplitúdójával arányos, és ennek kell a σ hatáskeresztmetszettel kifejezett intenzitáscsökkenést szolgáltatnia. $f(0)$ és σ ezen kapcsolatát fejezi ki az optikai tétel.

3. §. Szóródás háromdimenziós potenciálvölgyön

Egyszerű példaként vizsgáljuk most meg a háromdimenziós potenciálvölgyön való szóródás problémáját. A potenciált a (23.11.1) képlet adja meg, melyben a a gödör sugara és V_0 a mélysége. Az $u_l(r)$ parciális hullámokra vonatkozó (2.2) differenciálegyenlet most a következőképpen alakul:

$$\begin{aligned} &\frac{d^2u_l}{dr^2} + \left(\alpha^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_l = 0, \qquad \text{ha } r < a, \\ &\frac{d^2u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_l = 0, \qquad \text{ha } r > a, \end{aligned} \tag{25.3.1}$$

ahol

$$\alpha^2 = \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}(E + V_0) = k^2 + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}V_0. \tag{25.3.2}$$

A (3.1) egyenletek az $l + \frac{1}{2}$ indexű *Bessel*-függvények differenciálegyenletével vannak szoros kapcsolatban. A második, tehát az $r > a$ esetre vonatkozó egyenlet két lineárisan független megoldása:

$$j_l(kr) = \left(\frac{\pi kr}{2}\right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \quad \text{és} \quad n_l(kr) = \left(\frac{\pi kr}{2}\right)^{\frac{1}{2}} N_{l+\frac{1}{2}}(kr). \tag{25.3.3}$$

(Itt $J_{l+\frac{1}{2}}$ és $N_{l+\frac{1}{2}}$ az első, ill. a másodfajú *Bessel*-függvényt jelöli.) Az általános megoldás a (3.3) függvények lineárkombinációja lesz:

$$u_l(r) = b_1 j_l(kr) + c_1 n_l(kr), \qquad \text{ha } r > a. \tag{25.3.4}$$

Hasonló alakban írhatjuk fel az $r < a$ esetre vonatkozó megoldást is. A különbség mindössze annyi, hogy itt k helyébe α kerül

$$u_l(r) = b_2 j_l(\alpha r) + c_2 n_l(\alpha r), \qquad \text{ha } r < a. \tag{25.3.5}$$

A b_1, c_1 és b_2, c_2 integrációs állandókat a határfeltételek szabják meg. Először elégítsük ki a (2.5) kezdeti feltételt. Igen kis argumentumok esetén a *Bessel*-függvényekre a következő aszimptotikus formulák érvényesek*:

$$\begin{aligned} &J_{l+\frac{1}{2}}(x) \approx \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{x^{l+\frac{1}{2}}}{(2l+1)!!}, \\ &N_{l+\frac{1}{2}}(x) \approx -\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{(2l-1)!!}{x^{l+\frac{1}{2}}}. \end{aligned} \qquad \text{ha } x \to 0 \tag{25.3.6}$$

* Kettős faktoriálissal, szokás szerint, a $(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \ldots (2l+1)$ szorzatot jelöljük.

A (3.5) megoldás aszimptotikus viselkedése pedig:

$$u_l(r) = b_2 \frac{(\alpha r)^{l+1}}{(2l+1)!!} - c_2 \frac{(2l-1)!!}{(\alpha r)^l} .$$

Ezt összevetve a (2.5) kezdeti feltétellel, b_2- és c_2-re a következő értékek adódnak:

$$b_2 = \frac{(2l+1)!!}{\alpha^{l+1}} \quad \text{és} \quad c_2 = 0 . \tag{25.3.7}$$

A b_1 és c_1 állandókat pedig az a követelmény határozza meg, hogy mind u_l, mind pedig du_l/dr folytonosan változzék az $r = a$ helyen:

$$\begin{aligned} \frac{(2l+1)!!}{\alpha^{l+1}} j_l(\alpha a) &= b_1 j_l(ka) + c_1 n_l(ka) , \\ \frac{(2l+1)!!}{k\alpha^l} j_l'(\alpha a) &= b_1 j_l'(ka) + c_1 n_l'(ka) . \end{aligned} \tag{25.3.8}$$

Az egyenletrendszer megoldása:

$$\begin{aligned} b_1 &= -\frac{(2l+1)!!}{\alpha^{l+1}k} \cdot \frac{\alpha j_l'(\alpha a)\, n_l(ka) - k j_l(\alpha a)\, n_l'(ka)}{j_l(ka)\, n_l'(ka) - j_l'(ka)\, n_l(ka)} , \\ c_1 &= \frac{(2l+1)!!}{\alpha^{l+1}k} \cdot \frac{a j_l'(\alpha a)\, j_l(ka) - k j_l(\alpha a)\, j_l'(ka)}{j_l(ka)\, n_l'(ka) - j_l'(ka)\, n_l(ka)} . \end{aligned} \tag{25.3.9}$$

Ezzel az $u_l(r)$ parciális hullámot teljesen meghatároztuk. Most vizsgáljuk meg, hogy hogyan viselkedik $u_l(r)$ az igen nagy r távolságokban és olvassuk le a δ_l fázisállandót. Elsősorban idézzük a *Bessel*-függvények aszimptotikus viselkedését leíró formulákat:

$$\begin{aligned} J_{l+\frac{1}{2}}(x) &\approx \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(x - \frac{l\pi}{2}\right) , \\ N_{l+\frac{1}{2}}(x) &\approx -\left(\frac{2}{\pi x}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\left(x - \frac{l\pi}{2}\right) . \end{aligned} \qquad \text{ha} \quad |x| \to \infty \tag{25.3.10}$$

Ezt (3.4)-be helyettesítve, a következő aszimptotikus kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned} u_l(r) &\approx b_1 \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) - c_1 \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) = \\ &= (b_1^2 + c_1^2)^{\frac{1}{2}} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{c_1}{b_1}\right), \quad \text{ha} \quad r \to \infty . \end{aligned} \tag{25.3.11}$$

Ha ezt összevetjük (2.7)-tel, úgy megállapíthatjuk, hogy

$$A_l = k\,(b_1^2 + c_1^2)^{\frac{1}{2}} \quad \text{és} \quad \operatorname{tg} \vartheta_l = -\frac{c_1}{b_1}. \tag{25.3.12}$$

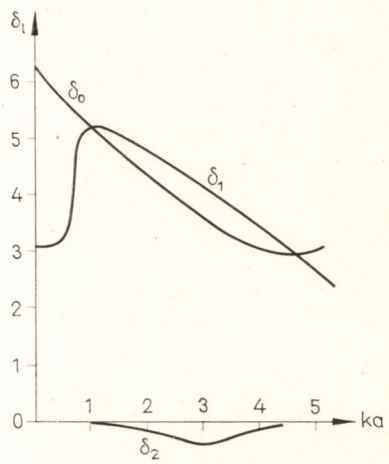
A (3.9) kifejezések felhasználásával a végeredmény a következő:

$$\operatorname{tg} \delta_l = \frac{\alpha j_l'(\alpha a)\, j_l(ka) - k j_l(\alpha a)\, j_l'(ka)}{\alpha j_l'(\alpha a)\, n_l(ka) - k j_l(\alpha a)\, n_l'(ka)}. \tag{25.3.13}$$

A 83. ábrán az $l = 0$, 1 és 2 parciális hullámoknak megfelelő δ_l fázisállandót mutatjuk be k függvényeként. Az ebből számított teljes hatáskeresztmetszeteket pedig a 84. ábra szemlélteti. Igen kis bombázó energiák ($ka \ll 1$) esetén a p hullám (és az összes többi magasabb mellékkvantumszámú hullám) hatáskeresztmetszete elhanyagolhatóan kicsiny az s hullám hatáskeresztmetszetéhez képest. Az igen nagy bombázó energiák ($ka \gg 1$) esetén pedig valamennyi parciális hullám hatáskeresztmetszete zérushoz tart. A közepes energiák tartományában egy igen érdekes jelenséget figyelhetünk meg. A 83. és 84. ábrán vizsgált speciális potenciálgödör esetén a p hullám fázisállandója a $ka = 0{,}7$ érték környékén ugrásszerűen megnő, és eközben áthalad a $3\pi/2$ értéken. A p hullámnak megfelelő teljes hatáskeresztmetszet,

$$\sigma_1 = \frac{12\pi}{k^2} \sin^2 \delta_1,$$

eközben felveszi a maximális, $12\pi/k^2$ értéket. Ez okozza a 84. ábrán jelentkező éles maximumot. Ezt a jelenséget *szórási rezonanciá*nak nevezzük. Ilyen rezonan-

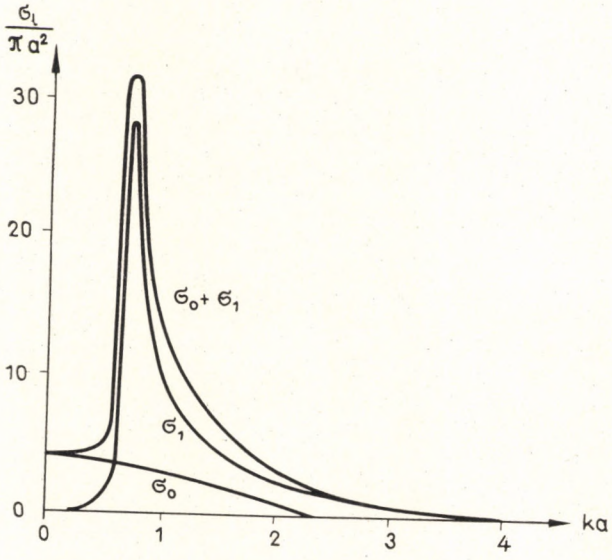


83. ábra. Az s, p és d parciális hullámok fázisállandói mint k függvényei, ha

$$\frac{8\pi^2 m_0 a^2 V_0}{h^2} = 6{,}2$$

(E. Merzbacher: Quantum mechanics. Wiley, New York, 1961.)

ciák természetesen bármely l-nek megfelelő parciális hullámban előfordulhatnak, és hogy milyen k értékeknél, az a potenciálgödör paramétereinek speciális értékeitől függ. A szórási rezonanciák általános elméletét a következő §-ban tárgyaljuk.



84. ábra. Az s és p parciális hullámoknak megfelelő teljes hatáskeresztmetszetek mint k függvényei, ha $\frac{8\pi^2 m_0 a^2 V_0}{h^2} = 6{,}2$

(E. MERZBACHER: Quantum mechanics. Wiley, New York, 1961.)

4. §. A szórási és kötött állapotok egységes elmélete. Szórási rezonanciák

Centrális erőtérben kialakuló kötött kvantumállapotokkal a 23. fejezet 8. §-ban részletesen foglalkoztunk és láttuk, hogy a sajátértékeket a (23.8.17) alatt felírt

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}[E - V(r)]R = 0$$

radiális *Schrödinger*-egyenletből határozhatjuk meg. Ha ebbe az egyenletbe bevezetjük a

$$\kappa = \sqrt{-\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}E} \quad \text{és} \quad U(r) = \frac{8\pi^2 m_0}{h^2}V(r) \tag{25.4.1}$$

rövidítéseket, továbbá elvégezzük az $R(r) = \frac{1}{r}u_l(r)$ helyettesítést, akkor a követ-

kező differenciálegyenletet kapjuk:

$$\frac{d^2u_l(r)}{dr^2} + \left[-\kappa^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u_l(r) = 0\,. \tag{25.4.2}$$

A radiális *Schrödinger*-egyenletnek ez az alakja a $\kappa \to ik$ helyettesítés után átmegy (2.2)-be, a szórásprobléma differenciálegyenletébe. Megállapíthatjuk továbbá, hogy az $u_l(r)$ függvényre vonatkozó kezdeti feltételek is azonosak a szórási és a kötött állapotok esetében. Mindkét problémánál ugyanis elő kellett írnunk az $u_l(r) \approx r^{l+1}$ aszimptotikus viselkedést az $r \to 0$ esetben, mert különben a ψ hullámfüggvény nem maradna véges az $r = 0$ helyen. A szórási és kötött állapotok problémája tehát matematikai szempontból igen rokon, és ez lehetővé teszi, hogy a két feladatot egy egységes elmélet keretében tárgyaljuk. Kiinduló egyenletünk a következő differenciálegyenlet:

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + \left[q^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u_l = 0\,, \tag{25.4.3}$$

melyben q egy komplex szám. Ehhez a differenciálegyenlethez az

$$u_l(r) \approx r^{l+1}, \quad \text{ha} \quad r \to 0 \tag{25.4.4}$$

kezdeti feltételt fűzzük, ami az u_l megoldást egyértelművé teszi. A (4.4)-et kielégítő megoldást a (4.3) differenciálegyenlet „fizikai megoldásának" fogjuk nevezni és $u_l = u_l(q, r)$-rel jelöljük. Vizsgáljuk most meg u_l aszimptotikus viselkedését $r \to \infty$ esetén. Ekkor (4.3)-ban $U(r)$ és $l(l+1)/r^2$ erősen zérushoz tart, és a differenciálegyenlet aszimptotikus alakja:

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + q^2u_l = 0\,. \tag{25.4.5}$$

Jól tudjuk, hogy ennek az egyenletnek két speciális megoldása e^{iqr} és e^{-iqr}, az összes többi megoldás pedig ezek valamely lineáris kombinációja lesz. A fizikai megoldás aszimptotikus viselkedését tehát

$$u_l(q, r) \approx \frac{1}{2iq}\left[F_l(q)e^{iqr} + H_l(q)e^{-iqr}\right], \quad \text{ha} \quad r \to \infty \tag{25.4.6}$$

adja meg, és az $F_l(q)$ és $H_l(q)$ kombinálási együtthatók meghatározásához ténylegesen (pl. numerikus módszerrel) meg kell oldanunk a (4.3) differenciálegyenletet a (4.4) kezdeti feltétellel. Ez konkrét $U(r)$ potenciál esetén mindig keresztülvihető, és a továbbiakban $F_l(q)$-t és $H_l(q)$-t már ismertnek tételezhetjük fel.

Most $F_l(q)$ és $H_l(q)$ néhány fontos tulajdonságát tárgyaljuk. A (4.3) és (4.4) egyenletek a $q \to -q$ helyettesítés esetén változatlanok maradnak, ezért a q-hoz és a $-q$-hoz tartozó fizikai megoldás igy ugyanaz lesz:

$$u_l(q, r) = u_l(-q, r). \tag{25.4.7}$$

Ennek természetesen érvényesnek kell maradnia $r \to \infty$ esetén is, tehát

$$\frac{1}{2iq}\left[F_l(q)e^{iqr} + H_l(q)e^{-iqr}\right] = -\frac{1}{2iq}\left[F_l(-q)e^{-iqr} + H_l(-q)e^{iqr}\right].$$

Ez az egyenlőség akkor, és csakis akkor teljesül, ha

$$H_l(q) = -F_l(-q). \tag{25.4.8}$$

Nem szükséges tehát két együtthatóval dolgoznunk: hiszen ha ismerjük $F_l(q)$-t minden q értékre, akkor (4.8) szerint $H_l(q)$ is a birtokunkban van. Más szóval, a fizikai megoldás aszimptotikus viselkedését a (4.6)-nál speciálisabb szerkezetű

$$u_l(q, r) \approx \frac{1}{2iq}\left[F_l(q)e^{iqr} - F_l(-q)e^{-iqr}\right] \tag{25.4.9}$$

formula adja meg.

Képezzük most a (4.3) és (4.4) alapegyenletek konjugált komplexeit. Láthatjuk, hogy $[u_l(q, r)]^*$ kielégíti a q^*-hoz tartozó differenciálegyenletet és a kezdeti feltételt is. Tehát:

$$[u_l(q, r)]^* = u_l(q^*, r). \tag{25.4.10}$$

Ebből rögtön következik, hogy valós és tiszta imaginárius q esetén $u_l(q, r)$ valós lesz (Ez a szabály u_l konkrét kiszámításánál igen fontos). (4.10) alapján megállapíthatjuk $F_l(q)$ konjugálási szabályát is: (4.10) ugyanis akkor és csakis akkor teljesül $r \to \infty$ esetén, ha

$$[F_l(q)]^* = F_l(-q^*). \tag{25.4.11}$$

Ez a szabály gyakorlati szempontból igen fontos: $F_l(q)$ meghatározása céljából a (4.3) differenciálegyenletet elegendő csak a q komplex sík jobb felére, tehát a $Re(q) \geq 0$ esetre megoldani, a q sík bal oldalán $F_l(q)$-t már (4.11)-ből állapíthatjuk meg. Felírjuk még (4.11)-et két speciális esetre. Ha q egy valós k értékkel egyezik meg, úgy a konjugálási szabály

$$[F_l(k)]^* = F_l(-k)$$

és ha q tiszta imaginárius szám, akkor

$$[F_l(k)]^* = F_l(i\kappa).$$

Tiszta imaginárius q értékekre tehát F_l valós szám lesz.

A továbbiak szempontjából igen fontos jelentősége lesz az $F_l(q)$ függvény zérushelyeinek. Legyen q az

$$F_l(q) = 0 \tag{25.4.12}$$

egyenlet valamely gyöke. A (4.11) szabály szerint ekkor $F_l(-q^*) = [F_l(q)]^* = 0$, azaz $-q^*$ szintén gyök lesz. (4.12) gyökei tehát a komplex q sík imaginárius tengelyére szimmetrikusan helyezkednek el. Még többet állíthatunk az alsó félsíkra eső gyökökről. Ha $q = k - i\kappa$ ($\kappa > 0$), egyike az alsó félsíkra eső gyökök-

nek, úgy a megfelelő $u_l(q, r)$ függvény aszimptotikus viselkedése (4.9) szerint:

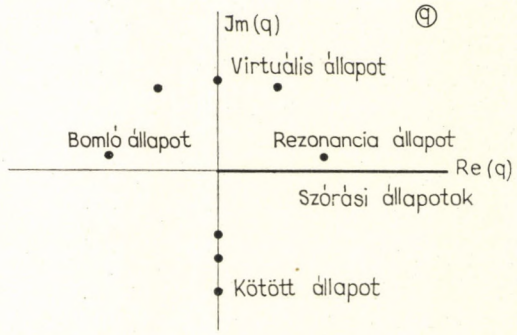
$$u_l(q, r) \approx -\frac{1}{2iq} F_l(-k + i\kappa) e^{-ikr} e^{-\kappa r}, \qquad \text{ha } r \to \infty. \tag{25.4.13}$$

Tehát u_l exponenciálisan eltűnik, ha $r \to \infty$, hiszen κ egy pozitív szám. Szorozzuk most meg a (4.3) differenciálegyenletet $[u_l(q, r)]^*$-gal és (4.3) konjugált komplexét $u_l(q, r)$-rel, majd vonjuk ki őket egymásból. Kapjuk, hogy

$$\frac{d}{dr}\left[u_l(q,r)\frac{d}{dr}[u_l(q,r)]^* - [u_l(q,r)]^*\frac{d}{dr}u_l(q,r)\right] = (q^2 - q^{*2})\,|\,u_l(q,r)\,|^2 .$$

Integráljunk r szerint 0-tól ∞-ig:

$$\left[u_l(q,r)\frac{d}{dr}[u_l(q,r)]^* - [u_l(q,r)]^*\frac{d}{dr}u_l(q,r)\right]_0^\infty = (q^2 - q^{*2})\int_0^\infty |\,u_l(q,r)\,|^2\,dr .$$



85. ábra. A radiális *Schrödiger*-egyenlet megoldásainak osztályozása. A pontok az $F_l(q) = 0$ egyenlet gyökeit jelölik a komplex q síkon

A bal oldalon álló kifejezés $r \to 0$ esetében (4.4) miatt mint r^{2l+1}, $r \to \infty$ esetében pedig (4.13) miatt $e^{-2\kappa r}$ szerint zérussá válik. Ugyanakkor a jobb oldalon levő integrál zérustól különböző véges érték. Az egyenlőség tehát csak úgy teljesülhet, ha $q^2 = q^{*2}$, azaz $q = \pm q^*$. De zérustól különböző $\kappa > 0$ mellett csak $q = -q^*$ lehetséges, tehát $k = 0$ és $q = \pm i\kappa$.

Összefoglalva: az $F_l(q)$ egyenlet gyökei szimmetrikusan helyezkednek el az imaginárius tengelyre az $Im(q) > 0$ félsíkon, és ráesnek az imaginárius tengelyre az $Im(q) < 0$ félsíkon. A gyökök elhelyezkedéséről a 85. ábra ad kvalitatív képet.

Ezek után az $u_l(q, r)$ fizikai megoldásokat a következőképpen osztályozzuk:

1. Szórási állapot: q egy valós, pozitív k érték. A megfelelő $u_l(k, r)$ függvény azonos lesz a (2.2) szórásprobléma megoldásával. Vizsgáljuk meg $u_l(k, r)$ aszimptotikus viselkedését az $r \to \infty$ határesetben. (4.9) valós k hullámszám esetén a

következőképpen alakul:

$$u_l(k,r) \approx \frac{1}{2ik}\left[F_l(k)e^{ikr} - F_l(-k)e^{-ikr}\right] =$$

$$= \frac{1}{2ik}\left[F_l(k)e^{ikr} - F_l^*(k)e^{-ikr}\right], \quad \text{ha } r \to \infty . \tag{25.4.14}$$

Keressünk kapcsolatot az aszimptotikus viselkedést megszabó $F_l(k)$ együttható és a szórás δ_l fázisállandója között. E célból a fázisállandót definiáló (2.7) formulát írjuk át az *Euler*-összefüggések segítségével:

$$u_l(k,r) \approx \frac{1}{2ik}\left[A_l e^{i\left(\delta_l - \frac{l\pi}{2}\right)} e^{ikr} - A_l e^{-i\left(\delta_l - \frac{l\pi}{2}\right)} e^{-ikr}\right]. \tag{25.4.15}$$

(4.14) és (4.15) összehasonlításával megállapíthatjuk, hogy

$$F_l(k) = A_l(k) e^{i\left(\delta_l(k) - \frac{l\pi}{2}\right)}, \tag{25.4.16}$$

tehát

$$A_l(k) = |\, F_l(k)\,| \quad \text{és} \quad \delta_l(k) = \frac{l\pi}{2} + \arg F_l(k). \tag{25.4.17}$$

Az $F_l(k)$ komplex függvénynek a k valós tengelyen felvett értékei fontos fizikai tartalommal bírnak: (4.17) szerint meghatározzák a szórás fázisállandóját.

2. Kötött állapot: $q = i\kappa$ az $F_l(q) = 0$ egyenletnek a negatív imaginárius tengelyre eső valamelyik gyökével egyezik meg. $u_l(-i\kappa, r)$ kielégíti a (4.2) radiális *Schrödinger*-egyenletet és a korlátossági követelményeket is: $r \to 0$ esetén mint r^{l+1} és $r \to \infty$ esetén mint $e^{-\kappa r}$ válik zérussá. A radiális *Schrödinger*-egyenlet ilyen megoldása kötött állapotnak felel meg, az energiasajátérték (4.1)-ből

$$E = -\frac{h^2\kappa^2}{8\pi^2 m_0}. \tag{25.4.18}$$

Az $F_l(q) = 0$ egyenletnek a negatív imaginárius tengelyre eső gyökei tehát megadják a kötött állapotok energiasajátértékeit.

3. Virtuális állapot: $q = \pm k_0 + i\kappa$ az $F_l(q) = 0$ egyenletnek a komplex q-sík felső felére eső valamelyik gyöke. Szemléletes fizikai jelentésük azoknak a virtuális állapotoknak van, melyeknél q igen közel esik a valós tengelyhez, a továbbiakban csak ezekkel foglalkozunk. Vizsgáljunk először olyan virtuális állapotot, mely a komplex q sík második negyedébe esik: $q = -k_0 + i\kappa$, ahol k_0 és κ pozitív szám. Az u_l függvény aszimptotikus viselkedését megadó (4.9) kifejezés most $F_l(q) = 0$ miatt a következőképpen alakul:

$$u_l(q,r) \approx -\frac{1}{2iq} F_l(-q) e^{-iqr} = -\frac{1}{2iq} F_l(-q) e^{ik_0 r} e^{\kappa r} = \text{konst. } e^{\kappa r} e^{ik_0 r}. \tag{25.4.19}$$

Az $e^{ik_0 r}$ tényező kifutó gömbhullámot ír le, melynek amplitúdója $e^{\kappa r}$-rel modulálva van. (Persze modulált hullámról csak akkor jogos beszélni, ha $e^{ik_0 r}$ sokkal gyorsabban oszcillál, mint ahogy $e^{\kappa r}$ változik, azaz ha $k_0 \gg \kappa$. Ez viszont tényleg teljesül, ha a $q = -k_0 + i\kappa$ gyök közel esik a valós tengelyhez.) Képezzük a (4.19)-nek megfelelő teljes állapotfüggvényt. Ehhez egyrészt az $\frac{1}{r} u_l$ radiális hullámfüggvényt ki kell egészítenünk az $Y_l^m(\vartheta, \phi)$ szögfüggő résszel, másrészt az $e^{-\frac{2\pi i}{h} \varepsilon t}$ időfüggő résszel, ahol az energiaparaméter most

$$\varepsilon = h^2 q^2 / 8\pi^2 m_0.$$

A teljes hullámfüggvény tehát:

$$\Psi(x, y, z, t) = \frac{1}{r} u_l(q, r) Y_l^m(\vartheta, \phi) e^{-\frac{2\pi i}{h} \varepsilon t} = \frac{1}{r} u_l(q, r) Y_l^m(\vartheta, \phi) e^{-\frac{ih}{4\pi m_0}(k_0^2 - \kappa^2 - 2ik_0\kappa)t}$$

Az origótól igen távol a hullámfüggvény aszimptotikus viselkedését (4.19) szabja meg:

$$\Psi(x, y, z, t) \approx -\frac{1}{2iqr} F_l(-q) e^{\left[\kappa r - \frac{hk_0\kappa}{2\pi m_0} t\right]} e^{i\left[k_0 r - \frac{h}{4\pi m_0}(k_0^2 - \kappa^2)t\right]} Y_l^m(\vartheta, \phi). \quad (25.4.20)$$

Az ennek megfelelő részecskesűrűség és radiális áramsűrűség a 22. fejezet 9. §-ban megbeszéltek szerint:

$$\rho(x, y, z, t) = \Psi^* \Psi \approx \left| \frac{F_l(-q)}{2q} \right|^2 \frac{e^{2\left[\kappa r - \frac{hk_0\kappa}{2\pi m_0} t\right]}}{r^2} |Y_l^m|^2,$$

$$s(x, y, z, t) = \frac{h}{4\pi i m_0} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial r} \right) \approx$$

$$\approx \frac{hk_0}{2\pi m_0} \left| \frac{F_l(-q)}{2q} \right|^2 \frac{e^{2\left[\kappa r - \frac{hk_0\kappa}{2\pi m_0} t\right]}}{r^2} |Y_l^m|^2.$$

Ezekből a képletekből leolvashatjuk a Ψ állapot legfontosabb fizikai tulajdonságait. Képleteink az origóból kirepülő részecskék terét írják le. A részecskék radiális sebessége az $s_r = v\rho$ reláció szerint

$$v = \frac{s_r}{\rho} = \frac{hk_0}{2\pi m_0}. \quad (25.4.21)$$

Mivel k_0 pozitív, ezért v is pozitív lesz, tehát a részecskék az origótól radiális irányban eltávolodnak. A radiális mozgás kinetikus energiája:

$$E_0 = \frac{1}{2} m_0 v^2 = \frac{h^2 k_0^2}{8\pi^2 m_0}. \quad (25.4.22)$$

Az r sugarú gömbfelületen áthaladó részecskeáram összintenzitása:

$$I(r,t) = \int s_r(x,y,z,t) r^2 \sin\vartheta d\vartheta d\phi = I_0 e^{-\frac{2\pi}{h} r\left(t-\frac{r}{v}\right)}, \qquad (25.4.23)$$

ahol I_0 egy, a helytől és időtől független állandó és

$$\Gamma = \frac{h^2 k_0 \kappa}{2\pi^2 m_0}. \qquad (25.4.24)$$

Eredményeink szerint tehát Ψ az origóból v sebességgel kirepülő részecskék terét írja le, a forrás I intenzitása az idővel exponenciálisan csökken. Egy ilyen állapotot (radioaktívan) bomló állapotnak nevezünk. A bomlás felezési idejét, tehát azt a T időtartamot, ami alatt az I intenzitás a felére csökken, $e^{-\frac{2\pi}{h}\Gamma T} = \frac{1}{2}$-ből kapjuk meg:

$$T = \frac{h \ln 2}{2\pi\Gamma} = \frac{\pi \ln 2 m_0}{h k_0 \kappa}. \qquad (25.4.25)$$

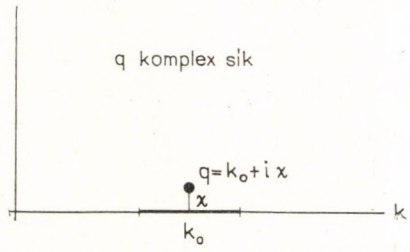
Most térjünk át azoknak a virtuális állapotoknak vizsgálatára, melyek a komplex q sík első negyedébe esnek. Itt $q = k_0 + i\kappa$, ahol k_0 és κ pozitív számok. Virtuális állapotról lévén szó, q kielégíti az $F_l(q) = 0$ egyenletet. Vegyük most szemügyre az $F_l'(q)$ számot, ahol a vessző a deriváltat jelenti. Jelöljük ennek abszolút értékét B_l-lel és argumentumát $(\Phi_l - l\pi/2)$-vel:

$$F_l'(q) = B_l e^{i\left(\Phi_l - \frac{l\pi}{2}\right)}. \qquad (25.4.26)$$

Feltevésünk szerint a q gyök a valós tengelyhez igen közel esik:

$$\kappa \ll k_0.$$

Tekintsük a valós tengelyen a k_0 érték közvetlen környezetét (86. ábra) és számít-



86. ábra. A rezonanciaszórás tartománya

suk ki ezen a szakaszon a $\delta_l(k)$ szórási fázisállandót. Először fejtsük *Taylor*-sorba F_l-et a q gyökhely környékén:

$$F_l(k) = F_l(q) + F_l'(q)(k-q) + \ldots$$

Mivel k és q közel esnek egymáshoz, ezért $(k-q)$ magasabb hatványait elhanyagoljuk. (4.12) és (4.26) miatt $F_l(k)$ kifejezése a következőképpen alakul:

$$F_l(k) = B_l e^{i\left(\Phi - \frac{l\pi}{2}\right)}(k - k_0 - \kappa i)\,. \tag{25.4.27}$$

$F_l(k)$-ból a δ_l hullámszámhoz tartozó szórási fázisállandót a (4.17) szabály segítségével állapítjuk meg:

$$\delta_l(k) = \Phi_l - \operatorname{arc\,tg}\frac{\kappa}{k - k_0}\,. \tag{25.4.28}$$

A fázisállandó tehát két tagból tevődik össze: egy k-tól független Φ_l konstansból és egy k-tól erősen függő

$$\delta_l^{\text{Rez.}}(k) = -\operatorname{arc\,tg}\frac{\kappa}{k - k_0} \tag{25.4.29}$$

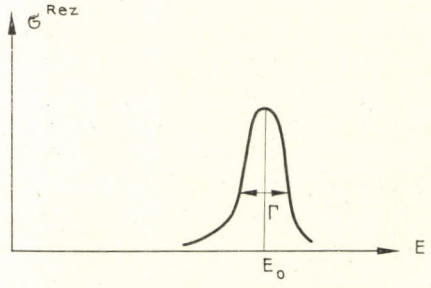
rezonanciatagból; ez utóbbi a $k = k_0$ helyen veszi fel a $\pi/2$ rezonanciaértéket. A rezonanciaszórás hatáskeresztmetszete

$$\sigma_l^{\text{Rez.}} = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}\sin^2\delta_l \simeq \frac{4\pi(2l+1)}{k_0^2}\cdot\frac{\kappa^2}{(k-k_0)^2+\kappa^2}\,. \tag{25.4.30}$$

(Az első tényezőben $k \simeq k_0$ közelítést megengedhetjük magunknak.) Fejezzük ki a hatáskeresztmetszetet a bombázó részecskék $E = h^2k^2/8\pi^2m_0$ energiája segítségével. A (4.22) és (4.24) jelölések bevezetésével (4.30) a következő alakra hozható:

$$\sigma_l^{\text{Rez.}} \simeq \frac{\text{konst.}}{(E-E_0)^2+\Gamma^2}\,. \tag{25.4.31}$$

Itt a konst. egy E-től független mennyiséget jelöl. Az átalakítás során elhanyagoltunk $(E - E_0)$-ban magasabb rendű tagokat. (4.31)-et *Breit–Wigner-formulának* nevezzük. Az ennek megfelelő rezonanciahatáskeresztmetszetet a 87. ábra szemlélteti. A rezonanciaszórásnak éles maximuma van az $E = E_0$ helyen, a rezonancia szélessége pedig Γ-val egyezik meg.

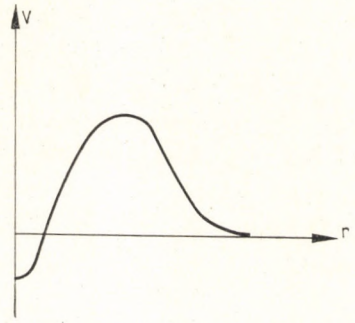


87. ábra. A rezonanciaszórás hatáskeresztmetszete. E_0 a rezonanciaenergia és Γ a rezonancia szélessége

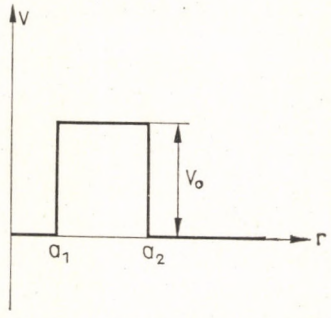
Láttuk, hogy (4.12) gyökei szimmetrikusan helyezkednek el az imaginárius tengelyre. Ez azt jelenti, hogy minden bomló állapotnak megfelel szórási rezonancia és fordítva. A bomló állapotból kirepülő részecskék E_0 kinetikus energiája éppen megegyezik a szóródás rezonanciaenergiájával, a bomló állapot T felezési ideje pedig a rezonancia szélességével van egyértelmű kapcsolatban: $T = \frac{h \ln 2}{2\pi\Gamma}$. A bomló állapotok megfigyelésével a szórási rezonanciák helyére és szélességére következtethetünk és fordítva: ha a szóródásban rezonanciamaximum lép fel, akkor mindig létezik megfelelő bomló állapot.

5. §. A radióaktív α-bomlás

Az α-bomlás alkalmából hélium-atommagok, vagy más néven α-részecskék lépnek ki a radioaktív magokból. Természetes α-bomlást, a szamáriumnak egy izotópjától eltekintve, csak a legnehezebb elemek mutatnak. A határ ott egészen éles; a legnehezebb stabilis elem a 209-es Bi izotóp, a legkönnyebb α-sugárzó



88/a ábra. Potenciálgödör és -gát a magban



88/b ábra. Derékszögű potenciálgát

elem pedig a 210-es atomsúlyú Po. Különböző α-sugárzó elemek α-részecskéinek kinetikus energiája és az elemek felezési ideje általában különböző. Az α-részek energiája és a felezési idő között egy igen jellegzetes összefüggés áll fenn, melyet GEIGER és NUTTAL fedezett fel. Ez az összefüggés azt mondja, hogy minél nagyobb egy α-sugárzó izotóp felezési ideje, annál kisebb az α-részecskék kinetikus energiája. Ennek a törvényszerűségnek megokolása csak a hullámmechanika alapján sikerült, mégpedig első ízben GAMOWnak. A következőkben a *Gamow*-elmélettel fogunk foglalkozni.

Az atommag – eltekintve a mag közvetlen környezetétől – pozitív töltésénél fogva más pozitív töltésre, pl. egy α-részecskére taszító hatást gyakorol, amely annál nagyobb, minél közelebb jut az α-részecske a maghoz. Ezt a mag felé haladva növekedő taszító erőt a $2Ze^2/r$ *Coulomb*-potenciál írja le. Láttuk azonban a 19. fejezet 11.§-ban, hogy a mag taszító hatása igen kis, 10^{-12} cm nagyságrendű távolságokon megszűnik, és erős vonzásba megy át, ott tehát a potenciál már nem

emelkedik tovább, hanem hirtelen leesik, miáltal a magban egy potenciálgödör alakul ki, melyet egy potenciálgát választ el a magon túli tartományoktól; ez látható a 88/a ábrán. Az egyszerűség kedvéért a potenciált a 88/b ábra derékszögű potenciálgátjával fogjuk közelíteni.

Írjuk fel először is a (4.3) radiális *Schrödinger*-egyenletet az $l = 0$-nak megfelelő s hullámra:

$$\begin{aligned} &\frac{d^2u_0}{dr^2} + q^2u_0 = 0, \quad \text{ha} \quad r < a_1, \\ &\frac{d^2u_0}{dr^2} - p^2u_0 = 0, \quad \text{ha} \quad a_1 < r < a_2, \\ &\frac{d^2u_0}{dr^2} + q^2u_0 = 0, \quad \text{ha} \quad r > a_2. \end{aligned} \tag{25.5.1}$$

Itt bevezettük a

$$p = p(q) = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2} V_0 - q^2} \tag{25.5.2}$$

jelölést. Az (5.1) differenciálegyenletek általános megoldásait minden további nélkül felírhatjuk:

$$\begin{aligned} u_0 &= b_1 \sin(qr) + c_1 \cos(qr), \quad \text{ha} \quad r < a_1, \\ u_0 &= b_2 e^{p(r-a_1)} + c_2 e^{-p(r-a_1)}, \quad \text{ha} \quad a_1 < r < a_2, \\ u_0 &= b_3 e^{iq(r-a_2)} + c_3 e^{-iq(r-a_2)}, \quad \text{ha} \quad r > a_2. \end{aligned} \tag{25.5.3}$$

Első feladatunk az integrációs állandók meghatározása. A fizikai megoldásra előírt (4.4) kezdeti feltételből

$$b_1 = \frac{1}{q} \quad \text{és} \quad c_1 = 0. \tag{25.5.4}$$

A b_2 és c_2 állandókat az a követelmény határozza meg, hogy u_0 és deriváltja folytonosan változzék az $r = a_1$ helyen. Ebből

$$\begin{aligned} b_2 &= \frac{1}{2q}\left[\sin(qa_1) + \frac{q}{p}\cos(qa_1)\right] \\ c_2 &= \frac{1}{2q}\left[\sin(qa_1) - \frac{q}{p}\cos(qa_1)\right] \end{aligned} \tag{25.5.5}$$

A b_3 és c_3 állandókat az $r = a_2$ helyre vonatkozó folytonossági követelményekből határozzuk meg. Bevezetve a potenciálgát vastagságát megadó $l = a_2 - a_1$

távolságot, az eredmény a következő:

$$b_3 = \frac{1}{4q}\left[\left(1-\frac{ip}{q}\right)\left(\sin(qa_1)+\frac{q}{p}\cos(qa_1)\right)e^{pl}+\right.$$
$$\left.+\left(1+\frac{ip}{q}\right)\left(\sin(qa_1)-\frac{q}{p}\cos(qa_1)\right)e^{-pl}\right],$$
$$c_3 = \frac{1}{4q}\left[\left(1+\frac{ip}{q}\right)\left(\sin(qa_1)+\frac{q}{p}\cos(qa_1)\right)e^{pl}+\right. \tag{25.5.6}$$
$$\left.+\left(1-\frac{ip}{q}\right)\left(\sin(qa_1)-\frac{q}{p}\cos(qa_1)\right)e^{-pl}\right].$$

Ezek után vizsgáljuk meg u_0 viselkedését az $r \to \infty$ esetre. (5.3) utolsó kifejezése pontosan megfelel a (4.9) aszimptotikus formulának, és a két kifejezés összevetésével megállapíthatjuk, hogy

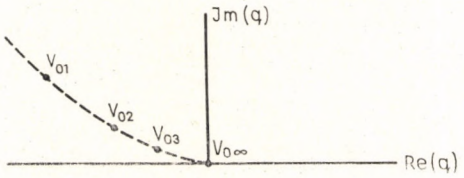
$$\frac{1}{2iq}F_0(q) = b_3 e^{-iqa_2} \quad \text{és} \quad -\frac{1}{2iq}F_0(-q) = c_3 e^{iqa_2}.$$

(5.6) behelyettesítésével a következő végeredményt kapjuk:

$$F_0(q) = \frac{i}{2}e^{-iqa_2}\left[\left(1-\frac{ip}{q}\right)\left(\sin(qa_1)+\frac{q}{p}\cos(qa_1)\right)e^{pl}+\right.$$
$$\left.+\left(1+\frac{ip}{q}\right)\left(\sin(qa_1)-\frac{q}{p}\cos(qa_1)\right)e^{-pl}\right]. \tag{25.5.7}$$

Az előző §-ban megbeszélt szabályok szerint az s-állapotok valamennyi fizikai jellemzőjét $F_0(q)$-ból tudjuk meg határozni. Például láttuk, hogy a bomló állapotok felezési idejének és a kirepülő α-részecskék sebességének meghatározásához az $F_0(q) = 0$ egyenlet gyökeit kell megkeresnünk. (5.7) alapján a bomló állapotokat megadó egyenlet:

$$\frac{p\sin(qa_1)+q\cos(qa_1)}{p\sin(qa_1)-q\cos(qa_1)} = -\frac{q+ip}{q-ip}e^{-2pl}. \tag{25.5.8}$$



89. ábra. Bomló állapotok a derékszögű potenciálgát esetén. $V_{01} < V_{02} < V_{03} < \ldots$ a potenciálgát magasságának egyre növekvő értékei

Ezt a transzcendens egyenletet csak numerikus (vagy grafikus) módszerrel lehet megoldani. A megoldás elhelyezkedését a komplex q síkon, különböző V_0 értékek mellett, a 89. ábra szemlélteti: Az ábráról leolvashatjuk, hogy V_0 növekedésekor a $q = -k_0 + i\kappa$ gyök egyre közelebb kerül az origóhoz, tehát mind k_0, mind κ értékei egyre csökkennek. (4.22) és (4.25)-ből következik, hogy V_0 növelése csökkenti az α-részek E_0 kinetikus energiáját és növeli a T felezési időt. Látjuk tehát, hogy nagyobb felezési időköz kisebb kinetikus energia tartozik, és megfordítva, ami megfelel a *Geiger–Nuttal*-féle törvénynek.

6. §. Az integrálegyenlet-módszer

A 4. §-ban megbeszéltek szerint centrális erőtér esetén az alapvető feladat mindig a (4.3) radiális *Schrödinger*-egyenlet megoldása, és a fizikai megoldás aszimptotikus viselkedését megszabó $F_l(q)$ együttható megállapítása. $F_l(q)$ birtokában mind a kötött állapotok energiája, mind a szóráshatáskeresztmetszetek egyszerű szabályok segítségével kiszámíthatók. A radiális *Schrödinger*-egyenlet megoldását, különösen ha elektronikus számítógép áll rendelkezésünkre, igen meggyorsíthatjuk az ún. *integrálegyenletmódszer*rel. A következőkben ezt a módszert ismertetjük.

Keressük az $u_l(q, r)$ fizikai megoldást a következő alakban:

$$u_l(q, r) = \xi(r) j_l(qr) + \eta(r) n_l(qr) . \tag{25.6.1}$$

Itt ξ és η két, egyelőre ismeretlen függvény, j_l és n_l pedig a (3.3) alatti kifejezések. ξ és η között még a következő kapcsolatot írjuk elő:

$$\frac{d\xi}{dr} j_l(qr) + \frac{d\eta}{dr} n_l(qr) = 0 . \tag{25.6.2}$$

Helyettesítsünk be a (4.3) *Schrödinger*-egyenletbe. (6.1) differenciálása (6.2) miatt a következő eredményre vezet:

$$\frac{du_l(q, r)}{dr} = \xi(r) \frac{dj_l(qr)}{dr} + \eta(r) \frac{dn_l(qr)}{dr} \tag{25.6.3}$$

és

$$\frac{d^2u_l(q, r)}{dr^2} = \xi(r) \frac{d^2j_l(qr)}{dr^2} + \eta(r) \frac{d^2n_l(qr)}{dr^2} + \frac{d\xi}{dr} \frac{dj_l(qr)}{dr} + \frac{d\eta}{dr} \frac{dn_l(qr)}{dr} . \tag{25.6.4}$$

A radiális *Schrödinger*-egyenletbe való helyettesítés eredménye pedig:.

$$\begin{aligned} \frac{d\xi}{dr} \frac{dj_l(qr)}{dr} + \frac{d\eta}{dr} \frac{dn_l(qr)}{dr} = \\ = -\xi(r) \left[\frac{d^2j_l(qr)}{dr^2} + \left(q^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) j_l(qr) \right] - \\ - \eta(r) \left[\frac{d^2n_l(qr)}{dr^2} + \left(q^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) n_l(qr) \right] . \end{aligned} \tag{25.6.5}$$

Vegyük most tekintetbe, hogy $j_l(qr)$ és $n_l(qr)$ kielégítik a (3.1) differenciálegyenletet, tehát az erőmentes esetre vonatkozó radiális *Schrödinger*-egyenletet:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 j_l(qr)}{dr^2} + \left(q^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) j_l(qr) &= 0, \\ \frac{d^2 n_l(qr)}{dr^2} + \left(q^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) n_l(qr) &= 0\,. \end{aligned} \tag{25.6.6}$$

Emiatt (6.5) a következőképpen alakul:

$$\frac{d\xi}{dr}\frac{dj_l(qr)}{dr} + \frac{d\eta}{dr}\frac{dn_l(qr)}{dr} = U(r)u_l(q,r). \tag{25.6.7}$$

(6.2) és (6.7) kétismeretlenes egyenletrendszernek tekinthető, amiből a $d\xi/dr$ és $d\eta/dr$ differenciálhányadosok kiszámíthatók. Az egyenletrendszer megoldásánál kihasználhatjuk a (3.3) *Bessel*-függvények között fennálló

$$\frac{dn_l(qr)}{dr} j_l(qr) - \frac{dj_l(qr)}{dr} n_l(qr) = q \tag{25.6.8}$$

relációt. Ily módon kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \frac{d\xi}{dr} &= -\frac{1}{q} n_l(qr)U(r)u_l(q,r)\,, \\ \frac{d\eta}{dr} &= \frac{1}{p} j_l(qr)U(r)n_l(q,r)\,. \end{aligned} \tag{25.6.9}$$

Ezeket az egyenleteket integrálva megkapjuk ξ-t és η-t. Ehhez azonban tudnunk kell a ξ és η függvények kezdeti feltételeit. A j_l és n_l függvények viselkedését $r \to 0$ esetén (3.6)-ból állapíthatjuk meg:

$$j_l(qr) \approx \frac{(qr)^{l+1}}{(2l+1)!!} \quad \text{és} \quad n_l(qr) \approx -\frac{(2l+1)!!}{(qr)^l}\,, \quad \text{ha } r \to 0\,. \tag{25.6.10}$$

(6.1) akkor elégíti ki a fizikai megoldásra vonatkozó (4.4) feltételt, ha

$$\xi(0) = \frac{(2l+1)!!}{q^{l+1}} \quad \text{és} \quad \eta(0) = 0\,. \tag{25.6.11}$$

Ezek tekintetbevételével (6.9) integrálása a következő eredményt adja:

$$\begin{aligned} \xi(r) &= \frac{1}{q}\left[\frac{(2l+1)!!}{q^l} - \int_0^r n_l(qr')U(r')u_l(q,r')\,dr'\right], \\ n(r) &= \frac{1}{q}\int_0^r j_l(qr')U(r')u_l(q,r')\,dr'\,. \end{aligned} \tag{25.6.12}$$

Ezeket visszaírva (6.1)-be, megkapjuk a kívánt integrálegyenletet:

$$u_l(q,r)=\frac{1}{q}\left[\frac{(2l+1)!!}{q^l}j_l(qr)+\int_0^r\{n_l(qr)j_l(qr')-j_l(qr)n_l(qr')\}U(r')u_l(q,r')dr'\right]. \tag{25.6.13}$$

Ez egy *Volterra*-típusú inhomogén integrálegyenlet, melynek megoldásával $u_l(q,r)$ egyértelműen meghatározható.

Vizsgáljuk meg ezek után u_l aszimptotikus viselkedését az $r\to\infty$ határesetben. A j_l és n_l függvények aszimptotikus alakját a (3.10) formulák határozzák meg:

$$j_l(qr)\approx\sin\left(qr-\frac{l\pi}{2}\right),$$

$$n_l(qr)\approx-\cos\left(qr-\frac{l\pi}{2}\right),\qquad \text{ha } r\to\infty. \tag{25.6.14}$$

(6.13) integráljának felső határát igen nagy r-ek tartományában nyugodtan ∞-nek vehetjük, hiszen igen nagy r értékekre $U(r)$ elhanyagolhatóan kicsinnyé válik. Ezért (6.13) aszimptotikus alakja:

$$u_l(q,r)\approx\frac{1}{q}\left[\frac{(2l+1)!!}{q^l}-\int_0^\infty n_l(qr')U(r')u_l(q,r')dr'\right]\sin\left(qr-\frac{l\pi}{2}\right)-$$

$$-\frac{1}{q}\int_0^\infty j_l(qr')U(r')u_l(q,r')\,dr'\cos\left(qr-\frac{l\pi}{2}\right),\qquad \text{ha } r\to\infty. \tag{25.6.15}$$

Az *Euler*-összefüggések segítségével ez a következő alakban is felírható:

$$u_l(q,r)\approx\frac{1}{2iq}\left[\frac{(2l+1)!!}{q^l}-\int_0^\infty(ij_l(qr')+n_l(qr'))U(r')u_l(q,r)dr'\right]e^{i\left(qr-\frac{l\pi}{2}\right)}-$$

$$-\frac{1}{2iq}\left[\frac{(2l+1)!!}{q^l}+\int_0^\infty(ij_l(qr')-n_l(qr'))U(r')u_l(q,r')dr'\right]e^{-i\left(qr-\frac{l\pi}{2}\right)}. \tag{25.6.16}$$

Ez az aszimptotikus viselkedés valóban megfelel (4.9)-nek, az összehasonlítás megadja $F_l(q)$ kifejezését is:

$$F_l(q)=e^{-i\frac{l\pi}{2}}\left[\frac{(2l+1)!!}{q^l}-\int_0^\infty(ij_l(qr)+n_l(qr))\,U(r)u_l(q,r)\,dr\right]. \tag{25.6.17}$$

Ezzel elértük célunkat, sikerült $F_l(q)$-ra egy integrálkifejezést kapnunk. Az integ-

rálegyenlet-módszer alkalmazásának menete tehát a következő: először megoldjuk a (6.13) *Volterra*-típusú integrálegyenletet, majd az $u_l(q, r)$ megoldást (6.17)-be téve, kiszámítjuk $F_l(q)$-t. Megjegyezzük, hogy bár (6.17)-ben az integráció elvben 0-tól ∞-ig fut, gyakorlatban csak arra a tartományra kell integrálnunk ahol $U(r)$ zérustól különböző. Az integrálegyenlet-módszert elsősorban a szórásszámításban szokták alkalmazni. (6.17) természetesen magában foglalja a szórásprobléma megoldását is. A δ_l fázisállandó értékét a (4.17) szabály adja meg:

$$\delta_l(k) = -\operatorname{arctg} \frac{\int_0^\infty j_l(kr)U(r)u_l(k,r)\,dr}{\frac{(2l+1)!!}{k^l} - \int_0^\infty n_l(kr)U(r)u_l(k,r)\,dr} \,. \tag{25.6.18}$$

7. §. Szóródás merev falú gömbön

Az előzőekben a szóródás általános elméletét ismertettük. A tárgyalás folyamán hallgatólagosan mindig feltételeztük, hogy egyrészt az erőtér V potenciáljának nincsenek erős szingularitásai, másrészt hogy a potenciál az erőtér centrumától távol gyorsan zérushoz konvergál. Ezek a feltételek a legtöbb egyszerű erőtér esetén valóban teljesülnek, mindössze két olyan, gyakorlatilag is érdekes erőtér van, mely ez alól kivételt képez. Az egyik a teljesen merev falú gömb esete, a másik a *Coulomb*-erőtér. A *Coulomb*-szórással a következő szakaszban fogunk foglalkozni, most a merev falú gömbön való szóródást tárgyaljuk.

Jelöljük a merev gömb sugarát a-val. A potenciál

$$\begin{aligned} V(r) &= +\infty, \quad \text{ha} \quad r < a, \\ V(r) &= 0, \quad \text{ha} \quad r > a. \end{aligned} \tag{25.7.1}$$

A szóródó részecske a gömbbe nem hatolhat be, ezért a ψ hullámfüggvénynek a gömb belsejében és felszínén zérusnak kell lennie. A hullámfüggvény csak akkor teljesíti ezt a követelményt, ha minden egyes parciális hullámra fennáll, hogy

$$u_l(r) = 0, \quad \text{ha} \quad r \leq a. \tag{25.7.2}$$

Ez ellentmond a fizikai megoldásra vonatkozó (2.5) kezdeti feltételnek. Az ellentmondáson nem kell csodálkoznunk, hiszen (2.5) levezetésénél feltételeztük, hogy a *Schrödinger*-egyenletben az $r \to 0$ határesetben az $\frac{l(l+1)}{r^2}$ tag mellett a potenciális energia elhanyagolható. Természetes, hogy a (7.1) potenciál esetén a viszonyok egészen mások. Itt (2.5) szerepét a (7.2) határfeltétel veszi át.

A gömbön kívüli tartományban a radiális *Schrödinger*-egyenlet, mivel itt a potenciál zérus, a következő:

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_l = 0\,. \quad \text{ha } r \geq a\,. \tag{25.7.3}$$

Ez megegyezik (3.1) második egyenletével, általános megoldását (3.4) alatt már felírtuk:

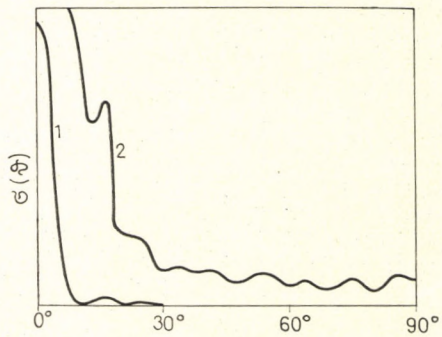
$$u_l(r) = bj_l(kr) + cn_l(kr), \quad \text{ha } r \geq a. \tag{25.7.4}$$

Az előbbiek szerint ennek zérusnak kell lennie a gömb felszínén, tehát az $r = a$ helyen. Ebből a b és c integrációs állandók viszonyára a következő értéket kapjuk:

$$\frac{c}{b} = -\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}\,. \tag{25.7.5}$$

A δ_l fázisállandó meghatározásához meg kell vizsgálnunk a (7.4) megoldás viselkedését az $r \to \infty$ határesetben. A (6.14) aszimptotikus formulák felhasználásával kapjuk, hogy

$$u_l(r) \approx b\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) - c\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \quad \text{ha } r \to \infty\,. \tag{25.7.6}$$



90. ábra. A merev falu gömb differenciális hatáskeresztmetszete, ha $ka = 20$. (N. F. Mott, H. S. W. Massey: The Theory of Atomic Collisions. Clarendon, Oxford, 1949.)

Vagy kissé más alakban

$$u_l(r) \approx (b^2 + c^2)^{1/2}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} - \operatorname{arctg}\frac{c}{b}\right), \quad \text{ha } r \to \infty\,. \tag{25.7.7}$$

Összevetve (2.7)-tel, leolvashatjuk, hogy $\delta_l = -\operatorname{arctg}\frac{c}{b}$, tehát

$$\delta_l = \operatorname{arctg}\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}\,. \tag{25.7.8}$$

A fázisállandó meghatározásával a szórásproblémát lényegében véve megoldottuk. A 90. ábrán bemutatjuk a szórás differenciális hatáskeresztmetszetét a $ka = 20$ esetben, vagyis ha a bombázó energia $E = 50\hbar^2/\pi^2 m_0 a^2$.

A szórás teljes hatáskeresztmetszetét (2.16)-ból kapjuk meg, a (7.8) fázisállandók behelyettesítésével:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1) j_l^2(ka)}{j_l^2(ka) + n_l^2(ka)}. \tag{25.7.9}$$

Ha a bombázó energia igen kicsiny, tehát ha $ka \ll 1$, úgy a szórásprobléma rendkívül egyszerűvé válik. Igen kis argumentumokra ugyanis a (6.10) közelítéseket használhatjuk, és ezek szerint a szórás fázisállandója

$$\delta_l \approx - \operatorname{arctg} \frac{(ka)^{2l+1}}{(2l-1)!!(2l+1)!!}. \tag{25.7.10}$$

A szórás fázisállandója növekvő l-lel rohamosan csökken. A domináló fázisállandó az s hullámnak megfelelő

$$\delta_0 \approx - \operatorname{arctg} (ka) - ka \tag{25.7.11}$$

lesz, a szórás teljes hatáskeresztmetszete pedig ez esetben

$$\sigma = 4\pi a^2, \tag{25.7.12}$$

ami a geometriai keresztmetszet négyszeresével egyenlő.

8. §. A Coulomb-szórás

Coulomb-szórásról beszélünk, ha a szórócentrum és a bombázó részecske kölcsönhatását a

$$V = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \tag{25.8.1}$$

Coulomb-potenciál írja le. Itt $Z_1 e$ a szórócentrum, $Z_2 e$ pedig a bombázó részecske elektromos töltése. A *Coulomb*-potenciál növekvő r-rel igen lassan válik zérussá, ezért hatósugara végtelen nagynak tekinthető. Emiatt a *Coulomb*-szórás több szempontból „kivételes esetnek" számít, melyre nem alkalmazható közvetlenül az előzőekben kidolgozott szóráselmélet. *Coulomb*-szórás esetén pl. a teljes hatáskeresztmetszet értelmetlen fogalom, hiszen a bombázó részecske, bármilyen távol halad is el a szórócentrumtól, feltétlenül eltérül, ezért a *Coulomb*-potenciál teljes hatáskeresztmetszete végtelen nagy. Csak a szórt részecskék irányeloszlását magadó $\sigma(\vartheta)$ differenciális hatáskeresztmetszetét használhatjuk a szóródás leírására.

A *Coulomb*-szóródás vizsgálata mind az atomfizika, mind a magfizika szempontjából igen fontos. Számos módszer ismeretes a probléma megoldására, ezek közül mi csak egy speciálisat ismertetünk, mely nem kapcsolódik a parciális hullámok módszeréhez, és csak akkor használható, ha a potenciált minden r-re a

(8.1) *Coulomb*-törvény írja le. A magfizikából ismeretes az ún. anomális *Coulomb*-szóródás, amikor a potenciál az origó közelében, a nukleáris kölcsönhatások miatt, eltér (8.1)-től, és csak nagy r távolságokban lesz *Coulomb*-szerű. Az anomális *Coulomb*-szórás elméletével nem foglalkozunk, csak megjegyezzük, hogy a parciális hullámok módszere általánosítható úgy, hogy alkalmazható legyen a hosszúhatótávolságú *Coulomb*-erők esetére is.

A megoldandó *Schrödinger*-egyenlet:

$$\Delta\psi + \left(k^2 + \frac{2nk}{r}\right)\psi = 0\,, \tag{25.8.2}$$

ahol k az (1.3)-mal definiált hullámszám és

$$n = \frac{4\pi^2 Z_1 Z_2 e^2 m_0}{h^2 k}\,. \tag{25.8.3}$$

Az n dimenzionélküli mennyiség arányos a *Coulomb*-kölcsönhatás erősségét jellemző Z_1Z_2 szorzattal és fordítva arányos k-val, tehát fordítva arányos a bombázó részecske $v_0 = \dfrac{hk}{2\pi m_0}$ kezdeti sebességével.

Keressük a *Schrödinger*-egyenlet megoldását

$$\psi = e^{ikz} g(r - z) \tag{25.8.4}$$

alakban, akkor a g-függvényre a következő másodrendű, lineáris differenciálegyenlet adódik:

$$t\frac{d^2g}{dt^2} + (1 - ikt)\frac{dg}{dt} - nkgt = 0\,, \tag{25.8.5}$$

ahol $t = r - z$. Keressük e differenciálegyenlet megoldását egy $g(t) = \sum_{p=0}^{\infty}(a_p t^p/p!)$ hatványsor alakjában. Behelyettesítés és t hatványai szerinti rendezés után a

$$\sum_{p=0}^{\infty}[(p+1)a_{p+1} - k(n + ip)\,a_p]\,t^p/p! = 0$$

egyenletet kapjuk. Ez természetesen csak akkor állhat fenn t minden értékére, ha benne t minden egyes hatványának együtthatója zérus. Ebből az a_p együtthatókra az

$$a_{p+1} = k\frac{n + ip}{p + 1}a_p \tag{25.8.6}$$

rekurziós képletet kapjuk, melyből

$$a_p = \frac{n(n+i)(n+2i)\ldots[n+(p-1)i]}{p!}\,k^p a_0\,. \tag{25.8.7}$$

A (8.5) differenciálegyenlet megoldása tehát

$$g(t) = a_0\left[1 + \frac{n}{1!}\frac{kt}{1!} + \frac{n(n+i)}{2!}\frac{(kt)^2}{2!} + \frac{n(n+i)(n+2i)}{3!}\frac{(kt)^3}{3!} + \ldots\right], \tag{25.8.8}$$

ahol a_0 egy egyelőre határozatlan normálási állandó. A szögletes zárójelben szereplő hatványsor speciális esete a matematikai irodalomból ismert

$$F(a, b; x) = 1 + \frac{a}{b}\frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{b(b+1)}\frac{x^2}{2!} + \frac{a(a+1)(a+2)}{b(b+1)(b+2)}\frac{x^3}{3!} + \ldots \tag{25.8.9}$$

konfluens hipergeometriai sornak, nevezetesen (8.8)-ban az $F(-in, 1; ikt)$ kifejezés lép fel.

A ψ hullámfüggvényre az eddigiek szerint a

$$\psi = a_0 e^{ikz} F(-in, 1; ik(r - z)) \tag{25.8.10}$$

kifejezés adódott. Vizsgáljuk meg, hogy hogyan viselkedik a ψ hullámfüggvény a szórócentrumtól igen nagy távolságban. A konfluens hipergeometriai függvények elmélete szerint a (8.9) sor összege az $|x| \to \infty$ esetben az

$$F(a, b; x) \approx \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)}(-x)^{-a} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^x x^{a-b}$$

aszimptotikus formulával adható meg. A minket érdeklő speciális esetben pedig

$$F(-in, 1; ikt) \approx \frac{e^{\frac{n\pi}{2}}}{\Gamma(1+in)}\left\{(kt)^{in} - ne^{i(kt+2\eta_0)}(kt)^{-(1+in)}\right\}, \tag{25.8.11}$$

ahol $e^{2i\eta_0} = \Gamma(1+in)/\Gamma(1-in)$. Ennek felhasználásával a ψ hullámfüggvény aszimptotikus viselkedése $|r - z| \to \infty$ esetében, azaz (a z-tengely kivételével) távol az origótól:

$$\psi \approx \frac{a_0 e^{\frac{n\pi}{2}}}{\Gamma(1+in)}\left\{e^{i[kz + n\ln k(r-z)]} - \frac{n}{k(r-z)} e^{i[kr - n\ln k(r-z) + 2\eta_0]}\right\}$$

$$= \frac{a_0 e^{\frac{n\pi}{2}}}{\Gamma(1+in)}\left\{e^{i[kz + n\ln k(r-z)]} + f_{\text{coul}}(\vartheta)\frac{e^{i(kr - n\ln kr)}}{r}\right\}, \tag{25.8.12}$$

ahol

$$f_{\text{coul}}(\vartheta) = -\frac{ne^{i[-n\ln(1-\cos\vartheta) + 2\eta_0]}}{k(1-\cos\vartheta)}. \tag{25.8.13}$$

Hullámfüggvényünk aszimptotikus viselkedése megfelel a 1.§-ban előírt követelménynek: egy beeső hullámból és egy szórt hullámból tevődik össze. (8.12) és (1.5) összehasonlításával nagyon érdekes jelenséget állapíthatunk meg: a hosszú hatótávolságú *Coulomb*-erő mind a beeső, mind a szórt hullámot eltorzítja

egy logaritmikusan változó fázistényezővel. E torzulás okára a klasszikus mechanika is rávilágít. Tekintsük az összes olyan hiperbolapályákat, melyek egyik aszimptotája a beeső részecskék mozgásirányának felel meg, tehát a negatív z-tengellyel párhuzamos. A pályákra merőleges felületek, melyek az anyaghullámok hullámfrontjainak felelnek meg, még $z \to -\infty$ esetén sem mennek át $z = \text{konst.}$ síkokba, hanem a

$$z + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{m_0 v_0^2} \ln k(r - z) = \text{konst.}$$

felületekbe. Ennek megfelelően a beeső részecskéket leíró hullámfüggvény

$$e^{ik\left[z + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{m_0 v_0^2} \ln k(r-z)\right]}$$

lesz, ami, figyelembe véve (8.3)-at, éppen (8.12) első tagjának felel meg. Hasonlóképpen értelmezhető a szórt gömbhullám torzulása is. A szórt gömbhullám amplitúdóját a (8.13) képlet adja meg, ebből a *Coulomb*-szórás differenciális hatáskeresztmetszetét az (1.6) szabály szerint képezhetjük:

$$\sigma(\vartheta) = |f_{\text{coul}}(\vartheta)|^2 = \frac{n^2}{k^2(1 - \cos\vartheta)^2}.$$

Ha ide beírjuk a k és n mennyiségek kifejezéseit, úgy a következő végeredményt kapjuk:

$$\sigma(\vartheta) = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{4 m_0^2 v_0^4 \sin^4\left(\frac{\vartheta}{2}\right)}. \qquad (25.8.14)$$

Ezt a formulát a *Rutherford*-féle hatáskeresztmetszetnek nevezik. Érdekessége, hogy nem szerepel benne a kvantumfizika jellegzetes mennyisége, a *Planck*-állandó. Ez összefügg azzal, hogy a *Rutherford*-hatáskeresztmetszet a klasszikus mechanikából is levezethető, sőt így járt el maga RUTHERFORD is, amikor az α-részecskéknek az atommagokon való szóródását vizsgálta. Az α-részecskék szóródását leíró képlet RUTHERFORD hatáskeresztmetszet-formulájának egyenes következménye.

Végül vizsgáljuk meg annak valószínűségét, hogy a *Coulomb*-térben szóródó részecske az erőtér centrumába hatolhasson. A hullámfüggvény értelmezéséből következik, hogy ezt a valószínűséget $|\psi(0)|^2$ adja meg. (8.10) szerint a hullámfüggvény értéke az origóban éppen az a_0 normálási állandóval egyezik meg,

$$\psi(0) = a_0,$$

hiszen az F hipergeometriai sor értéke az origóban 1-gyel egyenlő. Az a_0 állandó értékét a hullámfüggvény aszimptotikus alakjából állapíthatjuk meg. Összehasonlítva a (8.12) és (1.5) képleteket, láthatjuk, hogy

$$\frac{a_0 e^{\frac{n\pi}{2}}}{\Gamma(1 + in)} = N = \sqrt{\frac{2\pi m_0 s_0}{hk}}.$$

Ebből, a $k = \frac{2\pi m_0 v_0}{h}$ reláció felhasználásával kapjuk:

$$a_0 = \sqrt{\frac{s_0}{v_0}} e^{-\frac{n\pi}{2}} \Gamma(1 + in). \tag{25.8.15}$$

Végül a keresett valószínűségsűrűség

$$|\psi(0)|^2 = \frac{s_0}{v_0} \frac{2\pi n}{e^{2\pi n} - 1}. \tag{25.8.16}$$

Ha a szórócentrum töltése zérus, vagyis ha $n = 0$, úgy természetesen semmiféle szóródás nincs. Ekkor a bombázó részecskék egyenletes $\rho_0 = \frac{s_0}{v_0}$ sűrűséggel töltik meg a teret. A (8.16) képletben fellépő

$$G(n) = \frac{2\pi n}{e^{2\pi n} - 1}$$

tényező azt mondja meg, hogy a *Coulomb*-kölcsönhatás következtében hányszorosára nő (vagy csökken) a bombázó részecskék sűrűsége az erőtér centrumában a ρ_0 átlagsűrűséghez képest. Ha $|n| \ll 1$, tehát ha a *Coulomb*-kölcsönhatás gyenge, vagy pedig a bombázó részecskék sebessége igen nagy, úgy közelítőleg

$$G(n) \approx 1 - \pi n,$$

tehát taszító kölcsönhatás ($n > 0$) esetén az egységnél valamivel kevesebb, vonzó kölcsönhatás ($n < 0$) esetén pedig egynél kissé nagyobb a G-tényező. Az $|n| \gg 1$ határesetben, tehát kis bombázó sebesség és erős kölcsönhatás esetén pedig G a következő közelítő képletekkel adható meg:

$$G(n) \approx 2\pi n e^{-2\pi n}, \quad \text{ha } n > 0$$

$$G(n) \approx 2\pi |n|, \quad \text{ha } n < 0.$$

A második képlet azt mutatja, hogy vonzó kölcsönhatás esetén a G tényező $|n|$-nel arányosan nő. Az első képlet, amelyik taszító kölcsönhatás esetén érvényes, tartalmazza az

$$e^{-2\pi n} = e^{-\frac{4\pi^2 Z_1 Z_2 e^2}{h v_0}} \tag{25.8.17}$$

ún. *Gamow*-faktort. Két pozitív töltésű atommag reakciója csak akkor következik be (feltéve, hogy a magsugarakat elég kicsinynek tekinthetjük), ha a két mag egymástól való távolsága zérusra csökken. Ennek valószínűsége, amint láttuk, $G(n)$-nel arányos. Kis bombázó energiáknál a magreakció valószínűségének nagyságrendjét elsősorban a (8.17) *Gamow*-faktor határozza meg.

9. §. Kis energiájú részecskék szóródása

A kis energiájú részecskék szóródásának jellemző vonása, hogy a szórócentrum csak az első néhány parciális hullámot befolyásolja lényegesen, a δ_l fázisállandók növekvő l-lel rohamosan csökkennek. Ennek oka az, hogy nagy impulzusmomentumú, tehát a szórócentrumtól távol elhaladó részecskék eltérülése elhanyagolhatóan kicsiny. Könnyen megállapíthatjuk azokat az l értékeket, ahol a szóródás még számottevő. Legyen a bombázó részecske sebessége v, a szórócentrumtól való elhaladási távolsága b. A klasszikus mechanika szerint energiája és impulzusmomentuma

$$E = \frac{1}{2} m_0 v^2, \quad \text{ill.} \quad N = m_0 v b$$

lesz. E két képletből v-t kiküszöbölve, b-re kapjuk, hogy

$$b = \frac{N}{\sqrt{2m_0 E}}.$$

A kvantummechanikában az impulzusmomentum abszolút értéke csak $N = \frac{h}{2\pi}\sqrt{l(l+1)}$ lehet. Ezzel az elhaladási távolság

$$b = \frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{l(l+1)}{2m_0 E}}. \tag{25.9.1}$$

A bombázó részecske csak akkor térül el, ha ez a távolság kisebb, mint a szórócentrum hatótávolsága, melyet a-val jelölünk. A szóródás feltétele tehát $b < a$, melyet (9.1) alapján a következőképpen fogalmazhatunk meg:

$$l(l+1) < \frac{8\pi^2 m_0}{h^2} E a^2 = (ka)^2. \tag{25.9.2}$$

Egészen kis bombázó energiák esetén, tehát ha

$$ka \ll 1 \tag{25.9.3}$$

a fenti feltételnek már csak az $l = 0$ mellékkvantumszámú s-hullám tesz eleget. A következőkben a tiszta s-szórás elméletét fogjuk áttekinteni.

Írjuk fel az s-hullámra vonatkozó (2.2) radiális hullámegyenletet egyrészt az E bombázó energiának megfelelő k hullámszám, másrészt $k = 0$ esetében:

$$\begin{aligned} &\frac{d^2u}{dr^2} + [k^2 - U(r)]u(r) = 0, \\ &\frac{d^2v}{dr^2} - U(r)v(r) = 0. \end{aligned} \tag{25.9.4}$$

(Az l indexet, mivel csak az $l = 0$ esettel foglalkozunk, elhagytuk.)

Mind az u, mind a v hullámfüggvényre érvényes a 2. §-ban megbeszélt korlátossági követelmény, tehát:

$$u(0) = v(0) = 0. \tag{25.9.5}$$

Az $U(r)$ potenciálfüggvény az a hatótávolságnál sokkal nagyobb r értékekre elhanyagolhatóan kicsinnyé válik, ezért a (9.4) egyenletek aszimptotikus viselkedése nagy r értékekre:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + k^2u(r) = 0 \quad \text{és} \quad \frac{d^2v}{dr^2} = 0, \qquad \text{ha } r \to \infty .$$

Ezen differenciálegyenletek általános megoldásaiból kapjuk, hogy

$$\left.\begin{aligned} u(r) &\approx A \sin(kr + \delta) \\ v(r) &\approx B\left(1 - \frac{r}{a_0}\right) \end{aligned}\right\}, \quad \text{ha } r \to \infty. \tag{25.9.6}$$

Az itt fellépő δ és a_0 integrációs állandókat a (9.5) határfeltételek egyértelműen meghatározzák, A és B pedig önkényesen választható normálási állandók. A továbbiak szempontjából célszerű lesz A-t és B-t úgy megválasztani, hogy (9.6)-ban a jobboldalakon álló kifejezések értéke az $r = 0$ helyen $+ 1$ legyen

$$A = \frac{1}{\sin\delta} \quad \text{és} \quad B = 1. \tag{25.9.7}$$

Szorozzuk meg (9.4) első egyenletét v-vel, a másodikat u-val és képezzük a különbségüket.

$$v(r)\frac{d^2u}{dr^2} - u(r)\frac{d^2v}{dr^2} = k^2u(r)v(r).$$

Integráljuk ezt az egyenletet 0-tól egy R felső határig. A baloldalon parciális integrálással és a (9.5) határfeltételek figyelembevételével kapjuk, hogy

$$\left(u(r)\frac{dv}{dr} - v(r)\frac{du}{dr}\right)_{r=R} = k^2\int_0^R u(r)v(r)dr. \tag{25.9.8}$$

Másrészt pedig a (9.6) jobboldalán álló

$$\bar{u}(r) \equiv \frac{\sin(kr + \delta)}{\sin\delta} \quad \text{és} \quad \bar{v}(r) \equiv 1 - \frac{r}{a_0} \tag{25.9.9}$$

függvényekre elemi integrálok elvégzésével a következő relációt vezethetjük le:

$$\left(\bar{u}(r)\frac{d\bar{v}}{dr} - \bar{v}(r)\frac{d\bar{u}}{dr}\right)_{r=R} = -\frac{1}{a_0} - k\operatorname{cotg}\delta + k^2\int_0^R \bar{u}(r)\bar{v}(r)dr. \tag{25.9.10}$$

Végül válasszuk az R integrációs határt olyan nagyra, hogy ott már teljesüljenek a (9.6) aszimptotikus feltételek. Ekkor a (9.8) és (9.10) egyenletek baloldala egymással egyenlő lesz, következésképpen a jobboldalaknak is egyenlőeknek kell lenniük. Ebből kapjuk, hogy

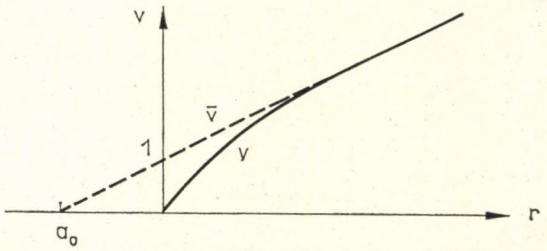
$$k \operatorname{cotg} \delta = -\frac{1}{a_0} + k^2 \int_0^R [\bar{u}(r)\bar{v}(r) - u(r)v(r)]dr . \tag{25.9.11}$$

Ez az összefüggés még tetszés szerinti k értékre is érvényes. Kis energiájú szórás, tehát kicsiny k esetén, a jobboldalon a k^2-tel szorzott integrál korrekciós tag lesz a k-tól független $-1/a_0$ taghoz képest. E korrekciós tagban az $u(r)$ radiális hullámfüggvényt a $k = 0$ esetnek megfelelő $v(r)$ hullámfüggvénnyel helyettesíthetjük, és hasonlóképpen $\bar{u}(r)$ helyébe $\bar{v}(r)$-t írhatunk. Ilymódon a δ fázisállandóra a következő kifejezést kapjuk:

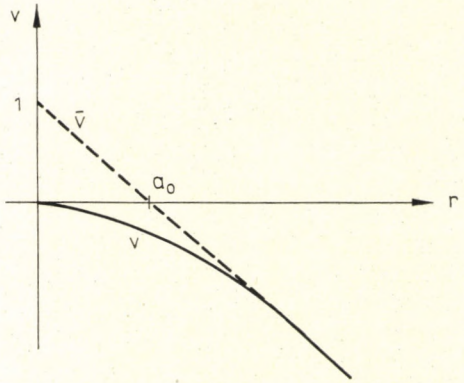
$$k \operatorname{cotg} \delta = -\frac{1}{a_0} + \frac{1}{2} r_0 k^2 , \tag{25.9.12}$$

ahol

$$r_0 = 2 \int_0^\infty [\bar{v}^2(r) - v^2(r)]\, dr . \tag{25.9.13}$$



91/a ábra. A zérus energiájú hullámfüggvény és aszimptótája vonzó potenciál esetén

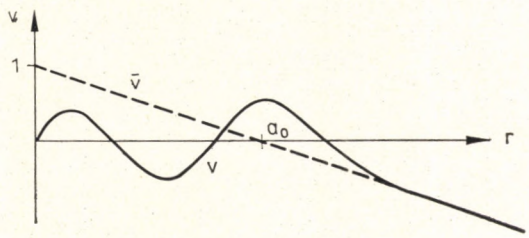


91/b ábra. A zérus energiájú hullámfüggvény és aszimptótája taszító potenciál esetén

Az integráció felső határánál R helyett $+\infty$-t írhattunk, hiszen R-et olyan nagyra kellett választani, hogy $r \geq R$ esetén a v és $\bar{v}$ függvények egymással megegyeznek, tehát (9.13) integrandusa $r \geq R$ esetén zérus.

A (9.12) alatti eredmény szerint az s-szórás fázisállandója kis energiájú szórás esetén nagyon egyszerű függvénye a bombázó energiának: k cotg δ lineárisan függ k^2-től. Az a_0 állandó neve: *szórási hossz*, r_0-t pedig az *effektív hatótávolság*nak nevezik.

A 91/a ábra vonzó, a 91/b. ábra pedig taszító jellegű potenciálnak megfelelő $v(r)$ függvényt szemléltet. Az ábrákon a $\bar{v}(r)$ hullámfüggvény aszimptotáját, a $v(r)$-nek megfelelő egyenest is feltüntettük. A $\bar{v}$ aszimptotának az r-tengellyel való metszéspontja adja az a_0 szórási hosszt. Ez taszító jellegű potenciál esetén mindig pozitív, vonzó jellegű potenciál esetén a_0 előjelét a potenciálvölgyben kialakuló kötött állapotok száma szabja meg: páros (és zérus) számú kötött állapot esetén a_0 negatív, páratlan számú kötött állapot esetén a_0 pozitív. Az 91/a ábrán a $v(r)$ hullámfüggvény menetét olyan vonzó potenciál esetén láthatjuk, melyben nincs kötött állapot, a 92. ábra pedig a három darab kötött s-állapotnak megfelelő viszonyokat mutatja be.



92. ábra. A zérus energiájú hullámfüggvény és aszimptótája három kötött állapot esetén

Kis energiájú szórás hatáskeresztmetszetét a δ fázisállandót megadó (9.12) képlet alapján könnyen felírhatjuk. (2.16)-ból csak az $l = 0$-nak megfelelő tagot vesszük figyelembe és felhasználjuk a $\sin^2\delta = (1 + \text{cotg}^2\delta)^{-1}$ azonosságot.

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta = \frac{4\pi}{k^2 + \left(\frac{1}{a_0} - \frac{1}{2}r_0k^2\right)^2}. \qquad (25.9.14)$$

Zérus bombázó energia, tehát $k = 0$ esetén, a hatáskeresztmetszet értéke:

$$\sigma = 4\pi a_0^2. \qquad (25.9.15)$$

A 93. ábra a hatáskeresztmetszet energiafüggését szemlélteti $r_0 = 2a_0$ esetén. Láthatjuk, hogy a hatáskeresztmetszetnek rezonancia-maximuma van. A (9.14) képlet szerint a rezonancia létezésének feltétele, hogy $r_0 > a$ legyen, ez esetben

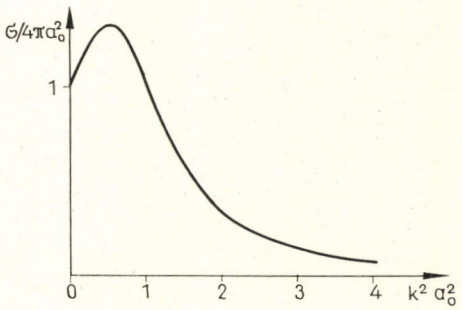
σ-nak maximuma van a

$$k^2 = \frac{2}{r_0^2}\left(\frac{r_0}{a_0} - 1\right)$$

helyen.

A kis energiájú szórásnak a fentiekben bemutatott elmélete alkalmazható olyan kötött állapotok vizsgálatára is, melyek E energiasajátértéke abszolút értékben igen kicsiny. Kötött állapotok esetén a radiális *Schrödinger*-egyenlet (9.4) első egyenlete helyett a következőképpen írható fel:

$$\frac{d^2u_b}{dr^2}[-\kappa^2 - U(r)]u_b(r) = 0\,, \tag{25.9.16}$$



93. ábra. A kis energiájú szórás hatáskeresztmetszete k^2 függvényében $r_0 = 2\,a_0$ esetén

ahol

$$\kappa^2 = -\frac{8\pi^2 m_0}{h^2}E\,. \tag{25.9.17}$$

A kötött állapot $u_b(r)$ hullámfüggvénye szintén kielégíti a (9.5) $u_b(0) = 0$ feltételt és igen nagy r értékekre az aszimptotikus viselkedését

$$u_b(r) \sim e^{-\kappa r}$$

írja le. Ha a (9.11) képlet levezetését úgy ismételjük meg, hogy a szórási állapot $u(r)$ hullámfüggvénye helyett a kötött állapot $u_b(r)$ hullámfüggvényét vesszük, úgy a következő eredményt kapjuk:

$$\kappa = \frac{1}{a_0} + \kappa^2 \int_0^\infty [\bar{u}_b(r)\,\bar{v}(r) - u_b(r)v(r)]\,dr\,, \tag{25.9.18}$$

ahol $\bar{u}_b(r) = e^{-\kappa r}$. Ez a képlet még egzakt, tetszés szerinti kötött állapotra igaz. Ha a kötési energia abszolút értékben igen kicsiny, úgy az integrálban az $u_b(r)$ hullámfüggvényt a zérus energiához tartozó $v(r)$-rel helyettesítjük, és hasonló ok

miatt $\bar{u}_b$ helyébe $\bar{v}$-t írhatunk. Így kapjuk, hogy:

$$\kappa = \frac{1}{a_0} + \frac{1}{2} r_0 \kappa^2, \tag{25.9.19}$$

ahol r_0 ismét a (9.13) alatt bevezetett effektív hatótávolságot jelöli. (9.19) másodfokú egyenlet a κ ismeretlenre, melynek megoldásával a kötött állapot E energiasajátértékét kiszámíthatjuk.

Tekintsünk egy számpéldát. Az egymással párhuzamos spinű neutronok és protonok kisenergiájú ütközésének megfigyelt hatáskeresztmetszete akkor áll a lehető legjobb összhangban a (9.14) formulával, ha a szórási hosszra és az effektív hatótávra a következő értékeket vesszük fel:

$$a_0 = 5{,}399 \cdot 10^{-13}\,\text{cm} \quad \text{és} \quad r_0 = 1{,}732 \cdot 10^{-13}\,\text{cm}.$$

Ezen adatokat a (9.19) egyenletbe téve, kapjuk, hogy

$$\kappa = 0{,}2317 \cdot 10^{13}\,\text{cm}^{-1}.$$

Ez teljesen megegyezik a deuteron magjának kísérletileg megállapított $E = -2{,}226$ MeV energiájából számított $\kappa = 0{,}23169 \cdot 10^{13}\,\text{cm}^{-1}$ értékkel. Az a tény, hogy a (9.19) formula a deuteron kötési energiáját ilyen pontosan magadja, arra utal, hogy a fentiekben feltételezett viszonyok a deuteron magjánál valóban fennállnak, vagyis hogy a deuteron 2,226 MeV kötési energiája igen kicsi a neutron-proton kölcsönhatás erősségéhez képest.

10. §. Példák a zérus energiájú hullámfüggvény meghatározására

Az előző §-ban a kis energiájú szórás hatáskeresztmetszetére a (9.14) kifejezést kaptuk. Ez két, a szórócentrum potenciáljára jellemző paramétert tartalmaz: az a_0 szórási hosszt és az r_0 effektív hatótávolságot. Láttuk, hogy e paraméterek kiszámításához (9.4) második egyenletét, a zérus energiájú radiális *Schrödinger*-egyenletet kell csak megoldani, a $v(r)$ hullámfüggvény birtokában aztán a_0 és r_0 egyszerűen meghatározható. A jelen §-ban néhány egyszerű szórócentrumra fogjuk a fentieket alkalmazni.

Merev falú gömb. Az a sugarú merev falú gömb esetében a zérus energiájú *Schrödinger*-egyenlet:

$$\frac{d^2v}{dr^2} = 0, \qquad \text{ha} \quad r > a \tag{25.10.1}$$

és

$$v(r) \equiv 0, \qquad \text{ha} \quad r \leq a. \tag{25.10.2}$$

A folytonossági követelménynek eleget tevő és a (9.7) normálást kielégítő $v(r)$

hullámfüggvény a következő lesz:

$$v(r) \equiv 0, \qquad \text{ha} \qquad r \leq a,$$
$$v(r) = 1 - \frac{r}{a}, \qquad \text{ha} \qquad r \geq a. \tag{25.10.3}$$

Az $r \geq a$ tartományban, tehát a gömbön kívül, a hullámfüggvény egybeesik a $\bar{v}(r)$ aszimptotával. Definíció szerint az a_0 szórási hossz az a távolság, ahol a $\bar{v}(r)$ aszimptota metszi az r tengelyt. (91/a és 91/b ábra.) Esetünkben ez a taszító gömb sugaránál következik be, tehát

$$a_0 = a. \tag{25.10.4}$$

Az effektív hatótávolság pedig (9.13) szerint

$$r_0 = 2\int_0^a \left(1 - \frac{r}{a}\right)^2 dr = \frac{2}{3}a, \tag{25.10.5}$$

a taszító gömb sugarának kétharmada.

Behelyettesítve a (9.12) és (9.14) képletekbe, az s-hullám fázisállandójára és a szórás hatáskeresztmetszetére a következő kifejezéseket kapjuk:

$$k \operatorname{cotg} \delta = -\frac{1}{a} + \frac{1}{3}ak^2, \tag{25.10.6}$$

$$\sigma = \frac{4\pi a^2}{1 - \frac{2}{3}(ka)^2 + \frac{10}{9}(ka)^4}. \tag{25.10.7}$$

Vessük össze ezeket a képleteket a 7. § eredményeivel. Az s-hullám fázisállandójára az egzakt (7.8) formula a

$$\delta = -ka$$

értéket szolgáltatja, amiből $k \operatorname{cotg} \delta = -k \operatorname{cotg}(ka)$. Ha $\operatorname{cotg}(ka)$-t a $ka \ll 1$ esetre érvényes

$$\operatorname{cotg}(ka) = \frac{1}{ka}\left(1 - \frac{1}{3}ka + \ldots\right)$$

sorfejtés első két tagjával helyettesítjük, úgy megkapjuk (10.6)-ot. Hasonló módon, $ka \ll 1$ esetben (7.9)-ből (10.7)-et vezethetjük le. A 7. §-ban láttuk, hogy $k \to 0$ esetén a hatáskeresztmetszet értéke $\sigma = 4\pi a^2$; ugyanezt kapjuk (10.7)-ből is.

Háromdimenziós potenciálvölgy. A (23.11.1) potenciálvölgy esetében a zérus energiájú hullámfüggvény a

$$\frac{d^2v}{dr^2} + g^2v(r) = 0, \qquad \text{ha} \qquad r < a,$$
$$\frac{d^2v}{dr^2} = 0, \qquad \text{ha} \qquad r > a \tag{25.10.8}$$

Schrödinger-egyenletnek tesz eleget, ahol

$$g = \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{h^2} V_0}\,. \tag{25.10.9}$$

A (9.5) és (9.7) feltételeknek eleget tévő megoldás:

$$\begin{aligned} v(r) &= C \sin(gr), \quad \text{ha} \quad r \leq a, \\ v(r) &= 1 - \frac{r}{a_0}, \quad \text{ha} \quad r \geq a. \end{aligned} \tag{25.10.10}$$

A C és a_0 állandókat úgy kell megválasztani, hogy $v(r)$ és deriváltja az $r = a$ helyen folytonos legyen. Ebből:

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{\sin(ga) - ga\cos(ga)}\,, \\ a_0 &= a\left(1 - \frac{\operatorname{tg}(ga)}{ga}\right). \end{aligned} \tag{25.10.11}$$

A $v(r)$ hullámfüggvény a potenciálgödrön kívül már azonos a $\bar{v}(r)$ aszimptotával. A szórási hosszt, az aszimptota zérushelyét (10.11) adja meg. A szórás hatáskeresztmetszete zérus bombázó energia határesetében (9.15) szerint

$$\sigma = 4\pi a^2 \left(1 - \frac{\operatorname{tg}(ga)}{ga}\right)^2. \tag{25.10.12}$$

Természetesen ugyanezt a hatáskeresztmetszet képletet megkaphatjuk a 3. § egzakt eredményeiből, ha azokat a $k \to 0$ határesetre alkalmazzuk. (3.13) szerint az s-hullám fázisállandóját

$$\operatorname{tg}\delta_0 = -\frac{\alpha\cos(\alpha a)\sin(ka) - k\sin(\alpha a)\cos(ka)}{\alpha\cos(\alpha a)\cos(ka) - k\sin(\alpha a)\sin(ka)}$$

adja meg, ami $ka \ll 1$ esetén közelítőleg így írható

$$\operatorname{tg}\delta_0 = -ka\left(1 - \frac{\operatorname{tg}(\alpha a)}{\alpha a}\right).$$

Ha a bombázó energia zérushoz tart, úgy a (3.2)-vel definiált α mennyiség átmegy a (10.9) alatti g-be, tehát

$$\operatorname{tg}\delta_0 = -ka\left(1 - \frac{\operatorname{tg}(ga)}{ga}\right).$$

A szórás hatáskeresztmetszetére ebből pontosan a (10.12) képletet vezethetjük le.

A huszonharmadik fejezet 11. §-ában tárgyaltuk a háromdimenziós potenciálvölgyben kötött részecske energiasajátállapotait. A sajátértékeket megadó (23.11.3)

egyenletből láthatjuk, hogy annak szükséges és elegendő feltétele, hogy az $E = 0$ érték az energia sajátértéke legyen:

$$ga = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi ,$$

ahol n egy egész szám. Ugyanakkor (10.12)-ből a zérus energiájú szóródás hatáskeresztmetszetére a' $\sigma = +\infty$ érték adódik. Ez a szórási rezonanciának egy különleges esete, amikor a rezonanciaállapotokat meghatározó (4.12) egyenlet gyöke a valós tengelyre esik, mert ekkor (4.30)-ban $\kappa = 0$ lesz és $k = k_0$-nál a hatáskeresztmetszet végtelenné válik. Ez a jelenség minden olyan esetben fellép, amikor az ütközés energiája a bombázó részecskéből és a szórócentrumból álló rendszer valamelyik energiasajátértékével egyezik meg.

Exponenciális potenciál. Legyen a szórócentrum potenciálja a következő alakú

$$V(r) = V_0 e^{-\frac{r}{a}} . \tag{25.10.13}$$

Ekkor a zérus energiájú hullámfüggvényre vonatkozó *Schrödinger*-egyenlet (9.4) alapján

$$\frac{d^2v}{dr^2} - \frac{8\pi^2 m_0 V_0}{h^2} e^{-\frac{r}{a}} v(r) = 0 \tag{25.10.14}$$

lesz. Ez az egyenlet egyszerűbb alakot ölt, ha bevezetjük r helyébe az

$$x = e^{-\frac{r}{2a}}$$

új változót, továbbá a

$$g = \sqrt{\frac{32\pi^2 m_0}{h^2} V_0}$$

rövidítő jelölést. Ezekkel (10.14) a következőképpen alakul

$$\frac{d^2v}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{dv}{dx} + g^2 a^2 v = 0 . \tag{25.10.15}$$

Ez éppen a zérus indexű *Bessel*-függvények differenciálegyenlete, melynek két lineárisan független megoldása

$$J_0(gax) \quad \text{és} \quad N_0(gax)$$

lesz. Ezért (10.14) általános megoldása

$$v(r) = A_1 J_0\left(gae^{-\frac{r}{2a}}\right) + A_2 N_0\left(gae^{-\frac{r}{2a}}\right) . \tag{25.10.16}$$

Itt J_0 és N_0, szokás szerint, az első, ill. másodfajú *Bessel*-függvényt jelöli. Az A_1 és A_2 integrációs változókat a határfeltételekből állapíthatjuk meg. (9.5)-ből:

$$A_1 J_0(ga) + A_2 N_0(ga) = 0. \tag{25.10.17}$$

A (9.7) feltétel alkalmazásához a $v(r)$ függvény aszimptotáját kell megállapítanunk az $r \to \infty$ határesetben. Ha r igen nagy, úgy a *Bessel*-függvények argumentumában szereplő $gae^{-r/2a}$ mennyiség igen kicsi lesz. Igen kis argumentumokra a *Bessel*-függvények a

$$J_0(z) \approx 1 \quad \text{és} \quad N_0(z) \approx \frac{2}{\pi} \ln\left(\frac{\gamma z}{2}\right) \tag{25.10.18}$$

kifejezésekkel közelíthetők, ahol γ az *Euler–Mascheroni* szám: $\gamma = 1{,}781072$. A $v(r)$ hullámfüggvény aszimptotája tehát:

$$v(r) = A_1 + \frac{2A_2}{\pi}\left[\ln\left(\frac{\gamma ga}{2}\right) - \frac{r}{2a}\right]. \tag{25.10.19}$$

A (9.7) feltétel szerint $\bar{v}$ értéke az $r = 0$ helyen $+1$-gyel egyenlő, ebből:

$$A_1 + \frac{2A_2}{\pi} \ln\left(\frac{\gamma ga}{2}\right) = 1\,. \tag{25.10.20}$$

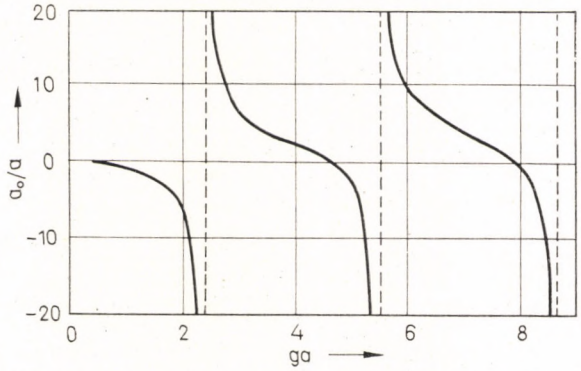
A (10.17) és (10.20) egyenletek egyenletrendszert képeznek, melyből az A_1 és A_2 ismeretlenek egyértelműen meghatározhatók

$$A_1 = \frac{N_0(ga)}{N_0(ga) - \frac{2}{\pi} J_0(ga) \ln\left(\frac{\gamma ga}{2}\right)},$$

$$A_2 = -\frac{J_0(ga)}{N_0(ga) - \frac{2}{\pi} J_0(ga) \ln\left(\frac{\gamma ga}{2}\right)}. \tag{25.10.21}$$

A szórási hossz megállapításához a $\bar{v}(r)$ aszimptota zérus helyét kell megkeresnünk. (10.19) alapján kapjuk, hogy

$$a_0 = 2a\left[\ln\left(\frac{\gamma ga}{2}\right) + \frac{\pi A_1}{2A_2}\right].$$



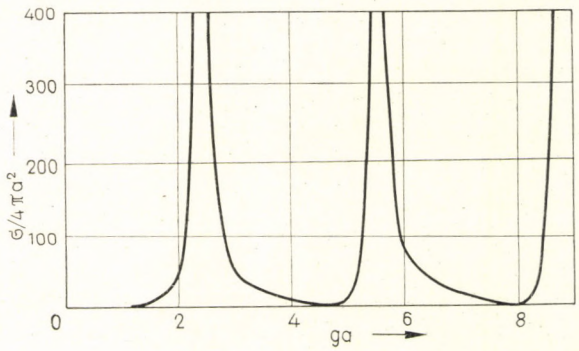
94. ábra. Szórási hossz az exponenciális potenciálvölgyben ga függvényeként

A_1 és A_2 kifejezéseit behelyettesítve, a szórási hosszra az

$$a_0 = 2a\left[\ln\left(\frac{\gamma ga}{2}\right) - \frac{\pi}{2}\frac{N_0(ga)}{J_0(ga)}\right] \tag{25.10.22}$$

kifejezés adódik. Ezt a szórási hosszt, mint a ga paraméter függvényét mutatja az 94. ábránk, a zérus energiához tartozó

$$\sigma = 4\pi a_0^2$$



95. ábra. Az exponenciális potenciálvölgy hatáskeresztmetszete zérus energia ga függvényében

hatáskeresztmetszetet pedig a 95. ábrán tüntettük fel. A hatáskeresztmetszeten ismét megfigyelhetünk $\sigma = +\infty$ értéknek megfelelő rezonanciákat; ezek olyan ga értéknél lépnek fel, amikor $J_0(ga) = 0$. Kimutatható, hogy a ga paraméter éppen ezen értékeinél van az exponenciális potenciálvölgynek egy $E = 0$ energia-sajátértékű kötött állapota.

11. §. A Born-közelítés

A *Born*-közelítés a szórásszámítás legegyszerűbb közelítő módszere, melyet nagyenergiájú részecskék szóródásánál alkalmazunk. Érvényességi feltétele ugyanis az, hogy az E bombázó energia legyen sokkal nagyobb, mint a szórócentrum V potenciálja.

Induljunk ki a szórásszámítás integrálegyenlet-módszeréből. Ekkor az első lépés a (6.13) integrálegyenlet megoldása, amelyben most q helyébe a valós k hullámszámot tesszük

$$u_l(r) = \frac{1}{k}\left[\frac{(2l+1)!!}{k^l} j_l(kr) + \int_0^r \{n_l(kr)\, i_l(kr') - j_l(kr) n_l(kr')\} U(r') u_l(r') dr'\right]. \tag{25.11.1}$$

Ha a szórócentrum U potenciálja kicsiny, úgy kézenfekvő ezt az egyenletet iterációs eljárással megoldani. Nulladik közelítésben a szórócentrumot teljesen figyelmen kívül hagyjuk, tehát U-t zérusnak vesszük:

$$u_l^{(0)}(r) = \frac{(2l+1)!!}{k^{l+1}} j_l(kr). \tag{25.11.2}$$

Az iterációs eljárás következő lépése abban áll, hogy (11.1) jobb oldalán, az U-t tartalmazó második tagban, u_l-t a nulladik közelítéses kifejezéssel pótoljuk. Az első közelítés tehát

$$u_l^{(1)}(r) = \frac{(2l+1)!!}{k^{l+1}} \left[j_l(kr) + \frac{1}{k} \int_0^r \{ n_l(kr) j_l(kr') - j_l(kr) n_l(kr') \} U(r') j_l(kr') dr' \right]. \tag{25.11.3}$$

A második közelítést ezután úgy kapjuk, hogy ezt az első közelítést írjuk be (11.1) jobb oldalába. Az eljárás ily módon folytatható, és tetszés szerinti pontosságig fokozható. u_l kiszámítása után a fázisállandót (6.18) adja meg.

Mi a továbbiakban csak a *Born*-féle első közelítéssel foglalkozunk, amikor is a (6.18) kifejezés nevezőjében az U-t tartalmazó második tagot elhanyagoljuk, a számlálóban pedig u_l-t a nulladik közelítéses (11.2) kifejezéssel helyettesítjük:

$$\delta_l = - \operatorname{arctg} \frac{1}{k} \int_0^\infty U(r) j_l^2(kr) dr. \tag{25.11.4}$$

(1.3) és (3.3) behelyettesítésével a fázisállandó végleges kifejezése:

$$\delta_l = - \operatorname{arctg} \frac{4\pi^3 m_0}{h^2} \int_0^\infty V(r) J_{l+\frac{1}{2}}^2(kr) r dr. \tag{25.11.5}$$

Born-közelítésben a fázisállandók kiszámítása tehát rendkívül egyszerű: a szórócentrum $V(r)$ potenciáljából egyetlen integrálással megkapható. Számítsuk most ki a (2.14) szórásamplitúdót, melyet az

$$e^{2i\delta_l} = \frac{(1 + i \operatorname{tg} \delta_l)^2}{1 + \operatorname{tg}^2 \delta_l} = 1 + 2i \frac{\operatorname{tg} \delta_l + i \operatorname{tg}^2 \delta_l}{1 + \operatorname{tg}^2 \delta_l}$$

azonosság felhasználásával a következőképpen írunk fel:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{\operatorname{tg} \delta_l + i \operatorname{tg}^2 \delta_l}{1 + \operatorname{tg}^2 \delta_l} P_l(\cos \vartheta). \tag{25.11.6}$$

Ide kell most beírnunk a (11.5) *Born*-formulát. Vegyük azonban tekintetbe, hogy a *Born*-közelítés csak akkor érvényes, ha a V potenciál és emiatt a δ_l fázisállandók

is kicsinyek. Ekkor $\mathrm{tg}^2\,\delta_l$ már elhanyagolható, és az eredmény

$$f(\vartheta) = -\frac{4\pi^3 m_0}{h^2 k}\int_0^\infty V(r)\left[\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)J^2_{l+\frac{1}{2}}(kr)P_l(\cos\vartheta)\right]rdr. \qquad (25.11.7)$$

A szögletes zárójelben álló összeg független attól, hogy milyen szórócentrumról van szó. Az összeg értéke a *Bessel*-függvények elmélete szerint

$$\frac{\sin\left(2kr\sin\frac{\vartheta}{2}\right)}{\pi\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)}.$$

A szórásamplitúdó kifejezése *Born*-közelítésben tehát

$$f(\vartheta) = -\frac{4\pi^2 m_0}{h^2 k\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)}\int_0^\infty V(r)\sin\left(2kr\sin\frac{\vartheta}{2}\right)rdr. \qquad (25.11.8)$$

E képlet érdekes sajátsága, hogy a V potenciálnak lineáris kifejezése. Ha tehát a szórócentrum potenciálja két részből tevődik össze: $V = V_1 + V_2$, úgy a szórásamplitúdó a V_1 és V_2 potenciáloknak megfelelő f_1 és f_2 amplitúdók összege lesz: $f = f_1 + f_2$. Ugyancsak a linearitás következménye, hogy ha V-t n-szeresére növeljük, úgy az f amplitúdó is n-szer nagyobb lesz. Ha V-nek megváltoztatjuk az előjelét, akkor f is előjelet vált. Mivel a szórás differenciális hatáskeresztmetszete az amplitúdó négyzetével egyenlő: $\sigma(\vartheta) = |f(\vartheta)|^2$, ezért f előjelének megváltoztatása nem befolyásolja a hatáskeresztmetszetet. A *Born*-közelítés szerint egy potenciálhegyen ugyanúgy szóródnak a részecskék, mint a tükörképének megfelelő potenciálvölgyön.

Egyszerű alkalmazásként vizsgáljuk az exponenciális potenciálvölgyön való szóródást:

$$V(r) = -V_0 e^{-\frac{r}{a}}. \qquad (25.11.9)$$

Ezt a (11.8) képletbe helyettesítve egy könnyen kiszámítható integrált kapunk. Bevezetve a

$$K = 2ka\sin\frac{\vartheta}{2} \qquad (25.11.10)$$

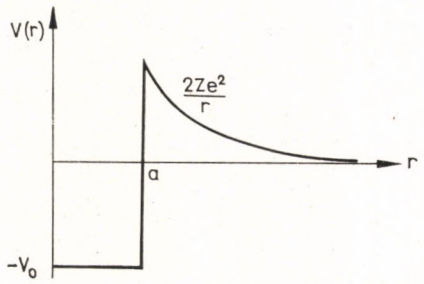
jelölést, a végeredmény a következő:

$$f(\vartheta) = \frac{8\pi^2 m_0 V_0 a}{h^2 K}\int_0^\infty e^{-\frac{r}{a}}\sin\left(\frac{Kr}{a}\right)rdr = \frac{16\pi^2 m_0 V_0 a^3}{h^2(1+K^2)^2}. \qquad (25.11.11)$$

Ennek négyzetét képezve, megkapjuk a szórás differenciális hatáskeresztmetszetét:

$$\sigma(\vartheta) = \left(\frac{16\pi^2 m_0 V_0 a^3}{h^2}\right)^2 \frac{1}{\left(1 + 4k^2a^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right)^4}. \qquad (25.11.12)$$

Legnagyobb hatáskeresztmetszetet, tehát legerősebb szórt intenzitást, a $\vartheta = 0$ esetben, vagyis az előreszórt nyalábban kapunk. Növekvő ϑ-val a differenciális hatáskeresztmetszet csökken. Ez a csökkenés annál rohamosabb, minél nagyobb k^2a^2, azaz minél nagyobb az E bombázó energia. Egészen nagy energiáknál csak kis szögű eltérüléseket kapunk.



96. ábra. α-részek potenciális energiája egy atommag környezetében

Második példaként foglalkozzunk az α-részek atommagokon való szóródásával. A tizenkilencedik fejezet 11. §-ban már említettük, hogy az a magsugárnál nagyobb távolságok esetén a potenciál a *Coulomb*-erőnek megfelelő $2Ze^2/r$ kifejezés lesz. A magon belül, tehát $r < a$ esetén a potenciált közelítőleg gömb alakú potenciálvölgynek tekinthetjük (96. ábra).

Tekintsük először a potenciálvölgyön való szóródást. Az ennek megfelelő szórásamplitúdót (11.8)-ból a

$$V_1(r) = -V_0, \quad \text{ha} \quad r < a,$$
$$V_1(r) = 0, \quad \text{ha} \quad r > a \qquad (25.11.13)$$

potenciálképlet behelyettesítésével kapjuk meg. A $K = 2ka \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)$ rövidítő jelölés alkalmazásával a számítás egyszerűen végezhető el.

$$f_1(\vartheta) = \frac{8\pi^2 m_0 V_0 a}{h^2 K} \int_0^a \sin\left(\frac{Kr}{a}\right) r dr = \frac{8\pi^2 m_0 V_0 a^3}{h^2 K^3} (\sin K - K \cos K). \qquad (25.11.14)$$

A potenciál másik részét a magsugáron kívül uralkodó *Coulomb*-tér képezi:

$$V_2(r) = 0, \quad \text{ha} \quad r < a$$
$$V_2(r) = \frac{2Ze^2}{r}, \quad \text{ha} \quad r > a. \qquad (25.11.15)$$

Ennek (11.8)-ba való helyettesítése a következő integrálra vezet:

$$f_2(\vartheta) = -\frac{16\pi^2 Ze^2 m_0 a}{h^2 K} \int_a^\infty \sin\left(\frac{Kr}{a}\right) dr. \qquad (25.11.16)$$

Az itt fellépő integrál értéke határozatlan. Határozottá tehetjük, ha a *Coulomb*-potenciál mellé egy $e^{-\kappa r}$ árnyékolási tényezőt vezetünk be. (Ilyen árnyékolást valóban létrehoz a mag körül elhelyezkedő elektronfelhő). A *Born*-formula az árnyékolt *Coulomb*-potenciál esetén:

$$f_2(\vartheta) = -\frac{16\pi^2 Ze^2 m_0 a}{h^2 K} \int_a^\infty e^{-\kappa r} \sin\left(\frac{Kr}{a}\right) dr$$

$$= -\frac{16\pi^2 Ze^2 m_0 a^2}{h^2 K} \frac{(\kappa a \sin K + K \cos K) e^{-\kappa a}}{\kappa^2 a^2 + K^2}.$$

Vizsgáljuk most az igen gyenge árnyékolást, tehát a $\kappa \to 0$ határesetet. Ekkor a szórásamplitúdó

$$f_2(\vartheta) = -\frac{16\pi^2 Ze^2 m_0 a^2}{h^2 K^2} \cos K. \qquad (25.11.17)$$

A 96. ábrán szemléltetett potenciál a (11.13) és (11.15) kifejezések összege. Az α-részecskék szóródásának amplitúdóját ennek megfelelően (11.14) és (11.17) összeadásával kapjuk meg:

$$f(\vartheta) = -\frac{16\pi^2 Ze^2 m_0 a^2}{h^2 K^2} \left[\cos K + \frac{V_0 a}{2Ze^2}\left(\cos K - \frac{\sin K}{K}\right)\right]. \qquad (25.11.18)$$

A differenciális hatáskeresztmetszet:

$$\sigma(\vartheta) = \frac{Z^2 e^4}{m_0^2 v_0^4 \sin^4\left(\frac{\vartheta}{2}\right)} \left[\cos K + \frac{V_0 a}{2Ze^2}\left(\cos K - \frac{\sin K}{K}\right)\right]^2, \qquad (25.11.19)$$

melyben $v_0 = \dfrac{hk}{2\pi m_0}$ az α-részecske kezdeti sebessége. A szögletes zárójel előtt álló kifejezés pontosan megegyezik (8.14)-gyel, a pontszerű magon való *Coulomb*-szórás hatáskeresztmetszetével. A *Rutherford*-formulát kiegészítő

$$\left[\cos K + \frac{V_0 a}{2Ze^2}\left(\cos K - \frac{\sin K}{K}\right)\right]^2 \qquad (25.11.20)$$

tényező a mag véges kiterjedéséből származó effektusokat veszi figyelembe. (11.19) tehát számot ad a *Rutherford*-formulától való eltérésről, az α-részek szórási anomáliájáról. Igen kis magrádiusz esetén, vagyis az $a \to 0$ határesetben (11.20) értéke + 1, tehát az anomália eltűnik. Az ellenkező végletet az igen nagy bombázó

energia, tehát az igen rövid hullámhosszú α-sugárnyaláb jelenti. Ekkor $K \ll 1$ és a (11.20) anomália értéke

$$\left(1+\frac{V_0 a}{2Ze^2}\right)^2 \cos^2 K \sim \frac{1}{2}\left(1+\frac{V_0 a}{2Ze^2}\right)^2 ,$$

ha $\cos^2 K$-t a középértékével, $\frac{1}{2}$-el helyettesítjük.

12. §. Elektronok szóródása atomokon

Nagyenergiájú (többszáz eV-os) elektronok atomokon való szóródását a *Born*-féle első közelítésben tárgyalhatjuk. Az atom által létesített elektromos erőtér két részre bontható: az egyik rész az atom magjától származik, a másik az elektronfelhőtől. Az eredő elektromos potenciál a magtól számított r helyzetű pontban:

$$\frac{Ze}{r} - e\int \frac{\rho(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}dv' .$$

Itt Z a rendszámot, $\rho(r')$ pedig az elektronfelhő sűrűségét, tehát az egységnyi térfogatelemben levő elektronok számát jelöli. A bombázó elektron potenciális energiája ebben az erőtérben:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + e^2\int \frac{\rho(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}dv' . \qquad (25.12.1)$$

Mivel az elektronfelhő $\rho(r')$ sűrűségeloszlása gömbszimmetrikus, ezért az itt szereplő integrálra alkalmazhatjuk a (24.8.24) potenciálelméleti tételt:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{e^2}{r}\int_0^r \rho(r')4\pi r'^2 dr' + e^2\int_r^\infty \rho(r')4\pi r' dr' . \qquad (25.12.2)$$

Helyettesítsük ezt be a szórásamplitúdó (11.8) képletébe. A $q = 2k\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)$ jelölés bevezetése után kapjuk:

$$f(\vartheta) = \frac{8\pi^2 m_0 e^2}{h^2 q}\left[Z\int_0^\infty dr\,\sin(qr) - 4\pi\int_0^\infty dr\int_0^r dr' r'^2\rho(r')\sin(qr) - \right.$$

$$\left. - 4\pi\int_0^\infty dr\int_r^\infty dr' r r'\rho(r')\sin(qr)\right].$$

A második és harmadik tag kettős integráljaiban fordítsuk meg az integrációk sorrendjét:

$$f(\vartheta)=\frac{8\pi^2 m_0 e^2}{h^2 q}\left[Z\int_0^\infty dr\sin(qr)-4\pi\int_0^\infty dr\int_{r'}^\infty dr' r'^2\rho(r')\sin(qr)-\right.$$

$$\left.-4\pi\int_0^\infty dr'\int_0^{r'} dr\, rr'\rho(r')\sin(qr)\right]. \qquad (25.12.3)$$

Most az r változó szerinti integrálás a $\rho(r')$ sűrűségeloszlás konkrét ismerete nélkül is elvégezhető. Az utolsó tag r szerinti integrálja:

$$\int_0^{r'} drr\sin(qr)=\frac{r'}{q}\left(\frac{\sin(qr')}{qr'}-\cos(qr)\right). \qquad (25.12.4)$$

A középső tagban szereplő, határozatlan értékű integrállal az előző szakaszban már találkoztunk. Az $e^{-\kappa r}$ árnyékolási tényező bevezetése és a $\kappa\to 0$ határátmenet elvégzése a következő eredményre vezet:

$$\int_{r'}^\infty dr\sin(qr)=\lim_{\kappa\to 0}\int_{r'}^\infty dre^{-\kappa r}\sin(qr)=\lim_{\kappa\to 0}\frac{[\kappa\sin(qr')+q\cos(qr')]e^{-\kappa r'}}{\kappa^2+q^2}$$

$$=\frac{\cos(qr')}{q}. \qquad (25.12.5)$$

(12.3) első, egyszeres integrálját ebből az $r'=0$ helyettesítéssel kapjuk:

$$\int_0^\infty dr\sin(qr)=\frac{1}{q}. \qquad (25.12.6)$$

Ezeket az eredményeket a szórásamplitúdó képletébe helyettesítjük és a megmaradt r' szerinti integrálokban az integrációs változót most más nyugodtan r-rel jelölhetjük:

$$f(\vartheta)=\frac{8\pi^2 m_0 e^2}{h^2 q^2}\left[Z-4\pi\int_0^\infty\rho(r)\frac{\sin qr}{qr}r^2 dr\right]. \qquad (25.12.7)$$

Ezt a képletet a következőképpen is felírhatjuk:

$$f(\vartheta)=\frac{e^2}{2m_0 v_0^2\sin^2(\vartheta/2)}[Z-F(\vartheta)], \qquad (25.12.8)$$

ahol $v_0 = \dfrac{hk}{2\pi m_0}$ a bombázó elektron sebessége és

$$F(\vartheta) = \frac{h}{m_0 v_0 \sin(\vartheta/2)} \int_0^\infty \rho(r) \sin\left(\frac{4\pi m_0 v_0 \sin(\vartheta/2)}{h} r\right) r dr . \qquad (25.12.9)$$

Az $F(\vartheta)$ mennyiség neve: az *atom alakfaktora*. A szórás differenciális hatáskeresztmetszete (12.8)-ból:

$$\sigma(\vartheta) = |f(\vartheta)|^2 = \sigma_R(\vartheta)\left[1 - \frac{F(\vartheta)}{Z}\right]^2 , \qquad (25.12.10)$$

ahol

$$\sigma_R(\vartheta) = \frac{Z^2 e^2}{4 m_0^2 v_0^4 \sin^2\left(\dfrac{\vartheta}{2}\right)} \qquad (25.12.11)$$

a (8.14)-nek megfelelő *Rutherford*-hatáskeresztmetszet. Megmérve az elektronszórás $\sigma(\vartheta)$ hatáskeresztmetszetét, lehetővé válik az $F(\vartheta)$ alakfaktor kísérleti meghatározása.

Ezt (12.9)-cel összevetve, következtetéseket vonhatunk le az atom elektronfelhőjének $\rho(r)$ eloszlására vonatkozólag. Az így kapott eredmények jól egyeznek az atom kvantummechanikai sajátfüggvényéből meghatározott elméleti sűrűségeloszlásokkal.

HUSZONHATODIK FEJEZET

RELATIVISZTIKUS KVANTUMMECHANIKA

1. §. $\frac{1}{2}$-es spinű részecskék. A Dirac-egyenlet

A (22.6.13) időtől függő *Schrödinger*-egyenlet nincs összhangban az *Einstein*-féle relativitási elvvel, ami szembeszökően megmutatkozik abban, hogy az x, y, z térkoordináták és a t idő aszimmetrikusan szerepel az egyenletben. A tér- és időkoordináták aszimmetrikus felléptének oka nyilván az, hogy a részecske kinetikus energiáját a nemrelativisztikus mechanika $\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}$ kifejezésével azonosítottuk. Ha a részecske sebessége megközelíti a c fénysebességet, akkor a relativisztikus hatások jelentőssé válnak és (az erőmentes térben mozgó) részecske energiáját a relativitáselmélet (6.10.14) kifejezésével kell azonosítanunk:

$$H = \sqrt{(m_0c^2)^2 + c^2\mathbf{p}^2}. \tag{26.1.1}$$

Ez az energiakifejezés nem vihető át a szokásos módon a kvantummechanikába. A kvantumelméletben ugyanis az impulzuskomponensek helyébe a (22.6.5) differenciáloperátorokat kell helyettesítenünk és ekkor (1.1) a differenciáloperátorok négyzetgyökét tartalmazza, ami nincs értelmezve.

Az (1.1) energiakifejezésből kiindulva többféle módon is szerkeszthetünk *Lorentz*-invariáns hullámegyenletet. Ezeknek az egyenleteknek általános tulajdonságuk, hogy automatikusan számot adnak a részecske spinjéről, a különböző spin-értékekhez különböző hullámegyenletek tartoznak. Mi elsősorban az $\frac{1}{2}$-es spinű részecskékkel fogunk foglalkozni, mert ezek közé tartoznak az anyag stabil építőkövei, az elektronok, protonok és neutronok.

Az $\frac{1}{2}$-es spinű részecskék relativisztikus hullámegyenletét DIRAC (1928) állította fel az (1.1) energiakifejezés olymódon való módosításával, hogy az impulzuskomponensek racionális módon lépjenek fel benne. A klasszikus mechanikában az (1.1)-ben szereplő gyökjeles kifejezés csak a pozitív előjellel jöhet szóba, hiszen $p=0$ esetén $H=m_0c^2$ és az energia folytonosan növekvő p-vel csak folytonosan változhat. A kvantummechanikában ezzel szemben az energia ugrásszerű változásai is megengedettek, következésképpen (1.1) mindkét előjellel szóba jöhet. Ez azt jelenti, hogy a $\mathbf{p}$ impulzus az energiát nem határozza meg egyértelműen, $\mathbf{p}$ mellett még meg kell adnunk az energia előjelét is. Ezt az újabb szabadsági fokot – a spinhez hasonlóan – úgy vesszük figyelembe, hogy az állapot leírására egy

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \tag{26.1.2}$$

kétkomponensű hullámfüggvényt használunk, ahol a ϕ és χ komponensek az x, y, z térkoordináták, az s spinkoordináta és a t idő függvényei. A

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ 0 \end{pmatrix}$$

állapotban a nyugalmi energia előjele pozitív, a

$$\Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}$$

állapotban pedig negatív. A nyugalmi energia operátora

$$E_0 = m_0 c^2 \rho_3 \tag{26.1.3}$$

lesz, ahol ρ_3 a következő 2×2 mátrixot jelöli:

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{26.1.4}$$

Vezessük be azt a ρ_1 operátort, amely a részecskét negatív energiájú állapotból pozitív energiájú állapotba (vagy fordítva) viszi át:

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{26.1.5}$$

Ha ρ_1-et alkalmazzuk az (1.2) hullámfüggvényre, akkor a

$$\rho_1 \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix}$$

eredményt kapjuk, tehát a pozitív energiájú ϕ komponens kerül a negatív energiájú χ komponens helyébe és fordítva.

Célszerű lesz még bevezetni a következő operátort is:

$$\rho_2 = i\rho_1\rho_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{26.1.6}$$

A fenti definíciókból következik, hogy ρ_1, ρ_2 és ρ_3 eleget tesznek a következő relációknak:

$$\rho_1^2 = \rho_2^2 = \rho_3^2 = 1 \tag{26.1.7}$$

és

$$\begin{aligned} \rho_1\rho_2 &= -\rho_2\rho_1 = i\rho_3 \\ \rho_2\rho_3 &= -\rho_3\rho_2 = i\rho_1 \\ \rho_3\rho_1 &= -\rho_1\rho_3 = i\rho_2. \end{aligned} \tag{26.1.8}$$

Az erőmentes térben mozgó részecske összenergiája a nyugalmi energiából és a kinetikus energiából épül fel:

$$H = E_0 + T = m_0 c^2 \rho_3 + T.$$

A H operátornak olyannak kell lennie, hogy kielégüljön a relativisztikus (6.10.17) összefüggés, ami (1.1) négyzetével ekvivalens:

$$H^2 = (m_0c^2)^2 + c^2\mathbf{p}^2. \tag{26.1.9}$$

Ez egyszerűen elérhető, ha (1.7)-re és (1.8)-ra való tekintettel T helyébe a következő kifejezést írjuk

$$T = c\rho_1 \mid \mathbf{p} \mid .$$

$p = 0$ esetén $T = 0$ lesz, ami megfelel a kinetikus energiára vonatkozó elemi követelménynek. Az energia,

$$H = m_0c^2\rho_3 + c\rho_1 \mid \mathbf{p} \mid ,$$

egy irracionális kifejezést mégis tartalmaz, mert

$$\mid \mathbf{p} \mid = \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}.$$

DIRAC nyomán ezt úgy kerüljük el, hogy $\mid \mathbf{p} \mid$ helyébe a $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}$ kifejezést írjuk, ahol $\boldsymbol{\sigma}$ a (22.10.10) alatti spin-operátor. A

$$\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} = \sigma_x p_x + \sigma_y p_y + \sigma_z p_z$$

kifejezés racionális kifejezése az impulzuskomponenseknek és a *Pauli*-operátorok elemi tulajdonságai miatt

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

lesz, tehát a teljes energia

$$H = m_0c^2\rho_3 + c\rho_1\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}$$

kifejezése kielégíti az (1.9) követelményt. Bevezetve még az

$$\boldsymbol{\alpha} = \rho_1\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \tag{26.1.10}$$

jelölést, a *Dirac*-féle energiaoperátor végleges alakja a következő lesz:

$$\boldsymbol{H} = m_0c^2\rho_3 + c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}. \tag{26.1.11}$$

Az (1.10) alatti $\boldsymbol{\alpha}$ operátornak szemléletes fizikai jelentés adható. A relativisztikus energia (6.10.13) kifejezése egyszerű átalakítással a következőképpen írható:

$$H = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - \dfrac{u^2}{c^2}}} = \mathbf{up} + m_0c^2\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}. \tag{26.1.12}$$

Ezt összehasonlítva (1.11)-gyel láthatjuk, hogy az $\mathbf{u}$ sebességvektor operátorának a következő kifejezés tekinthető

$$\mathbf{u} = c\boldsymbol{\alpha}, \tag{26.1.13}$$

ρ_3 viszont a *Lorentz*-kontrakció

$$\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}$$

operátora lesz.

Helyettesítsük be végül az (1.11) energiaoperátort az időtől függő *Schrödinger*-egyenlet (22.6.15) általános alakjába

$$\frac{ih}{2\pi}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = m_0 c^2 \rho_3 + c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p})\Psi .$$

Beírva még az impulzuskomponensek (22.6.5) operátorait, megkapjuk a *Dirac*-féle hullámegyenletet.

$$\frac{i}{c}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{2\pi m_0 c}{h}\rho_3 - i(\boldsymbol{\alpha}\,\mathrm{grad})\right]\Psi . \tag{26.1.14}$$

A nemrelativisztikus kvantummechanikában az időtől függő *Schrödinger*-egyenletből levezettük a (22.9.7) kontinuitási egyenletet, amiből meg tudtuk állapítani a sűrűség és az áramsűrűség kifejezéseit. Most vizsgáljuk meg, hogy hogyan módosulnak ezek a kifejezések a relativisztikus kvantummechanikában. Képezzük ehhez az (1.14) *Dirac*-egyenlet konjugált komplexét:

$$-\frac{i}{c}\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{2\pi m_0 c}{h}\Psi^*\rho_3 + i(\mathrm{grad}\,\Psi^*)\,\boldsymbol{\alpha} = 0 . \tag{26.1.15}$$

Szorozzuk meg (1.15)-öt jobbról Ψ-vel és (1.14)-et pedig balról Ψ^*-gal, majd vonjuk ki őket egymásból:

$$\frac{i}{c}\frac{\partial(\Psi^*\Psi)}{\partial t} = -i\left[\Psi^*\boldsymbol{\alpha}(\mathrm{grad}\,\Psi) + (\mathrm{grad}\,\Psi^*)\,\boldsymbol{\alpha}\Psi\right],$$

vagyis

$$\frac{i}{c}\frac{\partial(\Psi^*\Psi)}{\partial t} = -i\,\mathrm{div}(\Psi^*\boldsymbol{\alpha}\Psi) . \tag{26.1.16}$$

Bevezetve a

$$\rho = e\Psi^*\Psi \quad \text{és} \quad \mathbf{i} = ec\Psi^*\boldsymbol{\alpha}\Psi \tag{26.1.17}$$

mennyiségeket, (1.16)-ból a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,\mathbf{i} = 0$$

kontinuitási egyenlethez jutunk. Az (1.17)-tel definiált ρ és $\mathbf{i}$ tehát a töltés és a töltésáramsűrűség kifejezéseit adják meg.

Ha (1.16)-ot integráljuk az egész térre, úgy – a jobboldalon GAUSS tételét felhasználva – kapjuk:

$$\frac{d}{dt}\int \Psi^*\Psi \, dv = -c\int \mathrm{div}(\Psi^*\alpha\Psi)dv = -c\int (\Psi^*\alpha\Psi)_n df,$$

ahol a df szerinti felületi integrált a végtelen távoli felületre kell kiterjeszteni. Mivel a Ψ hullámfüggvény a végtelenben eltűnik, ezért a jobboldal zérussal egyenlő

$$\frac{d}{dt}\int \Psi^*\Psi \, dv = 0\,,$$

tehát

$$\int \Psi^*\Psi dv = \text{konst.}$$

A kontinuitási egyenlet szerint tehát $\Psi^*\Psi$ térfogati integrálja az időben nem változik. Ez lehetővé teszi, hogy $\Psi^*\Psi$-t, éppúgy mint a nemrelativisztikus kvantummechanikában, a részecske tartózkodási valószínűségének tekintsük a tér egy adott pontjában. Ψ-re ezért a következő normálási feltételt írjuk elő:

$$\int \Psi^*\Psi dv = 1. \tag{26.1.18}$$

2. §. A Dirac-egyenlet szimmetrikus alakja

Az (1.14) *Dirac*-egyenletet könnyűszerrel olyan alakra hozhatjuk, hogy a térkoordináták és az idő szimmetrikusan szerepeljenek benne. Ehhez be kell vezetnünk a γ_k $(k = 1, 2, 3, 4)$ operátorokat, melyeket a következőképpen definiálunk:

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= -i\rho_3\alpha_x = \rho_2\sigma_x,\\
\gamma_2 &= -i\rho_3\alpha_y = \rho_2\sigma_y,\\
\gamma_3 &= -i\rho_3\alpha_z = \rho_2\sigma_z,\\
\gamma_4 &= \rho_3.
\end{aligned} \tag{26.2.1}$$

A γ operátorok felcserélési törvényei a következő képletben foglalhatók össze:

$$\gamma_k\gamma_l + \gamma_l\gamma_k = 2\delta_{kl}, \quad (k, l = 1, 2, 3, 4) \tag{26.2.2}$$

ahol δ_{kl} a *Kronecker*-féle delta szimbólum. (Értéke 1, ha $k = l$ és 0, ha $k \neq l$.) Bevezetjük még a

$$\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 \tag{26.2.3}$$

operátort is, mely a következő felcserélési szabályoknak tesz eleget:

$$\gamma_5^2 = 1 \quad \text{és} \quad \gamma_5\gamma_k = -\gamma_k\gamma_5. \quad (k = 1, 2, 3, 4)$$

A (2.1)-gyel definiált γ_k operátorokkal az előzőekben használt operátorok mind kifejezhetők:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= -i\gamma_2\gamma_3; \quad & \alpha_x &= -i\gamma_1\gamma_4; \quad & \rho_1 &= -\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4; \\ \sigma_y &= -i\gamma_3\gamma_1; \quad & \alpha_y &= -i\gamma_2\gamma_4; \quad & \rho_2 &= -i\gamma_1\gamma_2\gamma_3; \\ \sigma_z &= -i\gamma_1\gamma_2; \quad & \alpha_z &= -i\gamma_3\gamma_4; \quad & \rho_3 &= \gamma_4. \end{aligned} \tag{26.2.4}$$

A szükséges mennyiségek ismeretében szorozzuk meg az (1.14) *Dirac*-egyenlet mindkét oldalát ρ_3-mal. A (2.1) definíciók alapján a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{i}{c}\gamma_4\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[\frac{2\pi m_0 c}{h} + \gamma_1\frac{\partial}{\partial x} + \gamma_2\frac{\partial}{\partial y} + \gamma_3\frac{\partial}{\partial z}\right]\Psi.$$

A koordinátákra és az időre bevezetjük a (6.11.1) írásmódot, továbbá a

$$\kappa = \frac{2\pi m_0 c}{h} \tag{26.2.5}$$

rövidítő jelölést. Ekkor egyenletünk a következő alakot ölti:

$$\sum_{k=1}^{4}\gamma_k\frac{\partial\Psi}{\partial x_k} + \kappa\Psi = 0. \tag{26.2.6}$$

Ez lesz a *Dirac*-egyenlet szimmetrikus alakja: az x_1, x_2 x_3, x_4 koordináták szimmetrikusan szerepelnek benne.

Szükségünk lesz még az (1.13) konjugált komplex egyenlet szimmetrikus alakjára is. Ψ helyett célszerű lesz bevezetni a Ψ ún. adjungált függvényt, melyet a

$$\overline{\Psi} = \Psi^*\rho_3 = \Psi^*\gamma_4 \tag{26.2.7}$$

képlet definiál. Ezt, valamint (2.1)-et felhasználva (1.13) a következőképpen írható:

$$\sum_{k=1}^{4}\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial x_k}\gamma_k - \overline{\Psi}\kappa = 0. \tag{26.2.8}$$

Ez lesz az adjungált Ψ hullámfüggvényre vonatkozó egyenlet szimmetrikus alakja.

A γ_k mátrixok, valamint a Ψ adjungált függvénynek fent bevezetett definíciói alapján (1.17) a következőképpen írható:

$$\begin{aligned} i_x &= iec\overline{\Psi}\gamma_1\Psi, \\ i_y &= iec\overline{\Psi}\gamma_2\Psi, \\ i_z &= iec\overline{\Psi}\gamma_3\Psi, \\ \rho &= e\overline{\Psi}\gamma_4\Psi. \end{aligned}$$

Ha bevezetjük a (15.3.3) négyes-áramsűrűséget, úgy fenti egyenleteink az

$$s_k = iec\overline{\Psi}\gamma_k\Psi \qquad (k = 1, 2, 3, 4) \tag{26.2.9}$$

négyes-egyenlet alakjában foglalhatók össze. A kontinuitási egyenlet szimmetrikus alakja pedig a következő:

$$\sum_{k=1}^{4} \frac{\partial s_k}{\partial x_k} = 0 . \tag{26.2.10}$$

A gyakorlati számítások során a (2.1) hullámfüggvény pozitív és negatív energiájú komponenseinek, ϕ-nek és χ-nak a spinkoordinátától való függését (22.10.2) szerinti *Pauli*-féle spinorokkal írjuk le:

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_+ \\ \phi_- \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_+ \\ \chi_- \end{pmatrix}.$$

Ekkor Ψ egy négykomponensű mennyiség lesz:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_+ \\ \phi_- \\ \chi_+ \\ \chi_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}. \tag{26.2.11}$$

Ebben az ábrázolásban a γ_k operátorok 4×4-es mátrixok lesznek:

$$\gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{26.2.12}$$

A (2.3) és (2.4) relációkból pedig megkapjuk a többi operátorunk mátrix alakját:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{26.2.13}$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{26.2.14}$$

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 9 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

(26.2.15)

és végül:

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{26.2.16}$$

3. §. Mozgás elektromágneses térben

Mielőtt a *Dirac*-egyenletnek külső elektromágneses térben érvényes alakját felírhatnánk, foglalkoznunk kell az elektromágneses térben való mozgás klasszikus leírásával. Egy e töltésű és m_0 nyugalmi tömegű részecske mozogjon adott külső elektromágneses térben, melyet az

$$\mathfrak{E} = \mathfrak{E}(x, y, z, t) \quad \text{és} \quad \mathfrak{H} = \mathfrak{H}(x, y, z, t) \tag{26.3.1}$$

térerősségek jellemeznek. A részecskére ható erő a (14.3.5) *Lorentz*-erő lesz:

$$\mathbf{K} = e\mathfrak{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{u}, \mathfrak{H}].$$

Ezt kell beírnunk a relativisztikus dinamika (6.7.2) mozgásegyenletébe:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{m_0\mathbf{u}}{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}\right) = e\mathfrak{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{u},\mathfrak{H}]. \tag{26.3.2}$$

A következő feladatunk a mozgás H *Hamilton*-függvényének megszerkesztése. Azt állítjuk, hogy a (3.1) mozgásegyenlet a következő *Hamilton*-függvényből vezethető le:

$$H = \sqrt{(m_0c^2)^2 + c^2\left(p - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)^2} + e\Phi, \tag{26.3.3}$$

ahol Φ és $\mathfrak{A}$ a (3.1) térerősséget leíró potenciálok:

$$\mathfrak{E} = -\operatorname{grad}\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathfrak{A}}{\partial t},$$

$$\mathfrak{H} = \operatorname{rot}\mathfrak{A}. \tag{26.3.4}$$

Képezzük a (3.3) *Hamilton*-függvényhez tartozó kanonikus egyenleteket. A kanonikus egyenletek első csoportjába, a koordináták idő szerinti deriváltjait, tehát a sebességkomponenseket megadó

$$\frac{dx}{dt} = u_x = \frac{\partial H}{\partial p_x},$$

$$\frac{dy}{dt} = u_y = \frac{\partial H}{\partial p_y},$$

$$\frac{dz}{dt} = u_z = \frac{\partial H}{\partial p_z}$$

egyenletekbe beírva (3.3)-at, kapjuk:

$$\mathbf{u} = \frac{c^2\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)}{\sqrt{(m_0c^2)^2 + c^2\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)^2}}. \tag{26.3.5}$$

Oldjuk meg ezt az egyenletet **p**-re. (3.5) -öt négyzetreemelve és rendezve kapjuk, hogy

$$\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)^2 = \frac{m_0^2u^2}{1 - \frac{u^2}{c^2}},$$

ebből pedig

$$\sqrt{(m_0c^2)^2 + c^2\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)^2} = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}}.$$

Visszaírva ezt (3.5)-be, az eredmény

$$\mathbf{p} = \frac{m_0u}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} + \frac{e}{c}\mathfrak{A} \tag{26.3.6}$$

lesz. Elektromágneses tér jelenléte esetén a **p** impulzus nem egyszerűen az $m = m_0\left(1 - \frac{u^2}{c^2}\right)^{-1/2}$ mozgási tömeg és az **u** sebesség szorzata, hanem kiegészül még az $\frac{e}{c}\mathfrak{A}$ taggal is.

A kanonikus egyenletek második csoportja az impulzuskomponensek idő szerinti deriváltjait adja meg:

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \frac{dp_y}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial y}, \quad \frac{dp_z}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial z}.$$

Beírva ide a (3.3) *Hamilton*-függvényt a következő egyenletre jutunk:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{e}{c}[\mathbf{u}, \operatorname{rot} \mathfrak{A}] + \frac{e}{c}(\mathbf{u}\operatorname{grad})\mathfrak{A} - e \operatorname{grad} \phi. \tag{26.3.7}$$

A baloldalra helyettesítsük be **p**-nek (3.6) kifejezését és az idő szerinti teljes differenciálhányados képzésénél vegyük figyelembe a

$$\frac{d\mathfrak{A}}{dt} = \frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t} + \frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial y}\frac{dy}{dt} + \frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial z}\frac{dz}{dt} = \frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t} + (\mathbf{u}\operatorname{grad})\mathfrak{A}$$

összefüggést. Kapjuk, hogy

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{m_0\mathbf{u}}{\sqrt{1-\frac{u^2}{c^2}}}\right) = -\frac{e}{c}\frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t} + \frac{e}{c}[\mathbf{u}, \operatorname{rot} \mathfrak{A}] - e \operatorname{grad} \Phi .$$

Ez pedig pontosan megegyezik a (3.2) mozgásegyenlettel, ha tekintetbe vesszük a térerősségeket és potenciálokat összekapcsoló (3.4) képleteket. Ezzel bebizonyítottuk, hogy (3.3) valóban az elektromágneses térben való relativisztikus mozgás *Hamilton*-függvénye.

A *Hamilton*-függvény birtokában képezhetjük a kvantummechanikai tárgyalásban centrális szerepet betöltő *Hamilton*-operátort. A (3.3)-ban fellépő négyzetgyökvonást az 1. §-ban leírt módszerrel végezzük el, tehát a *Hamilton*-operátor a következő lesz:

$$H = m_0c^2\rho_3 + c\alpha\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right) + e\Phi . \tag{26.3.8}$$

Ez a *Hamilton*-operátor úgy kapható meg a szabad mozgást leíró (1.11) *Hamilton*-operátorból, hogy (1.11)-ben **p** helyébe $\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)$-t írunk és H-t még kiegészítjük az $e\Phi$ taggal.

Ha (3.8)-ban az impulzus helyébe a (22.6.5) differenciáloperátort írjuk, akkor a (22.6.5) *Schrödinger*-egyenletből a következő hullámegyenletet kapjuk:

$$\frac{i}{c}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{2\pi m_0 c}{h}\rho_3 - i\alpha\left(\operatorname{grad} - 2\pi i\frac{e}{hc}\mathfrak{A}\right) + 2\pi\frac{e}{hc}\Phi\right]\Psi . \tag{26.3.9}$$

Ez lesz az elektromágneses térben mozgó részecske *Dirac*-egyenlete.

Hozzuk a (3.9) *Dirac*-egyenletet is szimmetrikus alakra. Ehhez szorozzuk meg az egyenletet ρ_3-mal és vezessük be a (2.1) alatti γ_k operátorokat, továbbá a (6.11.1) négyes-koordinátákat és a (15.3.1) négyes-potenciált. A következő egyenletre jutunk:

$$\sum_{k=1}^{4}\gamma_k\left(\frac{\partial}{\partial x_k} - 2\pi i\frac{e}{hc}\mathfrak{A}_k\right)\Psi + \kappa\Psi = 0 , \tag{26.3.10}$$

ahol κ ismét a (2.5) alatti állandót jelöli.

A Ψ adjungált függvényre vonatkozó egyenlet felírásához képezzük a (3.9) *Dirac*-egyenlet konjugált komplexét:

$$-\frac{i}{c}\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{2\pi m_0 c}{h}\Psi^*\rho_3 + i\left(\text{grad} + 2\pi i\frac{e}{hc}\mathfrak{A}\right)\Psi^*\alpha + 2\pi\frac{e}{hc}\Phi\Psi^*.$$

(2.7) felhasználásával ez az egyenlet a következő szimmetrikus alakba írható:

$$\sum_{k=1}^{4}\left(\frac{\partial}{\partial x_k} + 2\pi i\frac{e}{hc}\mathfrak{A}_k\right)\overline{\Psi}\gamma_k - \kappa\overline{\Psi} = 0. \tag{26.3.11}$$

Az alábbiakban megmutatjuk, hogy a *Dirac*-egyenletből le lehet vezetni az elektron saját mágneses momentumát, melynek (22.10.23) operátorát a nemrelativisztikus elméletben a tapasztalati tényekre való hivatkozással írtuk fel, de levezetni nem tudtuk.

A Ψ hullámfüggvény helyett vezessük be a Ψ' függvényt a következő definícióval:

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi'(x, y, z, t)e^{-\frac{2\pi m_0 c^2}{h}t}. \tag{26.3.12}$$

Ezt behelyettesítve a (3.9) *Dirac*-egyenletbe, majd $hc/2\pi$-vel szorozva kapjuk, hogy Ψ' a következő egyenletnek tesz eleget:

$$-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \left[m_0c^2(\rho_3 - 1) + c\alpha\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right) + e\Phi\right]\Psi' \tag{26.3.13}$$

Jelöljük a Ψ' függvény pozitív energiájú komponensét ϕ'-vel, a negatív energiájút pedig χ'-vel:

$$\Psi' = \begin{pmatrix}\phi'\\ \chi'\end{pmatrix}.$$

Ezt betéve (3.13)-ba és felhasználva az (1.4), (1.5) és (1.10) definíciókat, a következő egyenletrendszert kapjuk:

$$\begin{aligned}-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \phi'}{\partial t} &= c\sigma\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)\chi' + e\Phi\phi'\\ -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \chi'}{\partial t} &= -2m_0c^2\chi' + c\sigma\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)\phi' + e\Phi\chi'.\end{aligned} \tag{26.3.14}$$

A továbbiakban fel fogjuk tételezni, hogy a relativisztikus effektusok nem nagyon jelentősek és egyenleteinkben az u^2/c^2 nagyságrendű tagok már elhanyagolhatók. Ebben a közelítésben (3.14) második egyenletében szereplő $-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \chi'}{\partial t}$ és $e\Phi\chi'$ elhanyagolható lesz $-2m_0c^2\chi'$ mellett. Így (3.14) második egyenletéből χ-re a

$$\chi' = \frac{1}{2m_0c}\sigma\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)\phi'$$

kifejezést kapjuk, amit (3.14) első egyenletébe helyettesítünk:

$$-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\phi'}{\partial t}=\frac{1}{2m_0}\left[\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)\right]^2\phi'+e\Phi\phi'. \tag{26.3.15}$$

Ez lesz a pozitív energiájú komponensre vonatkozó *Schrödinger*-egyenlet a nemrelativisztikus közelítésben. Ezen egyenleten még egy azonos átalakítást hajtunk végre. A $\boldsymbol{\sigma}$ *Pauli*-operátor elemi tulajdonságaiból következik, hogy ha $\mathbf{a}$ és $\mathbf{b}$ a $\boldsymbol{\sigma}$-operátorral felcserélhetők (egymással nem kell, hogy felcserélhetők legyenek!), akkor

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{a})\,(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{b})=\mathbf{ab}+i\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{a},\mathbf{b}]. \tag{26.3.16}$$

Az

$$\mathbf{a}=\mathbf{b}=\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}$$

helyettesítéssel kiszámíthatjuk a (3.15)-ben fellépő szögletes zárójeles kifejezést:

$$\left[\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)\right]^2=\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)^2+i\boldsymbol{\sigma}\left[\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right),\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)\right].$$

Mivel $\mathbf{p}$ és $\mathfrak{A}$ egymással nem cserélhetők fel, ezért (3.17) második tagja nem lesz zérus, hanem

$$\left[\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right),\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)\right]=-\frac{e}{c}([\mathbf{p},\mathfrak{A}]+[\mathfrak{A},\mathbf{p}])=-\frac{eh}{2\pi ic}\operatorname{rot}\mathfrak{A}$$

és (3.17) a következőképpen alakul:

$$\left[\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)\right]^2=\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)^2-\frac{eh}{2\pi c}(\boldsymbol{\sigma}\operatorname{rot}\mathfrak{A}).$$

Behelyettesítve a (3.15) hullámegyenletbe és figyelembe véve (3.4)-et, kapjuk:

$$-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\phi'}{\partial t}=\frac{1}{2m_0}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)^2\phi'+\left(e\Phi-\frac{eh}{4\pi m_0 c}\boldsymbol{\sigma}\mathfrak{H}\right)\phi'. \tag{26.3.18}$$

Ez az egyenlet a (22.6.15) időtől függő *Schrödinger*-egyenletnek felel meg; a *Hamilton*-operátor esetünkben:

$$H=\frac{1}{2m_0}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)^2+e\Phi-\frac{eh}{4\pi m_0 c}\boldsymbol{\sigma}\mathfrak{H}. \tag{26.3.19}$$

A H operátor első tagja a kinetikus energiának felel meg. Ez (3.6)-ból azonnal következik, ha elhanyagoljuk az u^2/c^2 nagyságrendű relativisztikus effektusokat. H második tagja az e töltésnek a Φ elektrosztatikus potenciáltérben felvett potenciális energiájával egyenlő, a harmadik tag pedig úgy értelmezhető, mint a részecske

$$\mu_S=\frac{eh}{4\pi m_0 c}\boldsymbol{\sigma} \tag{26.3.20}$$

saját mágneses momentumának a $\mathfrak{H}$ mágneses térrel való kölcsönhatási energiája. (Elektron esetében a részecske e töltése helyébe az elemi töltés negatívját, $-e$-t kell írnunk, ekkor (3.20) azonos lesz (22.10.23)-mal.

A *Zeeman*-effektus tárgyalásánál (huszonnegyedik fejezet, 6. §) a mágneses térrel való $-\mu_S \mathfrak{H}$ kölcsönhatást külön járulékos tagként függesztettük a *Hamilton*-operátorhoz. Most e tag a *Dirac*-egyenletből minden külön feltevés nélkül kiadódott.

4. §. A Dirac-egyenlet szimmetriatranszformációi

A (3.10) *Dirac*-egyenlet szimmetrikusan tartalmazza az x_k koordinátákat és az $\mathfrak{A}_k$ négyes-potenciált. Ez szükséges feltétele annak, hogy az egyenlet invariáns legyen a *Lorentz*-transzformációval szemben. Az alábbiakban megmutatjuk, hogy a *Dirac*-egyenlet valóban *Lorentz*-invariáns, majd pedig további olyan transzformációkat vizsgálunk meg, melyekkel szemben a *Dirac*-egyenlet invariáns.

Lorentz-transzformáció. Foglalkozzunk csak az infinitezimális *Lorentz*-transzformációkkal, a többi ezekből felépíthető. Az infinitezimális *Lorentz*-transzformáció legáltalánosabb alakja:

$$x'_k = x_k + \sum_{l=1}^{4} \varepsilon_{kl} x_l, \qquad (k = 1, 2, 3, 4) \tag{26.4.1}$$

ahol

$$\varepsilon_{kl} = -\varepsilon_{lk} \quad \text{és} \quad |\varepsilon_{kl}| \ll 1. \tag{26.4.2}$$

A *Dirac*-egyenlet invarianciája ezzel a transzformációval szemben a következőképpen látható be. Az $\mathfrak{A}_k$ négyes-potenciál – amint azt a relativisztikus elektrodinamikában megbeszéltük – a koordinátákhoz hasonló módon transzformálódik:

$$\mathfrak{A}'_k = \mathfrak{A}_k + \sum_{l=1}^{4} \varepsilon_{kl} \mathfrak{A}_l. \qquad (k = 1, 2, 3, 4) \tag{26.4.3}$$

Képezzük ezen egyenletek inverzeit, vagyis fejezzük ki $\mathfrak{A}_k$-t a vesszős komponensekkel. Mivel infinitezimális transzformációról van szó, ezért ε_{kl} magasabb hatványai elhanyagolhatók és írhatjuk, hogy

$$\mathfrak{A}_k = \mathfrak{A}'_k - \sum_{l=1}^{4} \varepsilon_{kl} \mathfrak{A}'_l. \tag{26.4.4}$$

Hasonlóképpen kapjuk (4.1) alapján, hogy

$$\frac{\partial}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x'_k} - \sum_{l=1}^{4} \varepsilon_{kl} \frac{\partial}{\partial x'_l}. \tag{26.4.5}$$

(4.4)-et és (4.5)-öt bevezetve (3.10)-be, kapjuk:

$$\left[\sum_{k,l=1}^{4} \gamma_k (\delta_{kl} - \varepsilon_{kl}) \left(\frac{\partial}{\partial x'_l} - \frac{2\pi i e}{hc} \mathfrak{A}'_l \right) + \kappa \right] \Psi = 0 .$$

Szorozzuk meg ezt az egyenletet

$$1+\frac{1}{4}\sum_{p,\,q=1}^{4}\varepsilon_{pq}\gamma_p\gamma_q$$

-val. Az ε_{kl}-ben kvadratikus tagokat ismét elhanyagolva, a kapott egyenletet a következő alakba írhatjuk át:

$$\left[\sum_{k=1}^{4}\gamma_k\left(\frac{\partial}{\partial x'_k}-\frac{2\pi ie}{hc}\mathfrak{A}'_k\right)+\kappa\right]\left[1+\frac{1}{4}\sum_{p,\,q=1}^{4}\varepsilon_{pq}\gamma_p\gamma_q\right]\Psi=0\,. \tag{26.4.6}$$

Itt felhasználtuk a (2.2) felcserélési relációkat. Ha bevezetjük a

$$\Psi'(x')=\left[1+\frac{1}{4}\sum_{p,\,q=1}^{4}\varepsilon_{pq}\gamma_p\gamma_q\right]\Psi(x) \tag{26.4.7}$$

jelölést, akkor a transzformált *Dirac*-egyenlet:

$$\left[\sum_{k=1}^{4}\gamma_k\left(\frac{\partial}{\partial x'_k}-\frac{2\pi ie}{hc}\mathfrak{A}'_k\right)+\kappa\right]\Psi'=0$$

alakilag azonos (3.10)-zel. Ilymódon sikerült a *Dirac*-egyenlet *Lorentz*-invarianciáját kimutatni és egyben megkaptuk a Ψ hullámfüggvény (4.7) transzformációs szabályát is.

Határozzuk meg az adjungált $\overline{\Psi}$ transzformációs képletét is. Képezzük (4.7) konjugált komplexét.

$$\Psi'^{*}=\Psi^{*}\left[1-\frac{1}{4}\sum_{p,\,q=1}^{4}E_{pq}\varepsilon_{pq}\gamma_p\gamma_q\right].$$

Itt $E_{pq}=-1$, ha p vagy $q=4$, különben $E_{pq}=+1$. (Ez $x_4=ict$ képzetes volta miatt lép fel.) Szorozzuk jobbról γ_4-el. Kapjuk:

$$\overline{\Psi}'=\overline{\Psi}\left[1-\frac{1}{4}\sum_{p,\,q=1}^{4}\varepsilon_{pq}\gamma_p\gamma_q\right]. \tag{26.4.8}$$

Alkalmazzuk eredményeinket két fontos speciális esetre. Először vizsgáljuk meg a koordinátarendszer elforgatását. Infinitezimálisan kicsiny ϑ forgásvektorú elfogatás esetén a koordináták transzformációja:

$$\mathbf{r}'=\mathbf{r}-[\vartheta,\mathbf{r}]\ \text{és}\ t'=t.$$

Ekkor tehát

$$\varepsilon_{kl}=\begin{pmatrix}0 & \vartheta_z & -\vartheta_y & 0\\ -\vartheta_z & 0 & \vartheta_x & 0\\ \vartheta_y & -\vartheta_x & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix} \tag{26.4.9}$$

lesz. A hullámfüggvény transzformáltja (4.7) szerint

$$\Psi' = \left[1 + \frac{1}{2}(\vartheta_x \gamma_2 \gamma_3 + \vartheta_y \gamma_3 \gamma_1 + \vartheta_z \gamma_1 \gamma_2)\right] \Psi.$$

Az itt fellépő γ-operátor szorzatok (2.4) szerint éppen a $\boldsymbol{\sigma}$ *Pauli*-operátor komponenseinek i-szeresével egyenlők. Tehát a koordinátarendszer elforgatásánál Ψ a következő transzformációs szabálynak tesz eleget:

$$\Psi' = \left(1 + \frac{i}{2}\,\boldsymbol{\vartheta}\boldsymbol{\sigma}\right)\Psi. \tag{26.4.10}$$

Megjegyezzük, hogy (22.10.12) alapján a transzformációs szabály az $\mathbf{S}$ spinmomentummal a következő alakot ölti:

$$\Psi' = \left(1 + \frac{2\pi i}{h}\,\boldsymbol{\vartheta}\mathbf{S}\right)\Psi.$$

A kvantumelmélet ezt a szabályt általánosítva az $\mathbf{S}$ spinmomentum *definíciójának* fogadja el. A spin ezen definíciójából következik, hogy a *Dirac*-egyenlet által leírt részecske spinje (22.10.12) lesz, azaz a *Dirac*-egyenlet az 1/2-es spinű részecskéket írja le.

A véges ϑ-szögű forgatáshoz tartozó transzformációt úgy vezethetjük le az infinitezimális forgatást leíró (4.10)-ből, hogy $\boldsymbol{\vartheta}$-t n részre osztjuk, majd a $\boldsymbol{\vartheta}/n$ szöggel való forgatást n-szer alkalmazzuk. Ha $n \to \infty$, úgy $\boldsymbol{\vartheta}/n$ infinitezimálisan kicsiny lesz, tehát a $\boldsymbol{\vartheta}/n$ szöggel való forgatást (4.10) írja le.

$$\Psi' = \lim_{n\to\infty}\left(1 + \frac{i}{2n}\,\boldsymbol{\vartheta}\boldsymbol{\sigma}\right)^n \Psi = e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\vartheta}\boldsymbol{\sigma}}\Psi\,.$$

Az exponenciális kifejezést hatványsorba fejtjük:

$$\Psi' = \left[\sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!}\left(\frac{i}{2}\,\boldsymbol{\vartheta}\boldsymbol{\sigma}\right)^r\right]\Psi.$$

Végül pedig felhasználjuk a (22.10.7) *Pauli*-mátrixok szorzási szabályait:

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \\ \sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z, \\ \sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x, \\ \sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y. \end{aligned} \tag{26.4.12}$$

Ezzel kapjuk, hogy

$$\Psi' = \left[\cos\frac{\vartheta}{2} + i\sigma_\vartheta \sin\frac{\vartheta}{2}\right].$$

ahol ϑ a $\boldsymbol{\vartheta}$ vektor abszolút értékét, tehát az elforgatás szögét jelenti, σ_{ϑ} pedig $\boldsymbol{\sigma}$-nak ϑ irányú vetülete:

$$\sigma_{\vartheta} = (\boldsymbol{\vartheta}\boldsymbol{\sigma})/\vartheta.$$

A fenti képlet érdekes és igen fontos következménye, hogy a koordinátarendszer $\vartheta = 2\pi$ szöggel való elforgatása (ami geometriai szempontból azonossági transzformáció) a Ψ hullámfüggvényt negatívjába viszi át:

$$\Psi'_{2\pi} = -\Psi. \tag{26.4.14}$$

Ki lehet mutatni, hogy ez a jelenség nemcsak az 1/2-es spinű részecskék esetén, hanem minden olyan esetben fellép, amikor a spin egy páratlan szám fele, tehát a 3/2, 5/2, ... stb. spinértékek esetében is. Mivel Ψ és $-\Psi$ fizikailag ugyanazt az állapotot írják le, ezért (4.14) a kvantumelméletben semmi nehézséget nem okoz.

Ezek után térjünk át az egymáshoz képest egyenletesen mozgó koordinátarendszerek vizsgálatára. A $\mathbf{v}$ infinitezimálisan kicsiny sebességgel haladó inerciarendszerbe átvivő transzformáció (6.4.8)-ból vezethető le:

$$x' = x - v_x t, \qquad \text{tehát} \qquad x'_1 = x_1 + \frac{iv_x}{c} x_4,$$

$$y' = y - v_y t, \qquad \text{tehát} \qquad x'_2 = x_2 + \frac{iv_y}{c} x_4,$$

$$z' = z - v_z t, \qquad \text{tehát} \qquad x'_3 = x_3 + \frac{iv_z}{c} x_4,$$

$$t' = t - \frac{1}{c^2}(\mathbf{vr}), \qquad \text{tehát} \qquad x'_4 = x_4 - \frac{i}{c}(v_x x_1 + v_y x_2 + v_z x_3).$$

Ezen infinitezimális *Lorentz*-transzformáció mátrixa a következő lesz:

$$\varepsilon_{kl} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{iv_x}{c} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{iv_y}{c} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{iv_z}{c} \\ -\frac{iv_x}{c} & -\frac{iv_y}{c} & -\frac{iv_z}{c} & 0 \end{pmatrix}. \tag{26.4.15}$$

A hullámfüggvény transzformáltja (4.7) szerint:

$$\Psi' = \left[1 + \frac{i}{2c}(v_x\gamma_1\gamma_4 + v_y\gamma_2\gamma_4 + v_z\gamma_3\gamma_4)\right]\Psi.$$

Felhasználva (2.4)-et ez a transzformációs szabály a következő alakot ölti:

$$\Psi' = \left(1 - \frac{1}{2c} \mathbf{v}\boldsymbol{\alpha}\right)\Psi. \tag{26.4.16}$$

A véges **v** sebességhez tartozó transzformációs szabályt a véges szögű forgatáshoz analóg módszerrel állapíthatjuk meg. A **v** sebességet n részre osztjuk, (4.16)-ot n-szer alkalmazzuk és elvégezzük az $n \to \infty$ határátmenetet:

$$\Psi' = \lim_{n\to\infty}\left(1 - \frac{1}{2nc} \mathbf{v}\boldsymbol{\alpha}\right)^n \Psi.$$

Ebből kapjuk, hogy

$$\Psi' = \left(\mathrm{ch}\,\frac{\phi}{2} - \alpha_v \,\mathrm{sh}\,\frac{\phi}{2}\right)\Psi, \tag{26.4.17}$$

ahol v a sebesség abszolút értéke, α_v $\boldsymbol{\alpha}$-nak **v** irányú vetülete:

$$\alpha_v = (\mathbf{v}\boldsymbol{\alpha})/v$$

és ϕ a következő mennyiséget jelöli

$$\phi = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + v/c}{1 - v/c}.$$

Tértükrözés. A koordinátarendszer origójára való tükrözés a következő transzformációt jelenti:

$$x_1' = -x_1,\ x_2' = -x_2,\ x_3' = -x_3,\ x_4' = x_4. \tag{26.4.18}$$

Természetesen ugyanígy transzformálódik a négyes potenciál is:

$$\mathfrak{A}_1' = -\mathfrak{A}_1,\ \mathfrak{A}_2' = -\mathfrak{A}_2,\ \mathfrak{A}_3' = -\mathfrak{A}_3,\ \mathfrak{A}_4' = \mathfrak{A}_4.$$

Bevezetve ezeket (3.10)-be, kapjuk:

$$\left[-\sum_{k=1}^{3} \gamma_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k'} - 2\pi i \frac{e}{hc} \mathfrak{A}_k'\right) + \gamma_4 \left(\frac{\partial}{\partial x_4'} - 2\pi i \frac{e}{hc} \mathfrak{A}_4'\right) + \kappa\right]\Psi = 0.$$

Szorozzuk meg ezt az egyenletet balról $i\gamma_4$-el és használjuk fel a (2.2) felcserélési törvényeket. Kapjuk, hogy

$$\left[\sum_{k=1}^{4} \gamma_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k'} - 2\pi i \frac{e}{hc} \mathfrak{A}_k'\right) + \kappa\right](i\gamma_4\Psi) = 0.$$

Ha bevezetjük a

$$\Psi'(x') = i\gamma_4\Psi \tag{26.4.19}$$

transzformált függvényt, akkor a transzformált *Dirac*-egyenlet

$$\left[\sum_{k=1}^{4} \gamma_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k'} - 2\pi i \frac{e}{hc} \mathfrak{A}_k'\right) + \kappa\right]\Psi' = 0,$$

alakilag megegyezik (3.10)-zel. Ezzel bebizonyítottuk a *Dirac*-egyenlet invarianciáját a tértükrözéssel szemben és egyben Ψ transzformációs szabályát is megismertük (4.19) alatt.

Két tükrözést egymás után végrehajtva az

$$x_k'' = x_k, \quad \Psi'' = -\Psi$$

transzformációt kapjuk, ami a koordinátarendszer 2π szöggel való elforgatását jelenti.

Végül feljegyezzük az adjungált függvény transzformáltját, amit (4.19)-ből közvetlenül megkaphatunk:

$$\overline{\Psi}' = -i\overline{\Psi}\gamma_4. \tag{26.4.20}$$

Időtükrözés. Az előzőekhez hasonló módon bizonyítható be, hogy a *Dirac*-egyenlet invariáns az időtükrözéssel szemben. Az időtükrözés a következő transzformációt jelenti:

$$x_1' = x_1, \quad x_2' = x_2, \quad x_3' = x_3, \quad x_4' = -x_4, \quad \Psi'(x') = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\Psi(x). \tag{26.4.21}$$

Racah (1937) bebizonyította, hogy az időtükrözéssel szembeni invariancia egyszerű következménye a (2.2) csererelációknak.

Tértükrözést és időtükrözést egymásután végrehajtva kapjuk a teljes téridőtükrözést. Ennek transzformációja:

$$x_k' = -x_k, \qquad (k = 1, 2, 3, 4)$$

$$\Psi'(x') = i\gamma_5\Psi(x). \tag{26.4.22}$$

A *Dirac*-egyenlet invarianciája ezen transzformációval szemben közvetlenül is belátható a $\gamma_k\gamma_5 = -\gamma_5\gamma_k$ reláció alapján.

Töltéstükrözés. Vezessük be a következő operátort:

$$\gamma_c = i\rho_1\sigma_y = \gamma_2\gamma_4. \tag{26.4.23}$$

γ_c mátrixára (2.11)-ből közvetlenül adódik, hogy

$$\gamma_c = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{26.4.24}$$

Ebből leolvashatjuk γ_c néhány fontos tulajdonságát: γ_c minden eleme valós, tehát $\gamma_c^* = \gamma_c$, továbbá γ_c antiszimmetrikus, azaz $\gamma_c^T = -\gamma_c$ (T-vel a transzponált mátrixot jelöljük) és végül meggyőződhetünk arról is, hogy $\gamma_c^2 = -1$. Ezenkívül fennállnak az alábbi relációk is:

$$\gamma_c\gamma_k\gamma_c = \gamma_k^T. \qquad (k = 1, 2, 3, 4) \tag{26.4.25}$$

A Ψ hullámfüggvény töltéskonjugáltja alatt a következő függvényt értjük:

$$\Psi^c = \gamma_c \Psi. \tag{26.4.26}$$

A töltéskonjugált függvény adjungáltja (4.26) és (2.7) szerint:

$$\overline{\Psi}^c = -\gamma_c \overline{\Psi}. \tag{26.4.27}$$

Ebből viszont következik, hogy a töltéskonjugáció viszonos:

$$(\Psi^c)^c = \Psi.$$

Írjuk fel a (3.11) adjungált *Dirac*-egyenletet a következő alakban:

$$\sum_{k=1}^{4} \gamma_k^T \left(\frac{\partial}{\partial x_k} + 2\pi i \frac{e}{hc} \mathfrak{A}_k \right) \overline{\Psi} - \kappa \overline{\Psi} = 0 .$$

Ha ide beírjuk γ_k^T-nek (4.25) alakját, majd az egyenletet megszorozzuk $-\gamma_c$-vel, akkor $\gamma_c^2 = -1$ miatt a következő egyenletet kapjuk:

$$\sum_{k=1}^{4} \gamma_k \left(\frac{\partial}{\partial x_k} + 2\pi i \frac{e}{hc} \mathfrak{A}_k \right) \Psi^c + \kappa \Psi^c = 0.$$

Eredményünk mutatja, hogy a Ψ^c töltéskonjugált függvény a (3.10) *Dirac*-egyenlethez hasonló egyenletnek tesz eleget, az egyedüli eltérés (4.28) és (3.10) között abban áll, hogy a részecske e töltése ellenkező előjellel szerepel bennük. Ez azt jelenti, hogy ha ismerjük pl. az elektronra vonatkozó *Dirac*-egyenlet összes megoldását egy adott külső elektromágneses erőtérben, akkor felesleges az egyenletet a pozitronokra külön megoldani, mert a pozitronokra vonatkozó megoldásokat a (4.26) töltéskonjugáció segítségével megkaphatjuk az elektronokra vonatkozó megoldásokból. Megjegyezzük azt is, hogy ha Ψ egy pozitív energiájú elektronállapotot ír le, akkor a töltéskonjugált Ψ^c egy negatív energiájú pozitronállapotnak felel meg, és fordítva. A gyakorlatban minket mindig a pozitív energiájú állapotok érdekelnek, fizikailag csak ezek észlelhetők. Ezért a *Dirac*-egyenlet megoldásánál (3.10) és (4.28) pozitív energiájú megoldásait keressük meg, de ezzel lényegében véve valamennyi megoldást meghatároztuk, hiszen a negatív energiájú állapotok a töltéskonjugáció révén leszármaztathatók a pozitív energiájúakból.

Ha a vizsgált részecske elektromosan semleges, azaz $e = 0$, akkor a (3.10) és (4.28) *Dirac*-egyenletek egymással azonosakká válnak: mndkettő átmegy a szabad mozgás (2.6) *Dirac*-egyenletébe. Ez azt jelenti, hogy a (2.6) *Dirac*-egyenlet invariáns a

$$\Psi \to \Psi^c$$

transzformációval szemben. Mivel ez a transzformáció változatlanul hagyja az x_k koordinátákat, ezért a szabad mozgás *Dirac*-egyenletének minden Ψ megoldásából ugyanezen egyenlet egy másik megoldását is előállíthatjuk: a Ψ^c töltéskonjugált függvényt. A *Dirac*-egyenlet lineáris szerkezetéből következik, hogy újabb

megoldást jelentenek a Ψ és Ψ^c-ből képezett

$$\Psi_+ = \frac{1}{2}(\Psi + \Psi^c) \quad \text{és} \quad \Psi_- = \frac{1}{2}(\Psi - \Psi^c) \tag{26.4.29}$$

függvények is. Ezeket az ún. *Majorana*-féle megoldásokat meghatározott *töltésparitás* jellemzi, ugyanis Ψ_+ töltéskonjugáltja önmaga és Ψ_- töltéskonjugáltja pedig sajátmagának negatívja lesz:

$$\Psi_+^c = \Psi_+ \text{ és } \Psi_-^c = -\Psi_- .$$

MAJORANA feltevése szerint a természetben előforduló neutrinók mind a Ψ_+ állapotban vannak. A kettős β-bomlással kapcsolatos megfigyelések szerint ez a feltevés nem helytálló.

Vizsgáljuk még meg, hogy hogyan viselkedik a töltéskonjugált függvény a *Lorentz*-transzformációkor. A (4.7) *Lorentz*-transzformált függvény töltéskonjugáltja (4.26) és (4.8) alapján:

$$\Psi'^c = \gamma_c \overline{\Psi}' = \gamma_c \overline{\Psi} \left(1 - \frac{1}{4} \sum_{p,q=1}^{4} \varepsilon_{pq} \gamma_p \gamma_q\right),$$

vagy

$$\Psi'^c = \left(1 + \frac{1}{4} \sum_{p,q=1}^{4} \varepsilon_{pq} \gamma_p^T \gamma_q^T\right) \overline{\Psi} .$$

Felhasználva (4.25)-öt, valamint $\gamma_c^2 = -1$-et, kapjuk, hogy

$$\Psi'^c = \left(1 + \frac{1}{4} \sum_{p,q=1}^{4} \varepsilon_{pq} \gamma_p \gamma_q\right) \Psi^c . \tag{26.4.30}$$

Összehasonlítva (4.7)-tel, megállapíthatjuk, hogy a *Lorentz*-transzformációnál Ψ^c-t éppúgy kell transzformálni, mint Ψ-t. Tehát a töltéskonjugált függvény fogalma *Lorentz*-invariáns fogalom.

Végül vizsgáljuk meg Ψ^c tértükrözési sajátságait. A tértükrözött (4.19) töltéskonjugáltja (4.20) és (4.26) alapján:

$$(\Psi')^c = \gamma_c \overline{\Psi}' = -i\gamma_c(\overline{\Psi}\gamma_4) = -i\gamma_c \gamma_4^T \overline{\Psi} = i\gamma_4 \gamma_c \Psi .$$

Összevetve (4.19)-el, láthatjuk, hogy,

$$(\Psi')^c = (\Psi^c)', \tag{26.4.31}$$

vagyis a tértükrözött függvény töltéskonjugáltja megegyezik a töltéskonjugált függvény tértükrözöttjével. A tértükrözés és a töltéskonjugáció tehát egymással felcserélhető, egymástól független műveletek. A kettő kombinációjaként adódó (4.31) transzformációt *erős tértükrözés*nek nevezzük.

Salam-transzformáció. A zérus nyugalmi tömegű és elektromosan semleges neutrinók *Dirac*-egyenletét (2.6)-ból a $\kappa = 0$ helyettesítéssel kapjuk

$$\sum_{k=1}^{4} \gamma_k \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} = 0 . \tag{26.4.32}$$

Ennek az egyenletnek még egy, az előzőektől független szimmetriája van, melyre SALAM hívta fel első ízben a figyelmet. A SALAM-féle transzformáció a következő:

$$\Psi \to \Psi^m = \gamma_5 \Psi . \tag{26.4.33}$$

(4.32) mindkét oldalát megszorozva γ_5-tel és figyelembe véve a $\gamma_5\gamma_k = -\gamma_k\gamma_5$ csererelációt, kiadódik, hogy (4.32) valóban invariáns a (4.33) transzformációval szemben. Ugyanígy azt is láthatjuk, hogy a zérustól különböző tömegű részecske (2.6) *Dirac*-egyenlete *nem* invariáns (4.33)-mal szemben, mert a transzformált egyenletben κ ellenkező előjellel lép fel.

$\gamma_5^2 = 1$ miatt a *Salam*-transzformáció viszonos:

$$(\Psi^m)^m = \Psi$$

és a $\gamma_5\gamma_k = -\gamma_k\gamma_5$ relációból következik, hogy a *Salam*-transzformáció a (4.7) *Lorentz*-transzformációval felcserélhető művelet:

$$(\Psi')^m = (\Psi^m)',$$

azaz a *Salam*-transzformált függvény fogalma *Lorentz*-invariáns fogalom.

A fentiek szerint a (4.32) egyenlet minden Ψ megoldásából előállíthatunk még egy másik megoldást is: Ψ^m-et. Újabb megoldásokat jelentenek a

$$\begin{aligned} \Psi_B &= \frac{1}{2}(\Psi + \Psi^m) = \frac{1+\gamma_5}{2}\Psi, \\ \Psi_J &= \frac{1}{2}(\Psi - \Psi^m) = \frac{1-\gamma_5}{2}\Psi \end{aligned} \tag{26.4.34}$$

lineárkombinációk is, melyeket az jellemez, hogy meghatározott *Salam-paritás*uk van:

$$\Psi_B^m = \Psi_B \quad \text{és} \quad \Psi_J^m = -\Psi_J .$$

A β-bomlással kapcsolatos polarizációs mérések tanúsága szerint a természetben előforduló neutrinok mind Ψ_B állapotban vannak, tehát *Salam*-paritásuk: $+1$. Ennek szemléletes fizikai jelentését a következő §-ban fogjuk megbeszélni.

A *Salam*-transzformált függvény adjungáltja: $\overline{\Psi^m} = -\overline{\Psi}\gamma_5$. Ebből következik, hogy Ψ^m töltéskonjugáltja a következő lesz:

$$(\Psi^m)^c = \gamma_c\overline{\Psi^m} = -\gamma_c(\overline{\Psi}\gamma_5) = -\gamma_c\gamma_5^T\overline{\Psi} = -\gamma_5\gamma_c\overline{\Psi} = -(\Psi^c)^m . \tag{26.4.35}$$

Ez azt jelenti, hogy a töltéskonjugáció és a *Salam*-transzformáció antikommutáló műveletek, (4.35)-ből következik, hogy a (4.34) függvények töltéskonjugáltjai:

$$(\Psi_B)^c = \frac{1}{2}[\Psi^c - (\Psi^c)^m] = (\Psi^c)_J ,$$

$$(\Psi_J)^c = \frac{1}{2}[\Psi^c + (\Psi^c)^m] = (\Psi^c)_B .$$

Tehát a természetben előforduló Ψ_B állapothoz töltéskonjugált állapot *Salam*-paritása: -1. A töltéskonjugált függvény a neutrinó antirészecskéjét, az *antineutrinót* írja le. A neutrinót és az antineutrinót tehát a *Salam*-paritásuk különbözteti meg egymástól.

5. §. A szabad mozgás. Síkhullámok

Határozzuk meg az erőmentes térben mozgó részecske (1.11) energiaoperátorának sajátértékeit és sajátfüggvényeit. Az energiasajátértékegyenlet:

$$H\psi = E\psi. \tag{26.5.1}$$

A ψ sajátfüggvényt írjuk fel pozitív és negatív energiájú állapotoknak megfelelő komponensekre bontott alakban:

$$\psi = N\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}, \tag{26.5.2}$$

ahol N egy normálási állandó. Az energiasajátértékegyenletből (1.11) behelyettesítése után a ϕ és χ komponensekre a következő egyenletrendszert kapjuk:

$$\begin{aligned} m_0c^2\phi + \frac{hc}{2\pi i}(\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{grad})\chi &= E\phi\,,\\ -m_0c^2\chi + \frac{hc}{2\pi i}(\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{grad})\phi &= E\chi\,. \end{aligned} \tag{26.5.3}$$

A második egyenletből χ-t elő tudjuk állítani ϕ kifejezéseként:

$$\chi = \frac{hc}{2\pi i}\frac{(\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{grad})}{E + m_0c^2}\phi\,. \tag{26.5.4}$$

Behelyettesítve (5.3) első egyenletébe és felhasználva a (3.16) relációt, kapjuk:

$$m_0c^2\phi - \frac{h^2c^2}{4\pi^2}\frac{1}{E + m_0c^2}\Delta\phi = E\phi\,,$$

amiből rendezés után a

$$\Delta\phi + k^2\phi = 0 \tag{26.5.5}$$

hullámegyenletet kapjuk, ahol

$$k^2 = \frac{4\pi^2}{h^2c^2}\left[E^2 - (m_0c^2)^2\right]. \tag{26.5.6}$$

Az (5.5) hullámegyenlet bármely ϕ megoldásából az energiasajátértékegyenlet két megoldását állíthatjuk elő: az (5.6)-nak megfelelő energia ugyanis két különböző előjellel fordulhat elő

$$E = \pm\frac{hc}{2\pi}\sqrt{k^2 + \kappa^2}\,, \tag{26.5.7}$$

ahol κ a (2.5) alatti konstanst jelöli. A ψ sajátfüggvényt ezután (5.2), (5.4) adja meg. Ha ϕ-t normáltnak választjuk, akkor az (5.2)-ben szereplő normálási állandó értéke:

$$N = \sqrt{\frac{E + m_0c^2}{2E}}. \tag{26.5.8}$$

Amint látjuk, az energiasajátértékegyenlet megoldásai két típusba, a pozitív és negatív E energiájú megoldások típusába sorolhatók. A legkisebb pozitív energia m_0c^2 és a legnagyobb negatív energia $-m_0c^2$. A pozitív és negatív energiák tartományát egy $2m_0c^2$ nagyságú véges intervallum választja el. A megoldásoknak ez a felosztása pozitív és negatív energiájúakra relativisztikusan invariáns. Mivel a pozitív és negatív energiájú megoldások az (1.11) H operátor két különböző sajátértékéhez tartoznak, ezért egymásra mindig ortogonálisak.

Az (5.5) hullámegyenlet alakilag megegyezik a nemrelativisztikus mozgás (23.1.3) *Schrödinger*-egyenletével, ezért kielégíthetjük egy (23.1.12) alakú síkhullámmal. Mivel azonban most ϕ a részecske spinjét is le kell, hogy írja, ezért a térbeli mozgást leíró síkhullámfüggvényt ki kell egészítenünk egy w *Pauli*-spinorral, ami a részecske spinállapotáról ad számot. Tehát:

$$\phi = e^{i\mathbf{kr}}w(\mathbf{k}), \tag{26.5.9}$$

ahol

$$k_x = k\alpha, \quad k_y = k\beta, \quad k_z = k\gamma$$

és α, β, γ a haladás irányának iránykoszinuszai. Adott $\mathbf{k}$ esetén két lineárisan független $w(\mathbf{k})$ spinor választható, a részecske spinjének két lehetséges polarizációjának megfelelően. A mozgó részecske önmaga csak egyetlen irányt tüntet ki: a haladási irányt. Ezért a fizikai alkalmazások szempontjából különös jelentősége van a spin $\mathbf{k}$ irányú komponensének. Jelölje $\hat{\mathbf{k}}$ a haladás irányába mutató egységvektort,

$$\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/\mathrm{k},$$

a spin ezzel párhuzamos komponense:

$$\eta = \sigma_k = (\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{k}}). \tag{26.5.10}$$

Ezt a mennyiséget a részecske *csavarodás*ának vagy *helicitás*ának nevezzük. Ennek $+1$ sajátértéke a jobbcsavart utánzó, a -1 sajátértéke a balcsavart utánzó mozgásállapotnak felel meg. A csavarodás sajátfüggvényeit $w^{\eta}(\mathbf{k})$-val jelöljük (ahol $\eta = \pm 1$), e sajátfüggvényeket (22.10.19–20) mintájára állapíthatjuk meg:

$$w^{+} = N_{+}\begin{pmatrix} \cos\dfrac{\vartheta}{2} \\ \sin\dfrac{\vartheta}{2}e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad w^{-} = N_{-}\begin{pmatrix} -\sin\dfrac{\vartheta}{2}e^{-i\phi} \\ \cos\dfrac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}.$$

Itt ϑ és ϕ a $\mathbf{k}$ vektor irányának polárszögei és N_{+}, N_{-} pedig önkényesen választható egységnyi abszolút értékű fázisállandók. A továbbiak kedvéért célszerű eze-

ket a következő módon választani

$$N_+ = e^{i\left(-\frac{\phi}{2}+\frac{3\pi}{4}\right)} \quad \text{és} \quad N_- = e^{i\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{3\pi}{4}\right)}.$$

Ezzel a csavarodás sajátfüggvényei a következők lesznek:

$$w^+ = e^{\frac{3\pi i}{4}} \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta}{2} e^{-\frac{i\phi}{2}} \\ \sin\frac{\vartheta}{2} e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix},$$

$$w^- = e^{\frac{3\pi i}{4}} \begin{pmatrix} -\sin\frac{\vartheta}{2} e^{-\frac{i\phi}{2}} \\ \cos\frac{\vartheta}{2} e^{\frac{i\phi}{2}} \end{pmatrix}. \tag{26.5.11}$$

A szabad részecske állapotait (5.11)-nek (5.9)-be való helyettesítésével kapott síkhullámokkal írjuk le:

$$\phi = e^{i\mathbf{kr}} w^{\eta}(\mathbf{k}) \tag{26.5.12}$$

Ha (5.12)-t behelyettesítjük (5.2) és (5.4)-be, megkapjuk a H energiaoperátor sajátfüggvényeit. Adott $\mathbf{k}$ hullámszám esetén négy lineárisan független megoldást kapunk, melyeket az E energia előjele és a csavarodás értéke különböztet meg egymástól. Az energiasajátfüggvények a következő alakúak:

$$\psi_{\mathbf{k},s} = e^{i\mathbf{kr}} u^s(\mathbf{k}),$$

ahol az $s = 1, 2, 3, 4$ index a négy lineárisan független megoldás megkülönböztetésére szolgál. Jelöljük E_k-val az (5.7) energia abszolút értékét,

$$E_k = \frac{hc}{2\pi}\sqrt{k^2+\kappa^2},$$

akkor a megoldások sorszámozása a következőképpen történik:

s	E energia	η csavarodás
1	E_k	$+1$
2	E_k	-1
3	$-E_k$	$+1$
4	$-E_k$	-1

Az (5.13)-ban szereplő u^s amplitúdók felírásához vezessük be a

$$q = \sqrt{\frac{E_k - mc^2}{E_k + mc^2}} \tag{26.5.14}$$

jelölést. Ezzel

$$u^1(\mathbf{k}) = \frac{w^+(\mathbf{k})}{\sqrt{1+q^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ q \end{pmatrix},$$

$$u^2(\mathbf{k}) = \frac{w^-(\mathbf{k})}{\sqrt{1+q^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -q \end{pmatrix},$$

$$u^3(\mathbf{k}) = \frac{w^+(\mathbf{k})}{\sqrt{1+q^2}} \begin{pmatrix} q \\ -1 \end{pmatrix}, \tag{26.5.15}$$

$$u^4(\mathbf{k}) = \frac{w^-(\mathbf{k})}{\sqrt{1+q^2}} \begin{pmatrix} q \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ezzel a szabad mozgást leíró $\psi_{\mathbf{k},s}$ sajátfüggvényeket meghatároztuk.

Vizsgáljuk most meg, hogy hogyan viselkednek a megoldások a töltéskonjugáció műveleténél. Jelöljük $v^s(\mathbf{k})$-val az $u^s(\mathbf{k})$ amplitúdó töltéskonjugáltját:

$$v^s(\mathbf{k}) = (u^s(\mathbf{k}))^c = \rho_2 \sigma_y (u^s(\mathbf{k}))^* .$$

Ennek segítségével az (5.13) sajátfüggvények töltéskonjugáltjai a

$$\psi^c_{\mathbf{k},s} = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} v^s(\mathbf{k}) \tag{26.5.16}$$

alakban írhatók fel. Elemi számolással beláthatjuk, hogy az (5.11) alatti spinorokra fennállnak a

$$\sigma_y (w^+(\mathbf{k}))^* = i w^+(-\mathbf{k}),$$

$$\sigma_y (w^-(\mathbf{k}))^* = -i w^-(-\mathbf{k}) \tag{26.5.17}$$

összefüggések, amiből következik, hogy

$$v^1(\mathbf{k}) = u^3(-\mathbf{k}), \quad v^2(\mathbf{k}) = u^4(-\mathbf{k}), \quad v^3(\mathbf{k}) = -u^1(-\mathbf{k}), \quad v^4(\mathbf{k}) = -u^2(-\mathbf{k}).$$

Hasonló összefüggések állnak fenn az energiasajátfüggvényekre is:

$$\psi^c_{\mathbf{k},1} = \psi_{-\mathbf{k},3}, \quad \psi^c_{\mathbf{k},2} = \psi_{-\mathbf{k},4}, \quad \psi^c_{\mathbf{k},3} = -\psi_{-\mathbf{k},1}, \quad \psi^c_{\mathbf{k},4} = -\psi_{-\mathbf{k},2}. \tag{26.5.18}$$

Láthatjuk tehát, hogy egy negatív energiájú állapot töltéskonjugáltja egy pozitív energiájú, ellentett impulzusú, de ugyanolyan csavarodású állapot.

Külön figyelmet érdemel az $m_0 = 0$ tömegű neutrinók esete. Neutrinók esetében $q = 1$ és az (5.15) amplitúdók kifejezései a következők lesznek:

$$u^1(\mathbf{k}) = \frac{w^+(\mathbf{k})}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$u^2(\mathbf{k}) = \frac{w^-(\mathbf{k})}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

$$u^3(\mathbf{k}) = \frac{w^+(\mathbf{k})}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

$$u^4(\mathbf{k}) = \frac{w^-(\mathbf{k})}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ezek az amplitúdók sajátfüggvényei a $\gamma_5 = -\rho_1$ operátornak. γ_5 értéke az állapot *Salam*-paritásával egyenlő, melynek értékei rendre a következők:

s	γ_5
1	−1
2	+1
3	−1
4	+1

Amint már említettük, a természetben előforduló neutrinók mind +1 *Salam*-paritásúak. Pozitív energiájú neutrinó csak az $s = 2$ állapotban lehet, tehát mozgása mindig a balcsavart utánozza. Az $s = 3$ negatív energiájú állapot töltéskonjugáltja, amit antineutrinóként észlelünk, (5.18) szerint jobbcsavar mozgású.

6. §. A Dirac-egyenlet megoldása centrális erőtér esetén

Az alábbiakban azzal a gyakorlatilag igen fontos esettel foglalkozunk, amikor a részecske egy centrális elektrosztatikus térben mozog, tehát $\mathfrak{A} = 0$ és Φ csak az r radiális koordinátától függ. (Ez a helyzet pl. az atommag *Coulomb*-terében mozgó elektronnál.) A

$$V(r) = e\Phi(r)$$

potenciális energia bevezetésével és $\boldsymbol{\alpha} = \rho_1\boldsymbol{\sigma}$ figyelembevételével a (3.8) energiaoperátor a következő lesz:

$$H = m_0c^2\rho_3 + c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\rho_1 + V(r). \tag{26.6.1}$$

Írjuk fel ezen energiaoperátor sajátértékegyenletét:

$$H\psi = [m_0c^2\rho_3 + c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\rho_1 + V(r)]\psi = E\psi.$$

Ha a ψ sajátfüggvény komponensekre bontott alakját,

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

behelyettesítjük a sajátértékegyenletbe, akkor ϕ-re és χ-re a következő egyenletrendszert kapjuk:

$$(m_0c^2 + V(r) - E)\phi + c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\chi = 0,$$

$$(-m_0c^2 + V(r) - E)\chi + c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\phi = 0. \tag{26.6.2}$$

Az impulzusoperátorok (22.6.5) kifejezéseit behlyettesítve, a következő differenciálegyenletrendszert kapjuk:

$$\left(m_0c^2 + V(r) - E\right)\phi - i\,\frac{hc}{2\pi}\,(\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{grad})\,\chi = 0,$$

$$\left(-m_0c^2 + V(r) - E\right)\chi - i\,\frac{hc}{2\pi}\,(\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{grad})\,\phi = 0\,. \tag{26.6.3}$$

Gömbszimmetrikus $V(r)$ potenciál esetén vegyük fel a ϕ függvényt a következő alakban:

$$\phi = \frac{1}{r}\,R(r)F_{ljm_j}, \tag{26.6.4}$$

ahol $R(r)$ egy, a továbbiakban meghatározandó radiális hullámfüggvény, F_{ljm_j} pedig a $\mathbf{J} = \mathbf{N} + \mathbf{S}$ teljes impulzusmomentum sajátfüggvénye, melyet a huszonharmadik fejezet 9. §-ban határoztunk meg. Alkalmazzuk a (6.3)-ban fellépő $(\boldsymbol{\sigma}\ \mathrm{grad})$ operátort a (6.4) kifejezésre:

$$(\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{grad})\,\phi = (\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{grad})\left(\frac{1}{r}\,R(r)F_{ljm_j}\right) =$$

$$= \left(\frac{1}{r}\,\frac{dR}{dr} - \frac{1}{r^2}\,R\right)\frac{(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{r})}{r}\,F_{ljm_j} + \frac{1}{r}\,R(\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{grad})\,F_{ljm_j}.$$

Felhasználva, hogy az F_{ljm_j} impulzusmomentum sajátfüggvények kielégítik a következő relációkat:

$$\frac{\boldsymbol{\sigma}\mathbf{r}}{r}\,F_{ljm_j} = -\,F_{Ljm_j},$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{grad})\,F_{ljm_j} = -\,\frac{1+\beta}{r}\,F_{Ljm_j}, \tag{26.6.5}$$

ahol

$$L = 2j - l \quad \text{és} \quad \beta = (-1)^{(j-l+\frac{1}{2})}\left(j + \frac{1}{2}\right), \tag{26.6.6}$$

kapjuk, hogy

$$(\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{grad})\,\phi = -\,\frac{1}{r}\left(\frac{dR}{dr} + \frac{\beta}{r}\,R\right)F_{Ljm_j}. \tag{26.6.7}$$

Beírva ezt (6.3) második egyenletébe, láthatjuk, hogy a χ komponenst a következő alakban kell felvennünk:

$$\chi = \frac{i}{r}\,P(r)F_{Ljm_j}, \tag{26 6.8}$$

ahol $P(r)$ a következő egyenletnek tesz eleget:

$$\left(-m_0c^2 + V(r) - E\right)P + \frac{hc}{2\pi}\left(\frac{dR}{dr} + \frac{\beta}{r}R\right) = 0. \qquad (26.6.9)$$

Ha viszont (6.4)-et és (6.8)-at (6.3) első egyenletébe írjuk be és felhasználjuk, hogy χ-re fennáll a (6.7)-tel analóg

$$(\sigma \operatorname{grad})\,\chi = -\frac{i}{r}\left(\frac{dP}{dr} - \frac{\beta}{r}P\right)F_{ljm_j} \qquad (26.6.10)$$

reláció, akkor a következő egyenletre jutunk:

$$\left(m_0c^2 + V(r) - E\right)R - \frac{hc}{2\pi}\left(\frac{dP}{dr} - \frac{\beta}{r}P\right) = 0. \qquad (26.6.11)$$

A sajátértékproblémát tehát a (6.9) és (6.11) egyenletekből álló differenciálegyenletrendszer megoldására sikerült visszavezetni. Ezekben az egyenletekben szereplő $R(r)$ és $P(r)$ radiális hullámfüggvények már csak az r koordinátától függenek, a szögváltozóktól és a spinkoordinátától tehát megszabadultunk.

A $\psi = \begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}$ sajátfüggvénynek a szögváltozóktól és a spinkoordinátától való függését (6.4) és (6.8) szerint a teljes impulzusmomentum F_{ljm_j} és F_{Ljm_j} sajátfüggvényei írják le. E két függvény az **N** pályaimpulzusmomentum négyzetének különböző sajátértékéhez tartozik: $\mathbf{N}^2$ sajátértéke az első esetben $\frac{h^2}{4\pi}\,l(l+1)$, a másodikban $\frac{h^2}{4\pi}\,L(L+1)$. Ez azt jelenti, hogy a

$$\psi = \begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix}R(r)F_{ljm_j}\\ P(r)F_{Ljm_j}\end{pmatrix} \qquad (26.6.12)$$

sajátfüggvény nem lesz sajátfüggvénye $\mathbf{N}^2$-nek, tehát $\mathbf{N}^2$-nek inincs határozott értéke a ψ állapotban. Ebből látható, hogy az elektron **J** impulzusmomentumának felbontása az **N** pályamenti részre és az **S** spinre, a relativisztkus elméletben csak korlátozott fizikai értelemmel bír. Az l mellékkvantumszám nem a pályaimpulzusmomentumot adja meg, hanem csupán a j és m_j adott értékével jellemzett két, egymástól független hullámfüggvénynek megkülönböztető jelölésére szolgál.

Az l mellékkvantumszám jelentésének tisztázása céljából hajtsuk végre a (6.12) sajátfüggvényen a tértükrözés műveletét. (4.19) szerint kapjuk, hogy

$$\psi' = \frac{i}{r}\begin{pmatrix}R(r)F_{ljm_j}(-\mathbf{r})\\ -P(r)F_{Ljm_j}(-\mathbf{r})\end{pmatrix}.$$

Mivel F_{ljm_j} (23.9.21) szerint az Y_{lm} gömbfüggvényt tartalmazza és $Y_{lm}(-\mathbf{r}) = (-1)^l Y_{lm}(\mathbf{r})$, továbbá $(-1)^{L+1} = (-1)^l$, ezért írhatjuk, hogy

$$\psi' = i(-1)^l\psi. \qquad (26.6.13)$$

Az energia ψ sajátfüggvénye tehát a tértükrözés operátorának is sajátfüggvénye, a megfelelő sajátérték, amit ψ *paritásának* nevezünk, $\mathcal{S} = i(-1)^l$ lesz. A j és m_j kvantumszámok adott értékeihez tartozó, $l = j \pm 1/2$ két különböző értékével jellemzett két állapot a paritásban különbözik egymástól.

Térjünk vissza a (6.9), (6.11) radiális egyenletekhez. Az egyenletek megoldásánál célszerű dimenzió nélküli mennyiségekkel dolgozni. Ebből a célból vezessük be a következő, reciprok-hossz dimenziójú állandókat:

$$\lambda_1 = \frac{2\pi(m_0c^2 + E)}{hc}, \qquad \lambda_2 = \frac{2\pi(m_0c^2 - E)}{hc},$$
$$\lambda = \sqrt{\lambda_1\lambda_2} = \frac{2\pi\sqrt{(m_0c^2)^2 - E^2}}{hc}, \tag{26.6.14}$$

majd az r radiális változó és a $V(r)$ potenciál helyett vezessük be a

$$\rho = \lambda r \quad \text{és} \quad U(\rho) = \frac{2\pi}{hc\lambda} V(r) \tag{26.6.15}$$

dimenziónélküli mennyiségeket. Ekkor (6.9) és (6.11) a következő egyszerű alakot nyeri:

$$\left(\frac{d}{d\rho} + \frac{\beta}{\rho}\right) R(\rho) - \left(\frac{\lambda_1}{\lambda} - U(\rho)\right) P(\rho) = 0,$$
$$\left(\frac{d}{d\rho} - \frac{\beta}{\rho}\right) P(\rho) - \left(\frac{\lambda_2}{\lambda} + U(\rho)\right) R(\rho) = 0. \tag{26.6.16}$$

Ezeknek az egyenleteknek megoldása és a sajátértékek meghatározása általában semmilyen elvi nehézséggel nem jár.

Az alábbiakban a hidrogénatom energiasajátértékeit fogjuk meghatározni. A mag *Coulomb*-potenciálja (23.14.1) szerint

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r},$$

a (6.15) alatti potenciálfüggvény pedig

$$U(\rho) = -\frac{\alpha}{\rho} \tag{26.6.17}$$

lesz, ahol

$$\alpha = \frac{2\pi Ze^2}{hc} = \frac{Z}{137{,}02}$$

az ún. *finomszerkezeti állandó*. Ha az R és P radiális függvényeket az

$$R(\rho) = g(\rho)e^{-\rho} \quad \text{és} \quad P(\rho) = f(\rho)e^{-\rho}$$

kifejezésekkel helyettesítjük, akkor (6.16) a következő egyenleteket adja:

$$\begin{aligned} \frac{dg}{d\rho} + \left(\frac{\beta}{\rho} - 1\right) g - \left(\frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{\alpha}{\rho}\right) f = 0, \\ \frac{df}{d\rho} - \left(\frac{\beta}{\rho} + 1\right) f - \left(\frac{\lambda_2}{\lambda} - \frac{\alpha}{\rho}\right) g = 0. \end{aligned} \tag{26.6.18}$$

Ezeket az egyenleteket a huszonharmadik fejezetben megismert polinom módszerrel oldjuk meg. Keressük f-et és g-t a következő alakban:

$$f(\rho) = \rho^s \sum_{p=0}^{n_r} a_p \rho^p \quad \text{és} \quad g(\rho) = \rho^s \sum_{p=0}^{n_r} b_p \rho^p, \tag{26.6.19}$$

ahol $a_0 \neq 0$ és $b_0 \neq 0$, ami azt jelenti, hogy f és g kifejezésében az első el nem tűnő hatvány kitevője s, a legmagasabb hatvány pedig $s + n_r$ lesz. Helyettesítsük (6.19)-et (6.18)-ba és az így kapott egyenleteket rendezzük ρ hatványai szerint:

$$\begin{aligned} &[(s+\beta)b_0 - \alpha a_0] + \sum_{p=1}^{n_r} \left[(p+s+\beta)b_p - b_{p-1} - \alpha a_p - \frac{\lambda_1}{\lambda} a_{p-1}\right] \rho^p - \\ &- \left[b_{n_r} + \frac{\lambda_1}{\lambda} a_{n_r}\right] \rho^{n_r+1} = 0, \\ &[(s-\beta)a_0 + \alpha b_0] + \sum_{p=1}^{n_r} \left[(p+s+\beta)a_p - a_{p-1} + \alpha b_p \frac{\lambda_2}{\lambda} b_{p-1}\right] \rho^p - \\ &- \left[a_{n_r} + \frac{\lambda_2}{\lambda} b_{n_r}\right] \rho^{n_r+1} = 0. \end{aligned}$$

Ezek az egyenletek akkor teljesülnek ρ minden értékére, ha ρ egyes hatványainak együtthatói külön-külön nullával egyenlők. Ilymódon az a_p és b_p együtthatókra a következő egyenletek adódnak:

$$\left.\begin{aligned} (s+\beta)b_0 - \alpha a_0 = 0 \\ \alpha b_0 + (s-\beta)a_0 = 0 \end{aligned}\right\}, \tag{26.6.20}$$

$$\left.\begin{aligned} (p+s+\beta)\, b_p - \alpha a_p = b_{p-1} + \frac{\lambda_1}{\lambda} a_{p-1} \\ a b_p + (p+s-\beta) a_p = a_{p-1} + \frac{\lambda_2}{\lambda} b_{p-1} \end{aligned}\right\}, \quad (p = 1, 2, \ldots, n_r) \tag{26.6.21}$$

$$\left.\begin{aligned} b_{n_r} + \frac{\lambda_1}{\lambda} a_{n_r} = 0 \\ a_{n_r} + \frac{\lambda_2}{\lambda} b_{n_r} = 0 \end{aligned}\right\}. \tag{26.6.22}$$

A (6.20) egyenletrendszernek akkor létezik a triviálistól különböző megoldása, ha az a_0 és b_0 ismeretlenek együtthatóiból alkotott determináns zérus:

$$\begin{vmatrix} s+\beta & -\alpha \\ \alpha & s-\beta \end{vmatrix} = 0 .$$

Ebből az s hatványkitevő kiszámítható

$$s = \sqrt{\beta^2 - \alpha^2} = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}. \qquad (26.6.23)$$

A (6.19) függvények regularitása megköveteli, hogy (6.23)-ban a pozitív előjelet válasszuk.

A (6.21) egyenletek az a_p, b_p együtthatók rekurzív meghatározását teszik lehetővé. A b_p/a_p viszonyt úgy kaphatjuk meg a legegyszerűbben, ha (6.21) első egyenletét λ-val, a másodikat λ_1-gyel megszorozzuk és az így adódó egyenleteket egymásból kivonjuk. Mivel (6.14) szerint $\frac{\lambda_1}{\lambda} = \frac{\lambda}{\lambda_2}$, ezért a jobboldalon zérust kapunk:

$$[\lambda(p+s+\beta) - \lambda_1\alpha]b_p - [\lambda\alpha + \lambda_1(p+s-\beta)]a_p = 0,$$

amiből:

$$\frac{b_p}{a_p} = \frac{\lambda(p+s-\beta) + \lambda\alpha}{\lambda(p+s+\beta) - \lambda_1\alpha}. \qquad (p = 1, 2, \ldots, n_r) \qquad (26.6.24)$$

Végül vizsgáljuk meg a (6.22) egyenleteket. A $\lambda_1/\lambda = \lambda/\lambda_2$ reláció miatt ezek mindegyike a

$$\frac{b_{n_r}}{a_{n_r}} = -\frac{\lambda_1}{\lambda} \qquad (26.6.25)$$

eredményre vezet. Vessük ezt össze (6.24)-nek a p_{n_r} esetre specializált alakjával:

$$\frac{\lambda_1(n_r+s-\beta) + \lambda\alpha}{\lambda(n_r+s+\beta) - \lambda_1\alpha} = -\frac{\lambda_1}{\lambda}.$$

Ebből egyszerű átalakítással a következő relációt kapjuk:

$$2\lambda(n_r + s) = \alpha(\lambda_1 - \lambda_2). \qquad (26.6.26)$$

Beírva ide λ_1, λ_2 és λ (6.14) kifejezéseit, az E energiasajátértéket meghatározó egyenlethez jutunk:

$$(n_r + s)\sqrt{(m_0c^2)^2 - E^2} = \alpha E .$$

Ez az egyenlet könnyen megoldható E-re:

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \dfrac{\alpha^2}{(n_r + s)^2}}} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \dfrac{\alpha^2}{\left(n_r + \sqrt{\left(j + \dfrac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}\right)^2}}}. \qquad (26.6.27)$$

Ez a képlet számot ad a hidrogénszínkép finomszerkezetéről és igen nagy pontossággal egyezik a tapasztalattal. (Ugyanezt az energiaképletet vezette le SOMMERFELD (1916) a *Bohr*-féle kvantumfeltételek alapján is.) Ha (6.27)-et sorba fejtjük α^2 hatványai szerint, úgy α^4-ig bezárólag a következő tagokat kapjuk:

$$E = m_0 c^2 \left[1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} + \frac{\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j + \dfrac{1}{2}}\right)\right], \qquad (26.6.28)$$

ahol

$$n = n_r + j + \frac{1}{2} \qquad (26.6.29)$$

a főkvantumszám. A finomszerkezeti állandó képletének behelyettesítése után (6.28) a következő lesz:

$$E = m_0 c^2 - \frac{2\pi^2 m_0 Z^2 e^4}{h^2}\frac{1}{n^2} + \frac{6\pi^4 m_0 Z^4 e^8}{h^4 c^2}\frac{1}{n^4} - \frac{8\pi^4 m_0 Z^4 e^8}{h^4 c^2}\frac{1}{n^3\left(j + \dfrac{1}{2}\right)}. \qquad (26.6.30)$$

E sor első tagja az elektron nyugalmi energiáját adja meg, a második tag azonos a nemrelativisztikus (23.14.18) *Balmer*-féle energiakifejezéssel. A további tagok írják le a színképben jelentkező relativisztikus effektusokat. (6.30) harmadik tagja az energianívók kismértékű eltolódásáról ad számot, aminek fizikai oka a relativisztikus tömegnövekedés. A negyedik tag az n főkvantumszámon kívül j-t is tartalmazza, tehát egy adott n főkvantumszám esetén a különböző j impulzusmomentumú állapotok energiái különbözőek, az energiatermek felhasadnak. A legalacsonyabban fekvő nívót j lehető legkisebb értékénél, $j = 1/2$-nél kapjuk, a legmagasabban fekvőt pedig j maximális értékénél, ami (6.29) szerint $j = n - 1/2$. A felhasadás szélessége tehát

$$\frac{8\pi^4 m_0 Z^4 e^8}{h^4 c^2}\left(\frac{1}{n^3} - \frac{1}{n^4}\right) = \frac{8\pi^4 m_0 Z^4 e^8}{h^4 c^2}\frac{n-1}{n^4}$$

lesz. Ez négy nagyságrenddel kisebb, mint a *Balmer*-féle energiatag.

Nemcsak a sorfejtett (6.30) energiaképletnek, hanem az egzakt (6.27)-nek is jellemző sajátsága, hogy benne csak két kvantumszám, n és j szerepel, az l mellékkvantumszám külön nem. Adott n és j esetén két különböző l értékű (különböző paritású) állapot lehetséges $l = j \pm 1/2$-nek megfelelően. E két állapot energiája pontosan megegyezik, tehát az energiatermek degeneráltak. Példaként nézzük

az $n = 3$ főkvantumszám esetét. Ehhez l és j különböző lehetséges értékeinek megfelelően összesen öt állapot tartozik, melyeket az alábbi táblázatban sorolunk fel:

	n_r	l	j
$3d_{5/2}$	0	2	5/2
$3d_{3/2}$	1	2	3/2
$3p_{3/2}$	1	1	3/2
$3p_{1/2}$	2	1	1/2
$3s_{1/2}$	2	0	1/2

Mivel az azonos j kvantumszámú állapotok energiája egyenlő, ezért az $n = 3$-as nívó finomszerkezetében három energiaterm fog jelentkezni.

*

Sokszor elegendő a relativisztikus effektusoknak $1/c^2$ nagyságrendig való figyelembevétele. Az erre az esetre vonatkozó hullámegyenlet levezetése céljából az E energiából válasszuk le az m_0c^2 nyugalmi energiát:

$$E = m_0c^2 + E', \tag{26.6.31}$$

majd (6.2) második egyenletéből fejezzük ki χ-t,

$$\chi = (2m_0c^2 + E' - V(r))^{-1}c(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\phi$$

és ezt helyettesítsük be (6.2) első egyenletébe. Rendezés után kapjuk:

$$\left\{\frac{1}{2m_0}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\left(1+\frac{E'-V(r)}{2m_0c^2}\right)^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})+V(r)\right\}\phi = E'\phi. \tag{26.6.32}$$

Ez az egyenlet még semmilyen közelítést nem tartalmaz, belőle a *Dirac*-egyenlet egzakt sajátértékei számíthatók ki.

A relativisztikus effektusoknak a kívánt közelítésben való figyelembevételéhez a baloldalon álló energiaoperátort fejtsük sorba $1/c^2$ szerint és álljunk meg a sorfejtés elsőrendű tagjánál. Ekkor

$$\left(1+\frac{E'-V(r)}{2m_0c^2}\right)^{-1} = 1-\frac{E'-V}{2m_0c^2}$$

lesz és a (6.32) sajátértékegyenlet a következőképpen alakul:

$$\left\{\frac{1}{2m_0}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})^2-\frac{1}{4m_0^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\left(E'-V(r)\right)(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})+V(r)\right\}\phi = E'\phi.$$

Felhasználva itt a

$$\mathbf{p}V(r) - V(r)\mathbf{p} = \frac{h}{2\pi i}\operatorname{grad} V(r) = \frac{h}{2\pi i}\frac{\mathbf{r}}{r}\frac{dV}{dr}$$

csererelációt, valamint a (3.16) algebrai egyenlőséget, kapjuk, hogy

$$\left\{\frac{p^2}{2m_0} - \frac{(E' - V(r))p^2}{4m_0^2c^2} - i\frac{h}{8\pi m_0^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(\mathbf{rp} + i\sigma[\mathbf{r}, \mathbf{p}]) + V(r)\right\}\phi = E'\phi .$$

A második tagban fellépő $(E' - V)$-t a nemrelativisztikus kinetikus energiával, $\frac{p^2}{2m_0}$-lal azonosíthatjuk. Felhasználva még az

$$\mathbf{rp} = \frac{h}{2\pi i} r \frac{\partial}{\partial r}$$

operátor-egyenlőséget és bevezetve a pályaimpulzusmomentum és a spin

$$\mathbf{N} = [\mathbf{r}, \mathbf{p}], \quad \mathbf{S} = \frac{h}{4\pi}\sigma$$

operátorait, egyenletünk a következő végső formát nyeri:

$$\left\{\frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3c^2} + V(r) - \frac{h^2}{16\pi^2m_0^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m_0^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{NS}\right\}\phi = E'\phi . \tag{26.6.33}$$

Az első és a harmadik tag a nemrelativisztikus *Hamilton*-operátorral egyenlő, ezek a közönséges *Schrödinger*-egyenletre vezetnek. A második tag a relativisztikus tömegnövekedést írja le, ezt a tagot az (1.1) energiakifejezés sorbafejtéséből származtathatjuk:

$$H = \sqrt{(m_0c^2)^2 + c^2p^2} = m_0c^2 + \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3c^2} + \ldots .$$

(6.33) negyedik tagja a potenciális energia mellett fellépő relativisztikus korrekció, melynek nincs klasszikus megfelelője. Mivel ez a tag nem vezet az energianívók felhasadására, ezért kísérleti kimutatása igen nehéz. Végül a (6.33) baloldalán fellépő utolsó tag a (24.5.4) spin-pálya kölcsönhatással azonos. Láttuk, hogy a spin-pálya kölcsönhatás az energianívók (24.5.11) szerinti dublettfelhasadására vezet, ami különösen az alkáli atomok színképében mutatható ki jól. Láttuk azt is (huszonnegyedik fejezet, 6. §), hogy a spin-pálya kölcsönhatás felelős az anomális *Zeeman*-effektusért.

HUSZONHETEDIK FEJEZET

LINEÁRIS VEKTORTEREK A KVANTUMELMÉLETBEN. MÁTRIXMECHANIKA

1. §. Bevezetés

A mátrixmechanikát néhány hónappal SCHRÖDINGER hullámmechanikája előtt HEISENBERG alapozta meg és BORNnal és JORDANnal együtt dolgozta ki. Az elmélet, melyben a fizikai mennyiségek mátrixokkal lesznek interpretálva, melyek egy sajátos algebrának tesznek eleget, eleinte kevés tetszést aratott. Ez annál is inkább érthető, mert az elmélet igen elvont és semmiféle fizikai szemléletességre nem törekedett. Valójában azonban éppen azáltal, hogy az elmélet figyelembe veszi azt, hogy a megfigyelések pontosságának elvi határai vannak (*Heisenberg*-féle határozatlansági reláció), a mátrixmechanika sokkal közelebb áll a valósághoz, mint az atomokra alkalmazott klasszikus mechanika, még ha ezt ki is egészítjük a *Bohr*-féle kvantálási feltételekkel.

Később aztán kitűnt, hogy a mátrixmechanika lényegében ugyanazt mondja, mint a statisztikailag értelmezett hullámmechanika és a két elmélet tulajdonképpen ugyanannak az elméletnek különböző megjelenési formája. A hullámmechanika speciális problémák tárgyalására sokszor sokkal alkalmasabb, mint a mátrixmechanika, ez utóbbi viszont az általános elvi összefüggések levezetésére és ezáltal az elmélet alapjaiba való mélyebb betekintésre nyújt nagyobb segítséget.

Mi a következőkben a kvantumelméletnek egy olyan általános formáját fogjuk bemutatni, mely speciális esetként tartalmazza mind a *Schrödinger*-féle hullámmechanikát, mind pedig a *Heisenberg*-féle mátrixmechanikát. Hogy az elmélet alapgondolatát megvilágítsuk, térjünk vissza röviden a hullámmechanikai leírásmódhoz. Láttuk, hogy a hullámmechanikában egy általános állapotot egy ψ állapotfüggvénnyel lehet jellemezni. Hogy ez a ψ függvény milyen változók függvénye, az a rendszer fizikai természetétől függ. Például a huszonkettedik fejezet 10. §-ában megbeszéltek szerint az $\frac{1}{2}$-es spinű elektron állapotát leíró függvény az x, y, z és s koordinátáktól függ. Ezek között vannak olyanok, melyek értékkészlete folytonos, és van olyan is, melynek értékkészlete véges számú diszkrét értékből áll. Az elsőre példa lehet az x koordináta, mely $-\infty$-től $+\infty$-ig folytonosan változik, a második esetre példa az s spinkoordináta, mely csak a $+1$ és -1 értékeket veheti fel. A kvantumelmélet általános megfogalmazásánál ψ-t egy általános értelemben vett vektornak tekintjük, mely olyan koordinátarendszerben van értelmezve, melynek tengelyeit a ψ függvény független változóinak lehetséges értékei jellemzik, a ψ függvény értékeit pedig a vektor komponenseinek tekintjük. Igen egyszerű példaként tekintsük azt az esetet, amikor a független változókból csak egyetlen s spinkoordinátát kell tekintetbe vennünk. Ekkor a $\psi(s)$ függvény

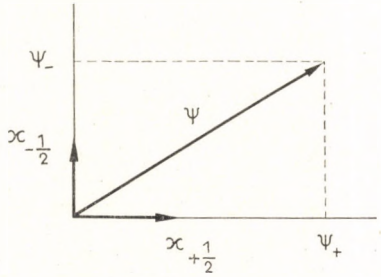
egy kétkomponensű vektornak tekinthető; a komponensek

$$\psi_+ = \psi(s = +1) \quad \text{és} \quad \psi_- = \psi(s = -1) \tag{27.1.1}$$

lesznek. Maga a ψ vektor felépíthető a (22.10.3) $\chi_{\pm\frac{1}{2}}$ spinorokból, amelyek most a koordinátatengelyek irányába mutató egységvektorok szerepét veszik át.

$$\psi = \psi_+ \chi_{+\frac{1}{2}} + \psi_- \chi_{-\frac{1}{2}}. \tag{27.1.2}$$

Természetesen nem szabad megfeledkeznünk arról, hogy a szemléltető 97. ábra túlságosan leegyszerűsíti a helyzetet, hiszen ψ_+ és ψ_- komplex számok is lehetnek és ezért ψ-t nem lehet grafikusan ábrázolni. Ennek ellenére a állapotvektorokkal kapcsolatban igen sokszor fogjuk használni a geometriai nyelvezetet, de geometriai szemléletességre nem törekedhetünk. Viszont mindig világosan kell látnunk a bevezetett fogalmak fizikai jelentését. Pl. az (1.2) vektor esetében a ψ_+ és ψ_- komponensek abszolút értékeinek négyzetei, tehát $|\psi_+|^2$ és $|\psi_-|^2$ adják meg annak valószínűségét, hogy a spinvetület pozitív vagy negatív előjelű lesz-e.



97. ábra. A spin állapotok reprezentálása

Ha a ψ állapotfüggvény egy folytonosan változó x koordináta függvénye, akkor az a koordinátarendszer, ahol ψ vektornak fogható fel, megszámlálhatatlanul sok tengellyel rendelkezik. Ilyen esetben is megtartjuk a geometriai terminológiánkat, mert a közönséges geometriával való analógia megmarad a megszámlálhatatlanul sok dimenziós tér esetében is.

Mielőtt a kvantumelmélet általános formáját bemutatnánk, néhány fontos matematikai fogalommal és tétellel kell megismerkednünk, melyeket a következő §-ban foglalunk össze.

2. §. Az állapotvektorok és az operátorok matematikai tulajdonságai

Egy fizikai rendszer állapotait leíró ψ vektorok összességét *vektortér*nek fogjuk nevezni. E vektortér egyes vektorai között az alábbi műveletek vannak értelmezve.

Az összeadás, mely kommutatív és asszociatív:

$$\psi_1 + \psi_2 = \psi_2 + \psi_1,$$

$$(\psi_1 + \psi_2) + \psi_3 = \psi_1 + (\psi_2 + \psi_3). \tag{27.2.1}$$

Egy vektor és egy komplex szám szorzata, melyet így jelölünk: $c\psi$. E művelet asszociatív és disztributív a következő értelemben:

$$c_1(c_2\psi) = (c_1c_2)\psi,$$

$$(c_1 + c_2)\psi = c_1\psi + c_2\psi, \tag{27.2.2}$$

$$c(\psi_1 + \psi_2) = c\psi_1 + c\psi_2.$$

Az összeadás és a számmal való szorzás műveleteinek felhasználásával képezhetjük a vektorok lineáris kombinációját

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \ldots + c_k\psi_k. \tag{27.2.3}$$

A kvantumelméleti szóhasználat szerint az így kapott ψ állapotot az egyes ψ_1, $\psi_2, \ldots, \psi_k$ állapotok szuperpozíciójának nevezzük.

A $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_k$ vektorokat lineárisan függetlennek nevezzük akkor, ha a

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \ldots + c_k\psi_k = 0$$

reláció csak úgy áll fenn, ha valamennyi együttható zérussal egyenlő:

$$c_1 = c_2 = \ldots = c_k = 0.$$

A vektorteret n-dimenziósnak nevezzük akkor, ha találunk benne n számú lineárisan független vektort, de akárhogy is választunk ki $n + 1$ számú vektort, azok már nem lineárisan függetlenek. A kvantumelméleti tárgyalások során sokszor találkozunk véges n dimenziós vektorterekkel, de éppen ilyen fontos az $n \to \infty$ eset, amikor a vektortér megszámlálhatóan végtelen dimenziójú, sőt előfordul az is, hogy az állapotvektorok terének dimenziója megszámlálhatatlanul (folytonosan) végtelen.

Egy n dimenziós tér n számú lineárisan független vektorát a vektortér egy bázisának tekintjük. Ha a bázisvektorokat $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$-el jelöljük, úgy fennáll, hogy a vektortér bármely vektora a bázisvektorok lineáris kombinációjaként állítható elő.

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i\psi_i. \tag{27.2.4}$$

Egy ilyen előállítás mindig egyértelmű, mert ha

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i\psi_i \qquad \text{és} \qquad \psi = \sum_{i=1}^{n} \tilde{c}_i\psi_i$$

ugyanazt a ψ vektort eredményezné, úgy különbségük

$$\sum_{i=1}^{n} (c_i - \tilde{c}_i)\psi = 0$$

lenne és ez a ψ_i vektorok lineáris függetlensége miatt csak úgy teljesülne, ha $c_i = \tilde{c}_i$.

Bevezetjük az állapotvektorok skaláris szorzatának fogalmát. Ha az állapotvektorokat mint az $x = (x_1, \ldots, x_p)$ koordináták függvényeit fogjuk fel, akkor a ψ_1 és ψ_2 vektorok skaláris szorzatát a következő művelettel értelmezzük.

$$(\psi_1, \psi_2) = \int \psi_1^* \psi_2 dx. \tag{27.2.5}$$

Itt az x szerinti integrálás valamennyi folytonosan változó koordináta szerinti integrálást és valamennyi diszkrétül változó koordináta szerinti összegezést jelent. Feltételezzük, hogy a (2.5) integrál bármely két ψ_1 és ψ_2 állapot esetén létezik és véges.

A skaláris szorzásnak négy alapvetően fontos tulajdonsága van:

$$\begin{aligned} (\psi_1, \psi_2) &= (\psi_2, \psi_1)^*, \\ (\psi_1, \psi_2 + \psi_3) &= (\psi_1, \psi_2) + (\psi_1, \psi_3), \\ (\psi_1, c\psi_2) &= c(\psi_1, \psi_2), \\ (\psi, \psi) &\geq 0. \end{aligned} \tag{27.2.6}$$

Az utóbbinál az egyenlőségjel akkor és csakis akkor áll fenn, ha $\psi = 0$.

Az első két tulajdonság kombinálásával a

$$(\psi_1 + \psi_2, \psi_3) = (\psi_1, \psi_2) + (\psi_1, \psi_3) \tag{27.2.7}$$

szabályt, az első és a harmadik tulajdonság kombinálásával pedig a

$$(c\psi_1, \psi_2) = c^*(\psi_1, \psi_2) \tag{27.2.8}$$

szabályt vezethetjük le.

Ortogonálisnak nevezünk két vektort, ha skaláris szorzatuk zérus: $(\psi_a, \psi_b) = 0$. Egy vektor normája alatt a $||\psi|| = \sqrt{(\psi, \psi)}$ mennyiséget értjük. Az egységnyi normájú vektorokat egységnyire normáltaknak, vagy röviden normáltaknak nevezzük.

A vektorok legfontosabb tulajdonságainak áttekintése után az operátorok matematikai tulajdonságait kell megbeszélnünk. Az operátor – a legáltalánosabb definíció szerint – olyan művelet, mely a vektortér minden vektorához egy másik vektort rendel. Ha az A operátor a ψ vektorhoz a ψ' vektort rendeli, azt így jelöljük

$$\psi' = A\psi. \tag{27.2.9}$$

Lineárisnak nevezünk egy operátort, ha bármely két ψ_1, ψ_2 vektor és tetszőleges c_1, c_2 komplex számok esetén

$$A(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(A\psi_1) + c_2(A\psi_2). \tag{27.2.10}$$

A kvantumelméletben szinte kivétel nélkül csak ilyen lineáris operátorokkal dolgozunk, úgyhogy az alábbiakban operátor alatt mindig lineáris operátort értünk akkor is, ha ezt nem emeljük ki külön.

Két operátort akkor nevezünk egyenlőnek, ha a hatásuk a tekintett vektortér minden vektorára ugyanaz. Tehát ha $A\psi = B\psi$ bármely ψ-re, akkor

$$A = B. \tag{27.2.11}$$

Két operátor összegét a disztributivitás megkövetelésével értelmezzük, azaz az $A + B$ operátorra definíció szerint teljesül, hogy

$$(A + B)\psi = A\psi + B\psi. \tag{27.2.12}$$

Két operátor szorzatát pedig az asszociativitás törvényével definiáljuk

$$(AB)\psi = A(B\psi). \tag{27.2.13}$$

Az operátorok szorzásának ezen definíciója szerint az operátorszorzás asszociatív:

$$(AB)C = A(BC) = ABC. \tag{27.2.14}$$

Viszont ki kell emelnünk, hogy az operátorszorzás definíciójából nem következik a szorzás kommutatív volta, azaz általában

$$AB \neq BA. \tag{27.2.15}$$

Az AB és BA szorzatok különbségét,

$$AB - BA$$

-t a két operátor kommutátorának nevezzük.

Az alábbiakban néhány speciális típusú operátorral fogunk megismerkedni. A legtriviálisabb operátor az, amelyik mindegyik vektorhoz önmagát rendeli hozzá. Ezt az operátort egységoperátornak nevezzük, jele 1:

$$1\psi = \psi. \tag{27.2.16}$$

A $c1$ operátor, ahol c egy (komplex) szám, a ψ vektorhoz a $c\psi$ vektort rendeli. Ezért $c1$ helyett egyszerűen c-t írunk.

Egy igen fontos típusa a lineáris operátoroknak az ún. projekciós operátorok. Legyen ψ_e egy fix vektora vektorterünknek, melyről feltesszük, hogy egységnyire normált. A P_e projekciós operátort a következőképpen értelmezzük:

$$P_e\psi = (\psi_e, \psi)\psi_e. \tag{27.2.17}$$

A projekciós operátor minden ψ vektorhoz egy olyan vektort rendel, mely arányos ψ_e-vel. A projekciós operátoroknak alapvetően fontos matematikai tulajdonságuk az, hogy idempotensek, ami alatt az

$$P_e^2 = P_e \tag{27.2.18}$$

reláció teljesülését értjük. Ennek igazolása a következőképpen történik.

$$P_e^2\psi = (P_eP_e)\psi = P_e(P_e\psi) = P_e(\psi_e, \psi)\psi_e = (\psi_e, \psi)(\psi_e, \psi_e)\psi_e.$$

Mivel ψ_e normált, ezért $(\psi_e, \psi_e) = 1$, tehát

$$P_e^2\psi = (\psi_e, \psi)\psi_e = P_e\psi\,.$$

Mivel ez minden ψ vektorra igaz, ezért fennáll a (2.18) reláció.

Bevezetjük egy operátor adjungáltjának fogalmát. Egy A operátor adjungáltját A^+-val jelöljük és a következőképpen értelmezzük: a

$$(\psi_1, A\psi_2) = (A^+\psi_1, \psi_2) \tag{27.2.19}$$

relációnak igaznak kell lennie a vektortér bármely két ψ_1, ψ_2 vektorára. (2.6) első relációjából azonnal következik, hogy ha A^+ az A operátor adjungáltja, akkor A^+ adjungáltja A lesz, tehát A és A^+ kölcsönösen adjungáltak. Nézzünk egy triviális példát. Legyen az A operátor egy c komplex számmal való szorzás. Akkor (2.6) harmadik relációja, valamint (2.8) alapján írhatjuk, hogy

$$(\psi_1, c\psi_2) = c(\psi_1, \psi_2) = (c^*\psi_1, \psi_2)\,.$$

Ebből látszik, hogy c adjungáltja c^* lesz, tehát egy számmal való szorzás esetén az adjungált művelet a konjungált komplex számmal való szorzás. Ezért az adjungálást a konjugált komplex képzés általánosításának foghatjuk fel.

A kvantumelméletben kiemelkedően fontos szerepet játszik az operátorok két típusa. Az egyik típus az ún. hermitikus operátor, mely sajátmaga adjungáltjával egyenlő. Tehát F akkor hermitikus, ha

$$F^+ = F. \tag{27.2.20}$$

A hermitikus operátort éppen ezért önadjungáltnak is szokták nevezni.

A másik fontos típus az ún. unitér operátor. Egy U operátort akkor nevezünk unitérnek, ha

$$U^+U = UU^+ = 1\,. \tag{27.2.21}$$

A hermitikus operátorokra két elemi tételt vezetünk le. Legyen F és G két tetszőleges hermitikus operátor és ψ_1, ψ_2 két tetszőleges vektor. Akkor fennáll, hogy

$$(\psi_1, FG\psi_2) = (F\psi_1, G\psi_2) = (GF\psi_1, \psi_2)\,.$$

Az adjungált operátor definíciója szerint tehát

$$(FG)^+ = GF. \tag{27.2.22}$$

Az F és G hermitikus operátorok szorzata csak akkor hermitikus, ha $GF = FG$, vagyis ha a két operátor felcserélhető.

A másik tétel levezetéséhez képezzük a következő skaláris szorzatot:

$$I(\xi) = \big((F + i\xi G)\psi,\ (F + i\xi G)\psi\big)\,, \tag{27.2.23}$$

melyben F és G két tetszőleges hermitikus operátor, ψ egy tetszőleges vektor és ξ egy tetszőleges valós szám. Mivel az $F + i\xi G$ operátor adjungáltja nyilván $F - i\xi G$ lesz, ezért (2.23) így is felírható.

$$I(\xi) = \big(\psi, (F - i\xi G)\,(F + i\xi G)\psi\big),$$

vagyis:

$$I(\xi) = (\psi, F^2\psi) + i\xi\big(\psi, (FG - GF)\psi\big) + \xi^2(\psi, G^2\psi). \tag{27.2.24}$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\begin{aligned} a &= (\psi, F^2\psi) = (F\psi, F\psi), \\ b &= i(\psi, (FG - GF)\psi) = i\big[(F\psi, G\psi) - (F\psi, G\psi)^*\big], \\ c &= (\psi, G^2\psi) = (G\psi, G\psi). \end{aligned} \tag{27.2.25}$$

E definíciókból következik, hogy a, b és c mind valós számok, sőt a és c nemnegatívok. A (2.23) definíció szerint $I(\xi)$ minden ξ-re valós és nemnegatív. Figyelembe véve (2.24)-et, kapjuk:

$$I(\xi) = a + b\xi + c\xi^2 \geq 0.$$

Az elemekből tudjuk, hogy ez az egyenlőtlenség minden ξ-re akkor teljesül, ha

$$b^2 - 4ac \geq 0,$$

vagyis

$$ac \geq \frac{1}{4} b^2.$$

Beírva ide a, b és c (2.25) kifejezéseit, a következő fontos egyenlőtlenséget kapjuk:

$$(\psi, F^2\psi)\ (\psi, G^2\psi) \geq \frac{1}{4} \left| \big(\psi, (FG - GF)\psi\big) \right|^2. \tag{27.2.26}$$

Részletesen foglalkoznunk kell az operátorok sajátértékproblémájával. Egy A operátor sajátvektorainak azokat a vektorokat nevezzük, melyekhez A sajátmaguknak egy konstansszorosát rendeli hozzá. Jelöljük az A operátor sajátvektorait rendre $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_k, \ldots$-val, akkor fennáll, hogy

$$A\psi_k = a_k\psi_k, \tag{27.2.27}$$

ahol a_k egy szám. Ezt az a_k számot a ψ_k sajátvektorhoz tartozó sajátértéknek nevezzük.

Szorozzuk meg a (2.27) egyenletet egy tetszőleges c számmal:

$$cA\psi_k = A(c\psi_k) = a_k(c\psi_k).$$

Ebből nyilvánvaló, hogy ha ψ_k sajátvektora A-nak, akkor $c\psi_k$ is az lesz, méghozzá ugyanolyan sajátértékkel. A ψ_k és $c\psi_k$ sajátvektorokat általában nem tekintjük különbözőeknek, hanem azt mondjuk, hogy a sajátvektorok egy konstans szorzó erejéig határozatlanok. Ezt a konstans szorzó faktort azáltal tesszük határozottá,

hogy megállapodunk abban, hogy a sajátvektoroknak normáltaknak kell lenniük:

$$(\psi_k, \psi_k) = 1. \tag{27.2.28}$$

Természetesen előfordulhat, hogy az A operátor két vagy több, egymástól lineárisan független sajátvektorához ugyanaz a sajátérték tartozik. Ekkor a sajátértéket degeneráltnak nevezzük. Legyen az a_k sajátérték f-szeresen degenerált, azaz tartozzon hozzá f számú sajátvektor:

$$\begin{aligned} A\psi_{k1} &= a_k\psi_{k1}, \\ A\psi_{k2} &= a_k\psi_{k2}, \\ &\ldots\ldots\ldots \\ A\psi_{kf} &= a_k\psi_{kf}. \end{aligned}$$

Szorozzuk meg ezeket az egyenleteket rendre a $c_1, c_2, \ldots, c_f$ számokkal, majd adjuk őket össze. Kapjuk, hogy

$$A(c_1\psi_{k1} + c_2\psi_{k2} + \ldots + c_k\psi_{kf}) = a_k(c_1\psi_{k1} + c_2\psi_{k2} + \ldots + c_f\psi_{kf}).$$

Ebből látszik, hogy a lineárisan független $\psi_{k1}, \psi_{k2}, \ldots, \psi_{kf}$ sajátvektoroknak tetszőleges

$$c_1\psi_{k1} + c_2\psi_{k2} + \ldots + c_f\psi_{kf}$$

lineáris kombinációja is az a_k sajátértékhez tartozó sajátvektor lesz.

Elemi és fontos tétel, hogy a különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorok mindig lineárisan függetlenek. Ennek bizonyítása a következőképpen lehetséges. Tegyük fel, hogy $p-1$ sajátvektor lineárisan független, de a p-edik már lineárisan függ ezektől

$$\psi_p = \sum_{i=1}^{p-1} c_i\psi_i. \tag{27.2.29}$$

Akkor

$$A\psi_p = a_p\psi_p = a_p \sum_{i=1}^{p-1} c_i\psi_i = \sum_{i=1}^{p=1} c_i a_i\psi_i.$$

Mivel feltevésünk szerint a $\psi_1, \ldots, \psi_{p-1}$ vektorok lineárisan függetlenek, ezért az utolsó egyenlőség csak úgy állhat fenn, ha $a_p c_i = c_i a_i$, vagyis ha $a_p = a_i$. Ez viszont ellentmondásban van azzal a feltevésünkkel, hogy a sajátértékek különbözőek, amiből következik, hogy különböző sajátértékek esetén lehetetlen a (2.29) egyenlőség fennállása. Ezzel bebizonyítottuk, hogy a különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorok lineárisan függetlenek.

Külön kell még foglalkoznunk a hermitikus operátorok sajátértékeivel és sajátvektoraival. Írjuk fel egy F hermitikus operátor sajátértékegyenletét:

$$F\psi_k = f_k\psi_k. \tag{27.2.30}$$

Szorozzuk meg ezt az egyenletet skalárisan ψ_k-val, és tegyük fel, hogy ψ_k normált.

$$(\psi_k, F\psi_k) = f_k(\psi_k, \psi_k) = f_k. \tag{27.2.31}$$

Képezzük ezen egyenlet konjugált komplexét. (2.6) első relációja szerint:

$$f_k^* = (\psi_k, F\psi_k)^* = (F\psi_k, \psi_k).$$

Mivel F hermitikus, ezért átvihetjük a skaláris szorzat másik tényezőjéhez.

$$f_k^* = (\psi_k, F\psi_k) = (\psi_k, f_k\psi_k) = f_k(\psi_k, \psi_k) = f_k .$$

Kapjuk tehát, hogy $f_k^* = f_k$, ami azt jelenti, hogy f_k valós szám. Ezzel bebizonyítottuk, hogy egy hermitikus operátor összes sajátértéke valós.

Bebizonyítjuk, azt is, hogy egy hermitikus operátor két olyan sajátvektora, mely különböző sajátértékhez tartozik, mindig ortogonális egymásra. Legyen ψ_i és ψ_k az F hermitikus operátor két sajátvektora. Akkor

$$F\psi_i = f_i\psi_i \quad \text{és} \quad F\psi_k = f_k\psi_k .$$

Szorozzuk meg az első egyenletet balról skalárisan ψ_k-val, a másodikat jobbról ψ_i-vel:

$$(\psi_k, F\psi_i) = f_i(\psi_k, \psi_i),$$

$$(F\psi_k, \psi_i) = f_k(\psi_k, \psi_i).$$

Mivel F hermitikus, ezért ezen egyenletek baloldalán álló mennyiségek egyenlők és így a jobboldalaknak is meg kell egyezniük

$$f_i(\psi_k, \psi_i) = f_k(\psi_k, \psi_i).$$

Mivel feltevésünk szerint $f_i \neq f_k$, ezért az egyenlőség csak úgy teljesülhet, ha

$$(\psi_k, \psi_i) = 0,$$

vagyis hogy ψ_k és ψ_i ortogonálisak.

A fentiekben bebizonyított ortogonalitási tétel csak olyan sajátvektorokra vonatkozik, melyek különböző sajátértékekhez tartoznak. Degeneráció esetén az egy és ugyanazon sajátértékhez tartozó $\psi_{k1}, \ldots, \psi_{kf}$ sajátvektorok nem szükségképpen ortogonálisak. De ha e sajátvektorok nem ortogonálisak, akkor előállíthatunk belőlük olyan lineáris kombinációkat, melyek már ortogonálisak egymásra, amit úgy fejezünk ki, hogy a degenerált sajátértékhez tartozó sajátvektorok mindig ortogonalizálhatók.

Ennek belátásához képezzünk az f számú $\psi_{k1}, \ldots, \psi_{kf}$ sajátvektorból f számú új vektort a következő lineáris transzformációval:

$$\phi_{kr} = \sum_{u=1}^{f} b_{ru}\psi_{ku}, \quad r = 1, 2, \ldots, f \tag{27.2.32}$$

Természetesen ezen ϕ_{kr} vektorok szintén sajátvektorai a szóbanforgó F operátornak, mert már fentebb megbeszéltük, hogy degeneráció esetén a sajátvektorok

tetszőleges lineáris kombinációja is sajátvektor. A b_{ru} kombinálási együtthatókat úgy kívánjuk meghatározni, hogy a $\phi_{k1}, \ldots, \phi_{kf}$ vektorok egymásra ortogonálisak legyenek, és ezenkívül még azt is megköveteljük, hogy a ϕ_{kr} vektorok mindegyike normált legyen. E két követelményünket a következőképpen foglalhatjuk össze:

$$(\phi_{kr}, \phi_{ks}) = \delta_{rs}\,, \tag{27.2.33}$$

ahol δ_{rs}, szokás szerint, a *Kronecker*-féle szimbólumot jelöli. (2.32)-t (2.33)-ba helyettesítve, a lineáris transzformáció együtthatóira a következő egyenletet kapjuk:

$$\sum_{u,v=1}^{f} b_{ru}^{*} b_{sv} S_{uv} = \delta_{rs}, \quad (r, s = 1, 2, \ldots, f) \tag{27.2.34}$$

ahol

$$S_{uv} = (\psi_{ku}, \psi_{kv})\,.$$

A (2.34) egyenletrendszer az analitikus geometriából jól ismert egyenletrendszer. Ugyanis (2.34) alakilag azonos egy olyan f-dimenziós térbeli koordinátatranszformáció egyenleteivel, mely egy ferdeszögű koordinátarendszerből egy derékszögűbe visz át. Ebből világos, hogy mindig találhatunk olyan b_{ru} együtthatókat, melyek (2.34)-et kielégítik, de az is természetes, hogy a megoldás nem egyértelmű, hiszen ha találunk egy derékszögű koordinátarendszert, az még tetszőleges módon elfogadható. Ezért ha a ψ_{kr} vektorok már ortogonálisak, akkor $S_{uv} = \delta_{uv}$ lesz, és (2.34)-ből következik:

$$\sum_{u} b_{ru}^{*} b_{su} = \delta_{rs}, \quad (rs = 1, 2, \ldots, f), \tag{27.2.35}$$

ami az ortogonális transzformáció együtthatóira vonatkozó közismert feltétel. A (2.35) feltételt kielégítő b_{rn} együtthatókkal a ψ_{kr} ortogonális sajátvektorokról egy új, szintén ortogonális sajátvektorrendszerre térhetünk át. Végeredményben tehát egy degenerált sajátértékhez tartozó sajátvektorok, még ha az ortogonalitást megköveteljük is, csak egy ortogonális transzformáció erejéig vannak meghatározva.

Legyen most már $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_k, \ldots$ az F hermitikus operátor összes sajátvektora, melyek egymásra mind ortogonálisak, azonkívül minden egyes ψ_k normált. Fennáll tehát, hogy

$$(\psi_k, \psi_l) = \delta_{kl}\,. \tag{27.2.36}$$

Legyen P_k a ψ_k vektorhoz tartozó, (2.17) mintájára definiált projekciós operátor. A ψ_k sajátvektorok rendszerét teljesnek nevezzük, ha ezen P_k-k összege az egységoperátorral egyezik meg:

$$\sum_{k} P_k = 1\,. \tag{27.2.37}$$

Bebizonyítható, hogy ha a lineáris vektorterünk véges dimenziójú, akkor minden hermitikus operátor sajátvektorai teljes rendszert képeznek. Ha a vektortér dimenziószáma végtelen nagy, akkor a teljesség bizonyítása igen súlyos matema-

tikai probléma, melyet csak néhány speciális operátor esetén sikerült megoldani. Ennek ellenére a kvantumelméletben mindig feltételezzük, hogy olyan operátorokkal dolgozunk, melyek sajátvektorai teljes rendszert képeznek.

Ha a ψ_k sajátvektorok rendszere teljes, akkor a vektortér egy tetszőleges ψ vektora felírható, mint a sajátvektorok lineáris kombinációja:

$$\psi = \sum_k c_k \psi_k. \tag{27.2.38}$$

Ez más szóval azt jelenti, hogy nincs a vektortérben a ψ_k sajátvektoroktól lineárisan független egyéb vektor. Ennek belátása igen egyszerű. (2.37) és (2.17) alapján írhatjuk, hogy

$$\psi = 1\psi = \sum_k P_k \psi = \sum_k (\psi_k \psi)\psi_k. \tag{27.2.39}$$

A jobboldalon valóban a ψ_k sajátvektorok egy lineáris kombinációja jelent meg, sőt a (2.38)-ban szereplő c_k együtthatók konkrét kifejezését is meg tudjuk adni:

$$c_k = (\psi_k, \psi). \tag{27.2.40}$$

Végül még bebizonyítunk egy, a hermitikus operátorokra vonatkozó igen fontos tételt: két hermitikus operátor akkor és csakis akkor cserélhető fel egymással, ha sajátvektoraik közösek. Tegyük fel először, hogy az F és G hermitikus operátorok sajátvektorai közösek és jelöljük ezeket $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_k, \ldots$-val

$$F\psi_k = f_k \psi_k \quad \text{és} \quad G\psi_k = g_k \psi_k. \tag{27.2.41}$$

Az első egyenletre a G operátort, a másodikra pedig F-et alkalmazva, majd a két egyenletet egymásból kivonva kapjuk:

$$(GF - FG)\psi_k = f_k G\psi_k - g_k F\psi_k = f_k g_k \psi_k - g_k f_k \psi_k = 0.$$

A $GF - FG$ kommutátor hatása tehát minden egyes ψ_k-ra zérust eredményez. Legyen most ψ egy tetszőleges vektor, melyet (2.38) mintájára sorba fejtünk a ψ_k sajátvektorok szerint. Kapjuk, hogy

$$(GF - FG)\psi = \sum_k c_k (GF - FG)\psi_k = 0.$$

Tehát $GF - FG$ hatása bármely ψ-re zérust eredményez, következésképpen a $GF - FG$ kommutátor zérussal egyenlő. Ebből viszont következik, hogy

$$GF = FG, \tag{27.2.42}$$

azaz operátoraink felcserélhetők.

Most a tétel fordítottját bizonyítjuk be. Tegyük fel, hogy F és G felcserélhetők és legyen ψ_k az F operátor valamelyik sajátvektora.

$$F\psi_k = f_k \psi_k.$$

Alkalmazzuk erre az egyenletre a G operátort. Mivel F és G felcserélhetők, ezért GF helyébe rögtön FG-t írhatunk

$$F(G\psi_k) = f_k (G\psi_k).$$

Látjuk, hogy a $\psi'_k = G\psi_k$ vektor szintén sajátvektora az F operátornak, sőt a hozzá tartozó sajátérték ugyanaz az f_k lesz, mint a ψ_k-hoz tartozó sajátérték.

Ha f_k nem degenerált, úgy a ψ'_k vektor csak egy konstans szorzó faktorban különbözhet ψ_k-tól, azaz $\psi'_k = g_k\psi_k$. Ez azt jelenti, hogy

$$G\psi_k = g_k\psi_k, \tag{27.2.43}$$

vagyis hogy ψ_k sajátvektora G-nek is, azaz ψ_k közös sajátvektora az F és G operátoroknak.

Valamivel bonyolultabb a helyzet akkor, ha az f_k sajátérték degenerált, tehát f db lineárisan független $\psi_{k1}, \ldots \psi_{kf}$ sajátvektor tartozik hozzá. Ekkor is fennáll, hogy bármelyik ψ_{kr} sajátvektorból képzett $\psi'_{kr} = G\psi_{kr}$ szintén sajátvektora F-nek, de most (2.43) helyett általában csak annyit mondhatunk, hogy ψ'_{kr} valamilyen lineáris kombinációja lesz a $\psi_{k1}, \ldots, \psi_{kf}$ vektoroknak

$$\psi'_{kr} = G\psi_{kr} = \sum_{s=1}^{f} G_{sr}\psi_{ks}. \qquad (r = 1, 2, \ldots, f) \tag{27.2.44}$$

Láttuk, hogy a degenerált sajátértékhez tartozó lineárisan független sajátvektorok bármely lineáris kombinációja szintén sajátvektor lesz. Ezt a lehetőséget felhasználva képezzünk a $\psi_{k1}, \ldots, \psi_{kf}$ vektorokból egy olyan

$$\phi_k = \sum_{r=1}^{f} \beta_r\psi_{kr} \tag{27.2.45}$$

lineáris kombinációt, mely már nem csak F-nek, hanem G-nek is sajátvektora lesz, tehát

$$G\phi_k = g_k\phi_k.$$

Beírva ide ϕ_k-nak (2.45) alatti kifejezését és felhasználva (2.44)-et, kapjuk:

$$\sum_{r,s=1}^{f} \beta_r G_{sr}\psi_{ks} = g_k \sum_{s=1}^{f} \beta_s\psi_{ks}.$$

Mivel a ψ_{ks} vektorok egymástól lineárisan függetlenek, ezért az egyenlet csak úgy teljesülhet, ha ψ_{ks} együtthatója az egyenlet mindkét oldalán ugyanaz

$$\sum_{r=1}^{f} G_{sr}\beta_r = g_k\beta_s. \qquad (s = 1, 2, \ldots, f) \tag{27.2.46}$$

Ez egy lineáris homogén egyenletrendszer a β_s együtthatókra. Tudjuk, hogy a triviálistól különböző megoldás csak akkor van, ha az egyenlet együtthatóiból képzett determináns zérussal egyenlő.

$$\begin{vmatrix} G_{11} - g_k & G_{12} & \ldots & G_{1f} \\ G_{21} & G_{22} - g_k & \ldots & G_{2f} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ G_{f1} & G_{f2} & \ldots & G_{ff} - g_k \end{vmatrix} = 0. \tag{27.2.47}$$

Ez egy f-ed fokú algebrai egyenlet, melyből f db g_k sajátértéket számíthatunk ki. Ezeket jelöljük $g_k^{(1)}, \ldots, g_k^{(f)}$-el. Minden egyes $g_f^{(p)}$-hez tartozik a (2.46) egyenletek egy megoldása: $\beta_1^{(p)}, \beta_2^{(p)}, \ldots, \beta_f^{(p)}$. Az ezekkel képezett

$$\phi_{kp} = \sum_{r=1}^{f} \beta_r^{(p)} \psi_{kr} \tag{27.2.48}$$

vektorok közös sajátvektorai lesznek az F és G operátoroknak. A $\phi_{k1}, \ldots, \phi_{kF}$ vektorok mindegyike F-nek az f_k sajátértékéhez tartozik, G-nek pedig rendre a $g_k^{(1)}, \ldots, g_k^{(f)}$ sajátértékei tartoznak hozzájuk. Mivel a ϕ_{kp} vektorok száma f, ezért F-nek sincs több tőlük lineárisan független sajátvektora. Ezzel bebizonyítottuk, hogy ha $FG = GF$, akkor mindig találhatunk egy olyan teljes vektorrendszert, mely F-nek és G-nek közös sajátvektorrendszere.

3. §. A kvantummechanika törvényeinek általános megfogalmazása

A huszonkettedik fejezetben már röviden megbeszéltük, hogy a különböző fizikai mennyiségeket a kvantumelméletben operátorok reprezentálnak és a vizsgált fizikai rendszer állapotát egy állapotfüggvénnyel írhatjuk le. Most ezeket a tételeket teljes általánosságban fogalmazhatjuk meg.

Az első törvény, melyet megbeszéltünk, azt mondja ki, hogy egy tetszőleges fizikai rendszer állapotaihoz mindig hozzárendelhető egy lineáris vektortér, melyet a vizsgált rendszer állapotterének nevezünk. A rendszer egy állapotához az állapottér egy egységre normált ψ vektora tartozik:

$$(\psi, \psi) = 1. \tag{27.3.1}$$

Ezt a normált vektort állapotvektornak, vagy rövidség kedvéért a rendszer ψ állapotának nevezzük. Fontos kiemelnünk, hogy a rendszer állapota az állapotvektort csak egy egységnyi abszolút értékű fázisfaktortól eltekintve határozza meg: a ψ és az $e^{i\vartheta}\psi$ vektorokhoz ugyanaz a fizikai állapot tartozik (ϑ természetesen csak valós szám lehet). Ha viszont két normált vektor nem pusztán csak egy fázisfaktorban tér el egymástól, akkor fizikailag különböző állapotokhoz tartoznak.

A különböző fizikai mennyiségek matematikai leírására az állapottéren értelmezett operátorok szolgálnak. A kvantumelmélet egyik alapfeltevése szerint *egy fizikai mennyiség lehetséges és észlelhető értékei a hozzá tartozó operátor sajátértékeivel egyeznek meg.* Valós fizikai mennyiségeknek megfelelő operátorok mindig hermitikusak, ez biztosítja azt, hogy az észlelhető értékek valós számokkal egyezzenek meg. Egy fizikai mennyiség lehetséges értékeinek meghatározásához tehát a megfelelő hermitikus operátor sajátértékproblémáját kell megoldani, ami tisztán matematikai jellegű feladat.

A fenti alapfeltevés alapján csak akkor lehetséges egy fizikai mennyiség lehetséges értékeinek elméleti úton való meghatározása, ha tudjuk, hogy az egyes fizikai mennyiségekhez konkrétan melyik operátort kell hozzárendelnünk. Erre vonatkozólag a következő irányelvet tekinthetjük mérvadónak: egy tetszőleges F fizikai

mennyiség általában felépíthető néhány alapvetően egyszerű fizikai mennyiségből. Az F-hez tartozó operátor ugyanúgy épül fel az alapmennyiségek operátoraiból, mint ahogy F maga felépül az alapmennyiségekből. Elegendő tehát a vizsgált rendszert leíró alapvető fizikai mennyiségek operátorait meghatározni, ezekből az összes többi fizikai mennyiség operátorát fel tudjuk építeni. Itt jegyezzük meg, hogy egy F fizikai mennyiséget és a hozzátartozó operátort ugyanazzal az F betűvel jelöljük.

Az alapvető fizikai mennyiségek operátorainak meghatározásához általában próbálkozásokra vagyunk utalva és végül azt az operátort fogadjuk el, amelynek következményei a tapasztalattal egyezésben vannak. Lényegében véve így jártunk el pl. a huszonkettedik fejezetben, amikor az elektron spinjének a (22.10.12) operátort fogadtuk el.

A tapasztalat szerint kivételesen egyszerű a helyzet az olyan fizikai mennyiségeknél, melyeknek van klasszikus mechanikai megfelelőjük. Az ilyen fizikai mennyiségek a klasszikus mechanika szabályai szerint felépíthetők a q_j általános koordinátákból és a hozzájuk kanonikusan konjugált p_j impulzusokból:

$$F = F(q_j, p_j). \tag{27.3.2}$$

Az alapvető fizikai mennyiségek ebben az esetben a koordináták és az impulzusok. Az ezekhez tartozó operátorok megszerkesztésére HEISENBERGnek sikerült egy általános törvényt felállítania, mely a tapasztalattal teljes összhangban levőnek bizonyult. Ez a törvény az ún. *Heisenberg*-féle felcserélési reláció, mely szerint

$$q_j p_k - p_k q_j = \frac{ih}{2\pi} \delta_{jk}. \tag{27.3.3}$$

Itt δ_{jk} a *Kronecker*-szimbólum. Ha $j \neq k$, úgy $\delta_{jk} = 0$ és ekkor a *Heisenberg*-törvény szerint q_j és p_k egymással felcserélhető operátorok. Ha viszont (3.3)-at a $j = k$ esetre alkalmazzuk, úgy a

$$q_j p_j - p_j q_j = \frac{ih}{2\pi} \tag{27.3.4}$$

relációt kapjuk. Egy koordináta és a hozzátartozó impulzus operátorai nem kommutatívok, a $q_j p_j - p_j q_j$ kommutátor értéke zérustól különböző. A *Heisenberg*-féle felcserélési reláció megadja e kommutátor konkrét értékét is: minden j koordináta esetén a fenti kommutátor az $\frac{ih}{2\pi}$ konstanssal egyenlő.

A koordináta- és impulzusoperátorok többféleképpen választhatók meg úgy, hogy (3.3) kielégüljön. A huszonkettedik fejezetben SCHRÖDINGER nyomán a q_j koordinátához a q_j-vel való szorzást, p_j-hez pedig a

$$p_j = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_j} \tag{27.3.5}$$

differenciáloperátort rendeltük. Könnyen beláthatjuk, hogy ezek az operátorok

kielégítik a *Heisenberg*-féle felcserélési relációkat. A (3.3) reláció baloldalán álló kommutátort alkalmazzuk a koordináták egy tetszőleges ψ függvényére:

$$(q_j p_k - p_k q_j)\psi = \frac{h}{2\pi i}\left(q_j \frac{\partial \psi}{\partial q_k} - \frac{\partial (q_j \psi)}{\partial q_k}\right) = \frac{ih}{2\pi}\delta_{jk}\psi .$$

Mivel ez tetszőleges ψ esetén igaz, ezért operátoraink valóban kielégítik a *Heisenberg*-féle felcserélési relációkat. A koordináta- és impulzusoperátorok birtokában az összetett fizikai mennyiségek operátorait az

$$F(q_i, p_i) = F\left(q_i, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial qi}\right)$$

szabály alapján képezzük. Az F fizikai mennyiséghez tehát egy differenciáloperátor tartozik, F sajátértékegyenlete pedig egy differenciálegyenlet lesz. Éppen ezért van a *Schrödinger*-féle előállításnak olyan kitüntetetten fontos szerepe, hiszen a differenciálegyenletek megoldására igen jól kidolgozott matematikai eljárások állnak rendelkezésünkre. De ugyanakkor hangsúlyoznunk kell, hogy a *Schrödinger*-féle előállítást fizikailag semmi sem tünteti ki: elvben minden olyan koordináta- és impulzusoperátor, mely kielégíti a *Heisenberg*-féle felcserélési relációkat, felhasználható a különböző fizikai mennyiségek felépítésére és sohasem kerülünk a tapasztalattal ellentmondásba. Mint már említettük, a *Schrödinger*-féle hullámmechanikát néhány hónappal megelőzte HEISENBERG mátrixmechanikája, mely a koordinátákhoz és impulzusokhoz végtelen nagy mátrixokat rendelt hozzá, természetesen úgy, hogy (3.3) kielégüljön. A végtelen dimenziós mátrixokkal való számolás sokkal nehézkesebb, mint a differenciálegyenletek kezelése, ezért a mátrixmechanika keretei között csak néhány igen egyszerű rendszert lehetett kvantumelméletileg tárgyalni. A mátrixmechanika alapjait a későbbiekben még ismertetni fogjuk.

A fentiekben megismertük azokat a törvényeket, melyek alapján egy fizikai mennyiség lehetséges és észlelhető értékeit meg tudjuk határozni. E törvények azonban még semmit sem mondanak arról, hogy egy elvégzett mérés eredményeként mikor melyik értéket kapjuk. Erre vonatkozólag további törvényeket kell felállítanunk. A tapasztalat szerint egy meghatározott állapotú fizikai rendszerben az F mennyiség mérése nem vezet az F operátor egy meghatározott sajátértékére, hanem a mérés általában az $f_1, f_2, \ldots, f_k, \ldots$ sajátértékek bármelyikét eredményezheti, de különböző valószínűséggel. A sajátértékek észlelésének valószínűségeloszlását a kvantumelmélet következő alaptörvénye adja meg:

$$W_k = |(\psi_k, \psi)|^2. \tag{27.3.6}$$

W_k tehát annak a valószínűsége, hogy a ψ állapotban levő rendszerben az F mennyiség mérése az f_k sajátértékre vezessen, ahol ψ_k F-nek az f_k sajátértékhez tartozó normált sajátvektorát jelöli. A (ψ_k, ψ) skaláris szorzatot valószínűségi amplitúdónak nevezzük; abszolút értékének négyzete adja az észlelési valószínűséget.

A W_k valószínűséget megadó (3.6) törvénynek két másik megfogalmazásával is gyakran találkozunk a szakirodalomban, melyek teljesen ekvivalensek (3.6)-tal és ezért levezethetők belőle. Az előző §-ban láttuk, hogy egy tetszőleges ψ vektor sorbafejthető az F operátor ψ_k sajátvektorai szerint:

$$\psi = \sum_k c_k \psi_k , \tag{27.3.7}$$

ahol

$$c_k = (\psi_k, \psi). \tag{27.3.8}$$

Látjuk tehát, hogy az észlelés valószínűségi amplitúdója egyenlő a ψ állapotvektornak a sajátvektorok szerinti sorfejtésében fellépő c_k együtthatójával. Az észlelés valószínűsége pedig a sorfejtési együttható abszolút értékének négyzete lesz:

$$W_k = | c_k |^2. \tag{27.3.9}$$

Ez a valószínűségeloszlást megadó törvénynek egyik szokásos megfogalmazása. A másik gyakran előforduló alak levezetéséhez írjuk fel (3.6)-ot a következőképpen:

$$W_k = (\psi_k, \psi)^* \, (\psi_k, \psi) = (\psi, \psi_k)(\psi_k, \psi). \tag{27.3.10}$$

Ha bevezetjük a ψ_k sajátvektorhoz tartozó P_k projekciós operátort, úgy W_k kifejezése a következő alakot ölti:

$$W_k = (\psi, P_k \psi). \tag{27.3.11}$$

Vizsgáljuk most meg a (3.6) alaptörvény néhány egyszerű következményét. Először is összegezzük a W_k valószínűségeket valamennyi f_k sajátértékre. Az összeg értéke (3.10) alapján

$$\sum_k W_k = (\psi, \sum_k P_k \psi)$$

lesz. A valószínűségszámítás elemeiből tudjuk, hogy a baloldalon álló összeg értéke + 1 kell, hogy legyen. Ezt az eredményt adja a jobboldalon álló kifejezés is, ha $\sum_k P_k = 1$, azaz a sajátvektorok rendszere teljes, hiszen ekkor (3.1) miatt:

$$\sum_k W_k = (\psi, \psi) = 1. \tag{27.3.12}$$

A valószínűségekre vonatkozó törvény tehát előírja, hogy a különböző fizikai mennyiségekhez csak olyan operátorok rendelhetők hozzá, melyek sajátvektorai teljes rendszert alkotnak.

Számítsuk most ki az F fizikai mennyiség mérésének átlagértékét. Ezt az átlagot a valószínűségszámítás szerint úgy kapjuk meg, ha az egyes f_k észlelhető értékeket a hozzájuk tartozó W_k észlelési amplitúdókkal súlyozva összeadjuk:

$$\bar{F} = \sum_k W_k f_k . \tag{27.3.13}$$

Behelyettesítve ide W_k-nak (3.10) képletét, kapjuk:

$$\bar{F} = \sum_k f_k (\psi, \psi_k)(\psi_k, \psi) = \sum_k (\psi, f_k \psi_k)(\psi_k, \psi).$$

Vegyük figyelembe, hogy f_k nem más, mint az F operátornak a ψ_k sajátvektorhoz tartozó sajátvektora és ezért $f_k\psi_k = F\psi_k$ lesz:

$$\bar{F} = \sum_k (\psi, F\psi_k)(\psi_k, \psi) = \sum_k (\psi, FP_k\psi),$$

ahol P_k ismét a ψ_k-hoz tartozó projekciós operátort jelöli. Most már a k-szerinti összegezést könnyen el tudjuk végezni, hiszen a sajátvektorok rendszerének teljessége miatt $\sum_k P_k = 1$. Így a következő végeredményhez jutunk:

$$\bar{F} = (\psi, F\psi). \tag{27.3.14}$$

A rendszer ψ állapotvektorának ismeretében bármely fizikai mennyiség mérésének átlagértékét a (3.14) szabály alapján egyszerűen ki tudjuk számítani.

Ezek szerint a (3.11) formulát úgy is értelmezhetjük, hogy az f_k sajátérték észlelésének W_k valószínűsége éppen a P_k projekciós operátor átlagértékével egyezik meg.

A valószínűségszámításban az F mennyiség mérésének átlagos hibáját, ΔF-t, a következőképpen értelmezzük:

$$(\Delta F)^2 = \overline{(F - \bar{F})^2}, \tag{27.3.15}$$

azaz a hiba négyzete az átlagtól való eltérés négyzetének átlagával egyenlő. A fizikai mennyiségek átlagára vonatkozó (3.14) szabály alapján a mérési hibára kapjuk:

$$(\Delta F)^2 = \big(\psi, (F - \bar{F})^2\psi\big) = \big(\psi, (F^2 - 2F\bar{F} + \bar{F}^2)\psi\big). \tag{27.3.16}$$

A jobboldalon szereplő skaláris szorzatott tagokra bontjuk:

$$(\Delta F)^2 = (\psi, F^2\psi) - 2\bar{F}(\psi, F\psi) + \bar{F}^2(\psi, \psi).$$

Itt az első tag az F^2 operátor átlegértéke lesz, a második tagban fellépő skaláris szorzat éppen az $\bar{F}$ átlaggal egyenlő, a harmadik tagban fellépő (ψ, ψ) pedig 1-gyel egyenlő, hiszen a ψ állapotvektor normált.

$$(\Delta F)^2 = \overline{F^2} - (\bar{F})^2. \tag{27.3.17}$$

Az átlagos hiba tehát F négyzetének átlaga és F átlagának négyzete közti eltéréssel egyenlő. Ez a mennyiség általában zérustól különböző, tehát a mérésnek általában van egy zérustól különböző várható hibája. Ki kell emelnünk, hogy ez a hiba nem a műszerek pontatlanságának rovására írandó, hanem a kvantummechanika alapelveiből következik és (3.17) éppen akkor lesz a mérési hibák átlagával egyenlő, ha műszereink ideálisan pontosaknak tekinthetők. A mérés pontosságának (3.17) alatti elvi korlátja onnan származik, hogy a kvantumelmélet szerint nem lehet előre megmondani, hogy egy meghatározott ψ állapotú rendszerben az F mennyiség mérése milyen eredményre fog vezetni, hanem csak azt lehet elméletileg meghatározni, hogy F különböző sajátértékeit milyen valószínűséggel fogjuk mérni.

Érdekes megvizsgálni, hogy milyen körülmények közt lesz $\Delta F = 0$, azaz elvileg mikor nem korlátozza a kvantumelmélet az F mennyiség mérésének pontosságát.

Mivel az $F - \bar{F}$ mennyiség hermitikus operátor, ezért (3.16)-ot a következőképpen is felírhatjuk:

$$(\Delta F)^2 = \left(\psi, (F - \bar{F})^2 \psi\right) = \left((F - \bar{F})\psi, (F - \bar{F})\psi\right). \qquad (27.3.18)$$

A jobboldalon az $(F - \bar{F})\psi$ vektor normájának négyzete szerepel. Tudjuk azonban, hogy egy vektor normája csak akkor lehet zérus, ha maga a vektor is zérus. Éppen ezért ΔF akkor és csakis akkor zérus, ha $(F - \bar{F})\psi = 0$, azaz

$$F\psi = \bar{F}\psi .$$

Ez az egyenlet az F operátor sajátértékegyenletével azonos. Teljesülésének feltétele az, hogy a ψ állapotvektor F valamelyik ψ_k sajátvektorával legyen azonos, és $\bar{F}$ legyen egyenlő a megfelelő f_k sajátértékkel. A kvantumelmélet szerint tehát egy F mennyiség mérése akkor lehet elvileg tetszőlegesen pontos, ha a rendszer állapotvektora a megmérendő fizikai mennyiség valamelyik sajátvektorával azonos; ebben az esetben a mérés eredménye a megfelelő sajátérték lesz.

Könnyen beláthatjuk, hogy fenti tételünk fordítottja is igaz. Ha $\psi = \psi_k$, tehát ha az állapotvektor az F operátor valamelyik sajátvektorával egyenlő, úgy (3.14) szerint

$$\bar{F} = (\psi_k, F\psi_k) = (\psi_k, f_k\psi_k) = f_k(\psi_k, \psi_k) = f_k$$

lesz, azaz F mérési átlagértéke f_k-val egyenlő és ugyanakkor

$$\overline{F^2} = (\psi_k, F^2\psi_k) = (\psi_k, Ff_k\psi_k)$$
$$= f_k(\psi_k, F\psi_k) = f_k\bar{F} = f_k^2 .$$

Behelyettesítve (3.17)-be kapjuk:

$$(\Delta F)^2 = \overline{F^2} - (\bar{F})^2 = f_k^2 - f_k^2 = 0 .$$

Tehát ha $\psi = \psi_k$, akkor a mérés pontosságának elvi korlátja zérus és a mérés eredménye f_k lesz.

Ezen eredményekre támaszkodva a kvantumelmélet egyik alapvető tételét vezethetjük le. Tegyük fel, hogy valamely fizikai rendszerben megmértük az F mennyiséget és a mérés eredményéül az f_k sajátértéket kaptuk. Ha a mérést egy infinitezimálisan kicsiny idő eltelte után megismételjük, úgy biztosak lehetünk abban, hogy az eredmény ismét f_k lesz, hiszen két, egymást azonnal követő mérés nem adhat különböző eredményt. Mivel a második mérésnél már minden elvi hibakorlát nélkül az f_k mérési eredményt várjuk, ezért kijelenthetjük, hogy a második méréskor a rendszer állapotvektora a ψ_k sajátvektorral azonos. Ez a helyzet az első mérés következményeként állott elő. A kvantumelmélet szerint tehát *egy F fizikai mennyiség mérése mindig beavatkozást jelent a vizsgált rendszer állapotába és a mérés következtében a rendszer állapotvektora az F operátor valamely ψ_k sajátvektorával válik egyenlővé.*

Ezek után vizsgáljuk meg két fizikai mennyiség egyidejű megmérhetőségének feltételét. Általában akkor mondhatjuk, hogy az F és G fizikai mennyiségeknek

egyidejűleg meghatározott értékük van, ha van a rendszernek olyan ψ állapota, melyben $\Delta F = 0$ és $\Delta G = 0$. Ehhez az szükséges, hogy a ψ állapotvektor egyidejűleg sajátvektora legyen az F és G operátoroknak. Az előző §-ban láttuk, hogy két operátornak akkor és csakis akkor van közös sajátvektorrendszere, ha a két operátor felcserélhető, azaz ha

$$FG = GF.$$

Ez tehát egyben annak a szükséges és elegendő feltétele, hogy F és G bármikor egyidejűleg meghatározott értéket vehessen fel. Ha ez a feltétel teljesül, úgy F és G egyidejűleg történő mérése a vizsgált rendszer állapotát F és G valamelyik ψ_k közös sajátvektorába viszi át és a mérés eredménye az f_k ill. a g_k sajátérték lesz.

Az ellenkező esetben, vagyis ha

$$FG \neq GF,$$

az F és G mennyiségeknek általában nem lehet egyidejűleg meghatározott értékük. Az ilyen mennyiségek egyikének, pl. F-nek megmérése a rendszert az F operátor valamely sajátvektorának megfelelő állapotba viszi át. Rögtön ezután G-t megmérve egy újabb állapotot kapunk, mely G egyik sajátvektorának felel meg és ez természetesen általában különbözni fog a kiinduló állapottól, hiszen F és G sajátvektorai különbözőek. Megállapíthatjuk tehát, hogy F és G közül az egyiket megmérve a rendszer állapotát olyképpen változtatjuk meg, hogy a másiknak az értéke nem lesz meghatározott, vagyis ha a rendszert olyan állapotba hozzuk, hogy $\Delta F = 0$ legyen, akkor általában $\Delta G \neq 0$ lesz és fordítva.

Az egymással fel nem cserélhető operátorokra a legegyszerűbb példa egy részecske impulzusa és a hozzátartozó koordináta. Ezek mérési hibái közötti összefüggést a *Heisenberg*-féle határozatlansági relációval kapcsolatban részletesen megbeszéltük. Most megbeszéljük a határozatlansági reláció legáltalánosabb alakját, mely két tetszőleges fizikai mennyiség, F és G egyidejűleg történő mérésekor fellépő ΔF és ΔG elvi hibakorlátok közt teremt kapcsolatot. Képezzük a hibakorlátok négyzeteinek szorzatát:

$$(\Delta F)^2 (\Delta G)^2 = (\psi, (F - \bar{F})^2 \psi)\, (\psi, (G - \bar{G})^2 \psi).$$

Az előző §-ban levezetett (2.26) relációt alkalmazzuk az $F - \bar{F}$ és $G - \bar{G}$ operátorokra. Kapjuk, hogy

$$(\Delta F)^2 (\Delta G)^2 \geq \frac{1}{4} |\, (\psi, [(F - \bar{F})(G - \bar{G}) - (G - \bar{G})(F - \bar{F})]\psi)|^2.$$

A jobboldalon fellépő szögletes zárójeles kifejezésből rendezés után az $FG - GF$ kommutátor marad, tehát

$$(\Delta F)^2 (\Delta G)^2 \geq \frac{1}{4} |\, (\psi, (FG - GF)\psi)\, |^2.$$

Ebből

$$\Delta F \cdot \Delta G \geq \frac{1}{2} |\overline{(FG - GF)}| . \tag{27.3.19}$$

A hibakorlátok szorzata tehát nem lehet kisebb, mint az $FG - GF$ kommutátor átlagértéke abszolút értékének fele. Ez a határozatlansági reláció legáltalánosabb alakja.

(3.19) speciális esetként magában foglalja a koordinátákra és impulzusokra vonatkozó *Heisenberg*-féle határozatlansági relációt. $F = q_j$ és $G = p_j$ esetén (3.4) adja meg a két operátor kommutátorát, mely most egy konstans szám lesz, ezért a (3.19) egyenlőtlenség jobboldalán az átlagolás műveletét el sem kell végeznünk. A Δq_j és Δp_j hibakorlátok szorzatára a ψ állapottól függetlenül a

$$\Delta q_j \cdot \Delta p_j \geq \frac{h}{4\pi} \tag{27.3.20}$$

egyenlőtlenség érvényes.

Ugyanakkor (3.19)-ből azonnal következik, hogy ha F és G felcserélhető operátorok, akkor $\Delta F \cdot \Delta G \geq 0$ lesz, azaz ekkor elvileg semmi sem korlátozza egy olyan mérőberendezés megszerkesztését, mellyel ΔF és ΔG egyidejűleg tetszőlegesen kicsinnyé tehető. Ez azt jelenti, hogy felcserélhető operátoroknak megfelelő mennyiségek egyidejűleg tetszőleges pontossággal megmérhetők, ami egyezésben van a korábbi megállapításainkkal.

Az eddigi vizsgálatainkban az idő, mint fizikai mennyiség nem szerepelt. A kvantumfizikában a mozgást, a különböző fizikai rendszerekben végbemenő folyamatokat a ψ állapotvektor időbeli változásával írjuk le: $\psi = \psi(t)$. A kvantumelmélet alapfeltevése szerint az állapotvektor időbeli változása kauzális, ami alatt azt értjük, hogy ha ismerjük az állapotvektort egy kezdeti t_0 időpillanatban, úgy ez meghatározza az állapotot egy tetszőleges későbbi t időpillanatra is.

A következőkben válaszolnunk kell arra a kérdésre, miként lehet meghatározni a $\psi(t)$ állapotvektort a kiinduló állapotot leíró $\psi_0 = \psi(t_0)$-ból. Mivel a kauzalitás elve szerint ψ_0 egyértelműen meghatározza $\psi(t)$-t, ezért bevezetjük azt a $T(t, t_0)$ operátort, mely ψ_0-ból $\psi(t)$-t állítja elő:

$$\psi(t) = T(t, t_0)\psi(t_0) . \tag{27.3.21}$$

Vizsgáljuk meg részletesen ezen T operátor tulajdonságait. Először is posztulátumként elfogadjuk, hogy T *lineáris* operátor. Ebből az következik, hogy ha a kiinduló állapotunk két állapot szuperpozíciója:

$$\psi(t_0) = c_1\psi_1(t_0) + c_2\psi_2(t_0), \tag{27.3.22}$$

úgy a t időbeli állapot

$$\psi(t) = T(t, t_0)\psi(t_0) = c_1T(t, t_0)\psi_1(t_0) + c_2T(t, t_0)\psi_2(t_0)$$

lesz, vagyis

$$\psi(t) = c_1\psi_1(t) + c_2\psi_2(t). \tag{27.3.23}$$

T linearitása tehát azt jelenti, hogy a (3.22) kiinduló állapot mindegyik komponense az időben egymástól függetlenül „mozog", és a $\psi(t)$ állapot ugyanúgy szuperponálódik a $\psi_1(t)$ és $\psi_2(t)$ állapotokból, mint ahogyan a $\psi(t_0)$ kezdeti állapot szuperponálódott a $\psi_1(t_0)$ és $\psi_2(t_0)$ állapotokból.

A (3.21) definícióból levezethetjük a T operátor több fontos tulajdonságát Nyilvánvaló, hogy

$$\psi(t_2) = T(t_2, t_1)\psi(t_1) = T(t_2, t_1)T(t_1, t_0)\psi(t_0) = T(t_2, t_0)\psi(t_0),$$

amiből a T operátor következő tulajdonsága következik:

$$T(t_2, t_0) = T(t_2, t_1)T(t_1, t_0), \tag{27.3.24}$$

melyet a T operátor *csoport tulajdonságá*nak nevezünk.

A (3.21) definícióból rögtön következik, hogy

$$T(t, t) = 1, \tag{27.3.25}$$

és ezt a csoport tulajdonsággal kombinálva kapjuk:

$$T(t, t_0)T(t_0, t) = T(t_0, t)T(t, t_0) = 1,$$

amiből

$$[T(t, t_0)]^{-1} = T(t_0, t). \tag{27.3.26}$$

A $T(t, t_0)$ operátorban az időargumentumok felcserélése tehát a T operátor reciprokát eredményezi.

Tudjuk, hogy a ψ állapotvektor ki kell, hogy elégítse a (3.1) normáltsági követelményt. Ennek természetesen minden időpillanatban igaznak kell lennie, tehát

$$(\psi(t), \psi(t)) = (\psi(t_0), \psi(t_0)) = 1,$$

vagyis

$$(T(t, t_0)\psi(t_0), T(t, t_0)\psi(t_0)) = (\psi(t_0), T^+(t, t_0)T(t, t_0)\psi(t_0)) = (\psi(t_0), \psi(t_0)).$$

Ez az egyenlőség minden $\psi(t_0)$ kiinduló állapot esetén teljesül, ha megköveteljük, hogy a T operátor unitér legyen:

$$T^+(t, t_0)T(t, t_0) = 1,$$

vagyis

$$T^+(t, t_0) = [T(t, t_0)]^{-1} = T(t_0, t). \tag{27.3.27}$$

A tapasztalat szerint egy fizikai rendszerben lezajló dinamikai folyamatok invariánsak az időbeli eltolással szemben, ha a rendszert a környezetéből az időtől független külső hatások érik. Ez azt jelenti, hogy ha két teljesen azonos fizikai rendszer közül az egyiknek a t_0, a másiknak pedig a $t_0 + \tau$ időpillanatban volt a kezdeti állapota ψ_0, akkor a második rendszernek a $t + \tau$ időben ugyanaz a ψ

lesz az állapota, mint ami az elsőé volt a t időben. Tehát

$$T(t + \tau, t_0 + \tau)\psi_0 = T(t, t_0)\psi_0.$$

Mivel ez minden ψ_0 kezdeti állapotra érvényes, ezért

$$T(t + \tau, t_0 + \tau) = T(t, t_0). \tag{27.3.28}$$

Ez csak úgy lehet igaz minden τ időintervallumra, ha a T operátor csak a t és t_0 időargumentumok különbségétől függ:

$$T(t, t_0) = \mathrm{T}(t - t_0). \tag{27.3.29}$$

A (3.24), (3.25), (3.26) és (3.27) tulajdonságokat a T operátorral a következőképpen fejezhetjük ki:

$$\begin{aligned} &\mathrm{T}(0) = 1, \\ &\mathrm{T}^{-1}(t) = \mathrm{T}^{+}(t) = \mathrm{T}(-t), \\ &\mathrm{T}(t_1 + t_2) = \mathrm{T}(t_1)\mathrm{T}(t_2). \end{aligned} \tag{27.3.30}$$

Ezen követelményeknek eleget tévő T operátor a következő alakú:

$$\mathrm{T}(t) = e^{-\frac{2\pi i}{h}Ht}, \tag{27.3.31}$$

ahol H egy hermitikus operátor. Ennek segítségével a (3.21) relációt a következőképpen írhatjuk fel:

$$\psi(t) = e^{-\frac{2\pi i}{h}H(t-t_0)}\psi(t_0). \tag{27.3.32}$$

Differenciáljuk ezt az egyenletet a t idő szerint:

$$\frac{d\psi}{dt} = -\frac{2\pi i}{h}He^{-\frac{2\pi i}{h}H(t-t_0)}\psi(t_0) = -\frac{2\pi i}{h}H\psi(t),$$

amiből

$$H\psi(t) = -\frac{h}{2\pi i}\frac{d\psi}{dt}. \tag{27.3.33}$$

Összevetve ezt a hullámmechanika (22.6.15) egyenletével, láthatjuk, hogy olyan rendszerek esetében, melyeknek van klasszikus megfelelőjük (tehát bevezethetők a q_i koordináták és p_i impulzusok), a H operátor azonos a rendszer *Hamilton*-operátorával. A kvantumelmélet általánosítja ezt az eredményt és posztulátumként kimondja, hogy az állapotvektor időfüggését megadó (3.31) ill. (3.33) egyenletekben fellépő H operátor minden fizikai rendszer esetében a rendszer energiáját megadó *Hamilton*-operátorral azonos. (3.33)-at a ψ-re vonatkozó *állapotegyenlet*-nek nevezzük.

Legyen most F egy tetszőleges fizikai mennyiség és határozzuk meg, hogy F mérésének átlagértéke, $\bar{F}$, hogyan változik az időben. $\bar{F}$ értéke a t időpillanatban (3.14) alapján a következő lesz:

$$\bar{F}(t) = (\psi(t), F(t)\psi(t)), \tag{27.3.34}$$

ahol az általánosság kedvéért feltételeztük, hogy F explicite is függ az időtől. Differenciáljuk (3.34)-et az idő szerint:

$$\frac{d}{dt}\bar{F}(t)=\left(\frac{d\psi(t)}{dt},F(t)\psi(t)\right)+\left(\psi(t),\frac{\partial F}{\partial t}\psi(t)\right)+\left(\psi(t),F(t)\frac{d\psi(t)}{dt}\right).$$

Itt a középső tag nyilván

$$\overline{\left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)}$$

-vel egyenlő, az első és a harmadik tagban pedig használjuk fel az állapotegyenletet:

$$\frac{d}{dt}\bar{F}(t)=\overline{\left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)}+\frac{2\pi i}{h}(H\psi,F\psi)-\frac{2\pi i}{h}(\psi,FH\psi).$$

Mivel H hermitikus operátor, ezért $(H\psi, F\psi)$ helyett $(\psi, HF\psi) = \overline{HF}$-t írhatunk és a végeredmény a következő lesz:

$$\frac{d}{dt}\bar{F}(t)=\overline{\left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)}+\frac{2\pi}{ih}\overline{(FH-HF)}. \tag{27.3.35}$$

Ezt az egyenletet joggal nevezhetjük a kvantummechanikai mozgástörvénynek. Ez adja meg a különböző fizikai mennyiségek mérési átlagértékének időbeli változását. A fenti mozgásegyenlet alapján definiálni lehet az F operátor idő szerinti totális deriváltját. A $\frac{dF}{dt}$ operátor alatt azt az operátort fogjuk érteni, melyre fennáll, hogy bármely ψ állapot esetén:

$$\overline{\left(\frac{dF}{dt}\right)}=\frac{d}{dt}(\bar{F}).$$

Összevetve (3.35)-tel, láthatjuk, hogy az idő szerinti totális derivált a következő lesz:

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+\frac{2\pi}{ih}(FH-HF). \tag{27.3.36}$$

A gyakorlatban igen fontos szerepet játszanak azok a fizikai mennyiségek, melyek explicite nem függnek az időtől, tehát melyekre $\frac{\partial F}{\partial t}=0$. Ezekre a következő mozgástörvény érvényes:

$$\frac{dF}{dt}=\frac{2\pi}{ih}(FH-HF).$$

Vagy az átlagértékekkel megfogalmazva:

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = \frac{2\pi}{ih}\overline{(FH - HF)}. \tag{27.3.37}$$

Ha speciálisan F felcserélhető a H *Hamilton*-operátorral, úgy

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = 0.$$

Ekkor $\bar{F}$ az időtől független konstans lesz. Ezért a H-val felcserélhető operátorokat *mozgásállandók*nak nevezzük. Ezek szerepének megbeszélésére a továbbiakban még visszatérünk.

Vizsgáljuk most meg a (3.37) mozgástörvényt egy egyszerű tömegpont esetében, melynek *Hamilton*-operátora:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z). \tag{27.3.38}$$

A részecske mozgását szemléletesen jellemezhetjük a koordináták átlagértékeinek,

$$\bar{x}(t), \quad \bar{y}(t), \quad \bar{z}(t)$$

időbeli változásainak leírásával. A sebesség x-komponense a mozgástörvény szerint:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{2\pi}{ih}\overline{(xH - Hx)}. \tag{27.3.39}$$

Számítsuk ki a jobboldalon fellépő kommutátort. Mivel x felcserélhető az x, y, z koordinátákkal, ezért nyilván felcserélhető lesz a koordinátáktól függő V potenciális energiával is. Ezenkívül x felcserélhető az impulzus y és z komponensével, marad tehát, hogy

$$xH - Hx = \frac{1}{2m}(xp_x^2 - p_x^2 x).$$

Ezt a kommutátort a (3.3) *Heisenberg*-törvény segítségével határozhatjuk meg:

$$\begin{aligned} xp_x^2 - p_x^2 x &= xp_x^2 - p_x x p_x + p_x x p_x - p_x^2 x = \\ &= (xp_x - p_x x)p_x + p_x(xp_x - p_x x) = \\ &= \frac{ih}{2\pi}p_x + p_x\frac{ih}{2\pi} = \frac{2ih}{2\pi}p_x. \end{aligned}$$

Ebből kapjuk, hogy

$$xH - Hx = \frac{ih}{2\pi}\frac{p_x}{m}.$$

Beírva ezt (3.39)-be, a következő egyenletet kapjuk:

$$m\frac{d\bar{x}}{dt}=\bar{p}_x. \tag{27.3.40}$$

Tehát a tömeg és a sebesség szorzata egyenlő a réczecske impulzusának átlagával. A gyorsulás x-komponensének meghatározása céljából differenciáljuk (3.40)-et ismét az idő szerint:

$$m\frac{d^2\bar{x}}{dt^2}=\frac{d\bar{p}_x}{dt}=\frac{2\pi}{ih}\overline{(p_xH-Hp_x)}. \tag{27.3.41}$$

A jobboldalon fellépő kommutátorhoz most csak a V potenciális energia fog zérustól különböző járulékot adni, hiszen p_x nyilván felcserélhető az $\frac{1}{2m}(p_x^2+$ $+p_y^2+p_z^2)$ kinetikus energiával.

$$p_xH-Hp_x=p_xV-Vp_x.$$

A kommutátor kiszámítása céljából használjuk fel a *Schrödinger*-féle előállítást és alkalmazzuk a jobboldalon álló kommutátort egy tetszőleges ψ állapotfüggvényre

$$(p_xV-Vp_x)\psi=\frac{h}{2\pi i}\left(\frac{\partial(V\psi)}{\partial x}-V\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial V}{\partial x}\psi.$$

Mivel itt ψ tetszőleges, ezért a bal és a jobboldalon a ψ előtt álló operátorok egymással egyenlőek kell, hogy legyenek. Írhatjuk tehát, hogy

$$p_xH-Hp_x=-\frac{ih}{2\pi}\frac{\partial V}{\partial x}.$$

Ezt felhasználva (3.41)-ben kapjuk, hogy

$$m\frac{d^2\bar{x}}{dt^2}=-\overline{\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)}. \tag{27.3.42}$$

A potenciális energia értelmezése szerint $-\frac{\partial V}{\partial x}$ az erő x-komponensét adja. (3.42) szerint tehát a tömeg és a gyorsulás szorzata az erő átlagos értékével egyenlő. Ez az ún. *Ehrenfest*-tétel, mely nem más, mint NEWTON törvényének kvantummechanikai alakja.

Vizsgáljuk meg részletesen azt az esetet, amikor a részecskére ható erő helyileg lassan változik. Az egyszerűség kedvéért szorítkozzunk egydimenziós mozgásra, de eredményeink könnyen általánosíthatók három dimenzió esetére is. Legyen $\xi=x-\bar{x}$, akkor

$$\overline{\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)}=\int\psi^*(x)\frac{\partial V}{\partial x}\psi(x)dx=\int\psi^*(\bar{x}+\xi)\frac{\partial V(\bar{x}+\xi)}{\partial\bar{x}}\psi(\bar{x}+\xi)d\xi.$$

Fejtsük sorba $\frac{\partial V(\bar{x}+\xi)}{\partial \bar{x}}$-t ξ hatványai szerint. Ha az erő helyileg lassan változik, úgy elegendő lesz a hatványsor első néhány tagját megtartani.

$$\overline{\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)} = \frac{\partial V(\bar{x})}{\partial x}\int \psi^*\psi d\xi + \frac{\partial^2 V(\bar{x})}{\partial \bar{x}^2}\int \psi^*\xi\psi d\xi + \frac{1}{2}\frac{\partial^3 V(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\int \psi^*\xi^2\psi d\xi + \ldots$$

Az itt fellépő integrálok értékeit könnyen megadhatjuk:

$$\int \psi^*\psi d\xi = \int \psi^*\psi dx = 1,$$

$$\int \psi^*\xi\psi d\xi = \int \psi^*(x-\bar{x})\psi dx = 0,$$

$$\int \psi^*\xi^2\psi d\xi = \int \psi^*(x-\bar{x})^2\psi dx = (\Delta x)^2.$$

Ezért

$$\overline{\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)} = \frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}} + \frac{1}{2}\frac{\partial^3 V(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}(\Delta x)^2 + \ldots$$

Ezt beírva (3.42)-be, a következő mozgásegyenletet kapjuk:

$$m\frac{d^2\bar{x}}{dt^2} = -\frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}} - \frac{1}{2}\frac{\partial^3 V(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}(\Delta x)^2. \qquad (27.3.43)$$

Ha az erő változása elhanyagolhatóan kicsiny a Δx távolságon belül, úgy a jobboldal második tagja elhanyagolható és megkapjuk a *Newton*-törvényt az $\bar{x}(t)$ koordinátára:

$$m\frac{d^2\bar{x}}{dt^2} = -\frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}}. \qquad (27.3.44)$$

Térben lassan változó erő esetén tehát a kvantummechanika a klasszikus mechanika mozgástörvényeire vezet. Ez a helyzet pl. az elektroncsőben vagy a részecskegyorsítókban, ahol a térerősség változása csak makroszkopikus (cm nagyságrendű) távolságokon mérhető. Így érthető, hogy ilyen berendezésekben a részecskék mozgása sikeresen tárgyalható a klasszikus mechanika alapján. Ugyanakkor látjuk a klasszikus mechanika érvényességének határait is. Ha a részecskéhez rendelt hullám Δx kiterjedésén belül az erő gyorsan változik, úgy a (3.44) *Newton*-törvény érvényét veszti. Ez a helyzet pl. egy atom kötelékében tartozkodó elektron esetében, ahol a magtól származó *Coulomb*-erőtér számottevően változik az elektronfelhő méretein belül. Az atomok belső szerkezetének tárgyalására a klasszikus mechanika teljesen alkalmatlan.

Végül foglalkozzunk a kvantummechanika általános mozgástörvényének, a (3.33) állapotegyenletnek a megoldásával. Jelöljük $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_k, \ldots$-val a H *Hamilton*-operátor sajátvektorait és fejtsük sorba a $\psi(t)$ állapotvektort a ψ_k sajátvektorok szerint. A sorfejtés együtthatói természetesen az idő függvényei lesznek.

$$\psi(t) = \sum_k a_k(t)\psi_k. \qquad (27.3.45)$$

Behelyettesítve a (3.33) állapotegyenletbe kapjuk:

$$\sum_k a_k(t) H\psi_k = -\frac{h}{2\pi i} \sum_k \frac{da_k(t)}{dt} \psi_k .$$

A baloldalon felhasználjuk, hogy ψ_k a H operátor sajátvektora, tehát eleget tesz a

$$H\psi_k = E_k\psi_k$$

sajátértékegyenletnek, ahol E_k az energiasajátérték.

$$\sum_k E_k a_k(t)\psi_k = -\frac{h}{2\pi i} \sum_k \frac{da_k(t)}{dt} \psi_k .$$

Mivel a $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_k, \ldots$ vektorok egymástól lineárisan függetlenek, ezért ez az egyenlőség csak úgy állhat fenn, ha ψ_k együtthatója a jobb- és a baloldalon ugyanaz:

$$E_k a_k(t) = -\frac{h}{2\pi i} \frac{da_k(t)}{dt} . \tag{27.3.46}$$

Ez egy lineáris elsőrendű differenciálegyenlet az $a_k(t)$ sorfejtési együtthatóra. (3.46) általános megoldása a következő:

$$a_k(t) = c_k e^{-\frac{2\pi i}{h} E_k t} , \tag{27.3.47}$$

ahol c_k egy integrációs állandó. Beírva ezt (3.45)-be, megkapjuk az állapotegyenlet általános megoldását:

$$\psi(t) = \sum_k c_k \psi_k e^{-\frac{2\pi i}{h} E_k t} . \tag{27.3.48}$$

A c_k integrációs állandókat az állapotvektorra vonatkozó kezdeti feltételből számíthatjuk ki. Ha a $t = 0$ időpillanatban a kezdeti állapot ψ_0, úgy (3.48) szerint

$$\psi_0 = \sum_k c_k \psi_k , \tag{27.3.49}$$

tehát c_k nem más, mint a ψ_0 kezdeti állapotnak a ψ_k sajátvektorok szerinti sorfejtésében fellépő sorfejtési együttható.

Tudjuk, hogy az állapotvektornak mindig normált vektornak kell lennie. A kezdeti állapot normáltságát kifejező

$$(\psi_0, \psi_0) = 1$$

egyenletbe beírva (3.49)-et, kapjuk, hogy

$$\sum_{k,l} c_k^* c_l (\psi_k, \psi_l) = 1.$$

A ψ_k sajátvektorok ortonormáltságát kifejező (2.36) reláció felhasználásával ebből adódik:

$$\sum_k |c_k|^2 = 1. \tag{27.3.50}$$

A sorfejtési együtthatók abszolút értékének négyzetösszege 1-gyel kell, hogy egyenlő legyen. Ez a követelmény egyben biztosítja, hogy $\psi(t)$ tetszőleges t időben is normált vektor legyen, hiszen $\psi(t)$ normáltságát a (3.45)-ben szereplő $a_k(t)$ együtthatókra vonatkozó hasonló szabály:

$$\sum_k |a_k(t)|^2 = 1 \tag{27.3.51}$$

fejezi ki. Az $a_k(t)$ együtthatókra kapott (3.47) kifejezésből pedig azonnal látjuk, hogy (3.51) automatikusan teljesül, ha (3.50) fennáll.

Az állapotegyenlet (3.48) általános megoldásának egy igen fontos speciális esete az, amikor az egyik, pl. a k-ik sajátvektorhoz tartozó sorfejtési együttható: $c_k = 1$, az összes többi pedig zérus. Ekkor az állapotvektor

$$\psi(t) = \psi_k e^{-\frac{2\pi i}{h} E_k t} \tag{27.3.52}$$

lesz. Képezzük ezzel egy tetszőleges, de az időt explicite nem tartalmazó F fizikai mennyiség átlagértékét:

$$\bar{F}(t) = (\psi(t), F\psi(t)) = (\psi_k e^{-\frac{2\pi i}{h} E_k t}, F\psi_k e^{-\frac{2\pi i}{h} E_k t}).$$

Felhasználva a skaláris szorzat (2.6) és (2.8) tulajdonságait, írhatjuk, hogy

$$\bar{F}(t) = |e^{-\frac{2\pi i}{h} E_k t}|^2 (\psi_k, F\psi_k) = (\psi_k, F\psi_k). \tag{27.3.53}$$

Láthatjuk tehát, hogy $\bar{F}$ értéke független a t időtől. A (3.52) állapotban a fizikai mennyiségek mérési átlagértékei időfüggetlenek. Ezért az állapotegyenlet (3.52) megoldását *stacionárius állapot*nak nevezzük. A stacionárius állapotok, amint látjuk, a H *Hamilton*-operátor sajátvektorainak és E_k sajátértékeinek birtokában egyszerűen képezhetők. Egy adott fizikai rendszer stacionárius állapotainak meghatározása tehát ekvivalens a *Hamilton*-operátor sajátértékproblémájának megoldásával.

Végül még kiemeljük, hogy az állapotegyenlet (3.48) általános megoldása nem más, mint a különböző stacionárius állapotok szuperpozíciója. A *Hamilton*-operátor sajátértékproblémájának megoldása éppen azért játszik centrális szerepet a kvantummechanikában, mert azon kívül, hogy a H operátor sajátértékei az energia lehetséges és észlelhető értékeit szolgáltatják, a H operátor sajátvektorainak birtokában az állapotegyenlet általános megoldása is a kezünkbe került.

4. §. A mátrixmechanika alapjai

A mátrixmechanika alapgondolatait és tételeit arra az igen egyszerű esetre fogjuk megbeszélni, amikor a vizsgált fizikai rendszerhez tartozó állapottér véges n dimenziójú. Eredményeink aztán általánosíthatók lesznek végtelen dimenziós állapotterekre is.

A 2. §-ban már megbeszéltük, hogy egy n dimenziós térben mindig felvehetünk n db egymástól lineárisan független vektort,

$$\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_n, \tag{27.4.1}$$

melyek a vektortér egy bázisát képezik és a vektortér bármely ψ vektora a bázisvektorok lineáris kombinációjaként állítható elő:

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \phi_i, \tag{27.4.2}$$

ahol a c_i együtthatók komplex számok. Egy adott bázis esetén a $c_1, c_2, \ldots, c_n$ együtthatók egyértelműen meghatározzák a vektort. A $c_1, c_2, \ldots, c_n$ együtthatókat a ψ vektor *komponenseinek* fogjuk nevezni.

Képezzük két vektor, $\psi = \Sigma c_i \phi_i$ és $\psi' = \Sigma c_i' \phi_i$ összegét. A (2.1) és (2.2) alatti szabályok alapján kapjuk, hogy

$$\psi + \psi' = \sum_{i=1}^{n} (c_i + c_i') \phi_i . \tag{27.4.3}$$

Az összeg vektor komponensei tehát az egyes tagok komponenseinek összegével egyenlők.

Egy ψ vektor λ-szorosának komponenseit is a (2.2) szabály segítségével állapíthatjuk meg:

$$\lambda\psi = \lambda \sum_{i=1}^{n} c_i \phi_i = \sum_{i=1}^{n} (\lambda c_i) \phi_i, \tag{27.4.4}$$

tehát $\lambda\psi$ komponenseit úgy kapjuk meg, ha ψ minden egyes c_i komponensét megszorozzuk λ-val. (4.3) és (4.4) a közönséges háromdimenziós vektorok összeadási és nyújtási szabályainak pontos megfelelői.

Fejezzük ki két vektor skaláris szorzatát komponenseik segítségével. A skaláris szorzásra vonatkozó (2.6) és (2.8) szabályok alapján írhatjuk, hogy ha

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \phi_i \qquad \text{és} \qquad \psi' = \sum c_i' \phi_i ,$$

úgy

$$(\psi, \psi') = \sum_{i,j} c_i^* c_j' (\phi_i, \phi_j) . \tag{27.4.5}$$

A skaláris szorzat tehát a c_i és c_i' együtthatóknak egy bilineáris kifejezése, melyben fellépnek a bázisvektorok A bázisvektorokat mindig meg lehet úgy választani, hogy egymásra ortogonálisak, és azonkívül normáltak legyenek. Egy ilyen bázist ortonormáltnak nevezünk. Ortonormált bázis esetén:

$$(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij}. \qquad (i, j = 1, 2, \ldots, n) \tag{27.4.6}$$

A továbbiakban mindig fel fogjuk tételezni, hogy bázisunk ortonormált. Ha (4.6)-ot (4.5)-be helyettesítjük, úgy a skaláris szorzat kifejezése a következőképpen

egyszerűsödik:

$$(\psi, \psi') = \sum_{i=1}^{n} c_i^* c_i' . \tag{27.4.7}$$

Ez a szabály a háromdimenziós $\mathbf{c}(c_1, c_2, c_3)$ és $\mathbf{c}'(c_1', c_2', c_3')$ vektorok skaláris szorzatára vonatkozó $\mathbf{cc}' = c_1c_1' + c_2c_2' + c_3c_3'$ szabály általánosításának tekinthető.

Ha (4.7)-ben $\psi' = \psi$-t írunk, úgy megkapjuk ψ normáját a komponensekkel kifejezve:

$$(\psi, \psi) = \sum_{i=1}^{n} | c_i |^2 . \tag{27.4.8}$$

A norma négyzete tehát a komponensek abszolút négyzeteinek összegével egyenlő. Ebből rögtön következik hogy (ψ, ψ) nem lehet negatív és hogy (ψ, ψ) csak akkor zérus, ha az összes c_i komponens zérus, vagyis maga ψ is zérus. Ezek a megállapítások teljes összhangban vannak a 2. §-ban megbeszéltekkel.

Határozzuk meg egy A lineáris operátor hatását egy ψ vektorra.

$$A\psi = A\left(\sum_{i=1}^{n} c_i\phi_i\right) = \sum_{i=1}^{n} c_i(A\phi_i) . \tag{27.4.9}$$

Látjuk, hogy az A operátor hatását bármely ψ-re meg tudjuk adni, ha ismerjük az $A\phi_i$ vektorokat, azaz A hatását a bázisvektorokra. Jelöljük az $A\phi_i$ vektor komponenseit rendre $A_{1i}, A_{2i}, \ldots A_{ni}$-vel, azaz legyen

$$A\phi_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ji}\phi_j . \tag{27.4.10}$$

Ez az n^2 számú A_{ji} együttható egyértelműen jellemzi A hatását a bázisvektorokra és ezzel együtt a vektortér bármely vektorára. Az A_{ji} együtthatókat egy négyzetes mátrixba rendezhetjük el:

$$\mathsf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \ldots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \ldots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \ldots & A_{nn} \end{pmatrix} \tag{27.4.11}$$

és azt mondjuk, hogy ez a mátrix *reprezentálja* az A operátort. Az A mátrix elemeit úgy számíthatjuk ki, ha (4.10)-et skalárisan megszorozzuk ϕ_k-val:

$$(\phi_k, A\phi_i) = \sum_{j=1}^{n} A_{ji}(\phi_k, \phi_j) .$$

Ha figyelembe vesszük a bázis ortonormáltságát kifejező (4.6) relációkat, úgy kapjuk:

$$A_{ki} = (\phi_k, A\phi_i). \tag{27.4.12}$$

A fentiek alapján a $\psi' = A\psi$ vektor komponenseit ki tudjuk számítani az A mátrix elemeiből és a ψ vektor komponenseiből

$$\psi' = A\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i(A\phi_i) = \sum_{i,j=1}^{n} c_i A_{ji}\phi_j = \sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{n} A_{ji}c_i\right)\phi_j = \sum_{j=1}^{n} c'_j\phi_j .$$

A ψ' vektor komponensei tehát:

$$c'_j = \sum_{i=1}^{n} A_{ji}c_i \tag{27.4.13}$$

Ez a szabály teljesen megfelel a vektoroknak és mátrixoknak a lineáris algebrából jól ismert szorzási törvényének. (4.12)-t szokás a következő alakban is felírni:

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} \ldots A_{12} \ldots A_{1n} \\ A_{21} \ldots A_{22} \ldots A_{2n} \\ \vdots \quad\quad \vdots \quad\quad \vdots \\ A_{n1} \ldots A_{n2} \ldots A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}.$$

Itt tehát a vektorokat egy-egy oszlopmátrixszal reprezentáljuk.

Két operátort akkor tekintünk egyenlőnek, ha hatásuk bármely ψ vektorra azonos. (4.9)-ből látjuk, hogy két operátor egyenlőségének szükséges és elegendő feltétele, hogy a ϕ_i bázisvektorokra való hatásuk azonos legyen, azaz $A = B$ akkor és csakis akkor áll fenn, ha $A\phi_i = B\phi_i$. A (4.10) egyenlet viszont azt mutatja, hogy ez akkor teljesül, ha $A_{ji} = B_{ji}$, azaz az A-t és B-t reprezentáló mátrixok elemei rendre megegyeznek. Vagyis két operátor akkor és csakis akkor egyenlő, ha az őket reprezentáló mátrixok egyenlőek.

Két operátor összegét a (2.12) egyenlettel értelmeztük. Ebből rögtön következik, hogy

$$(A + B)_{ji} = A_{ji} + B_{ji}, \tag{27.4.14}$$

vagyis ha az A és a B operátorok összege C,

$$C = A + B,$$

úgy az őket reprezentáló mátrixok között is fennáll a

$$\mathsf{C} = \mathsf{A} + \mathsf{B}$$

kapcsolat. Ugyanezt mondhatjuk két operátor szorzatáról is. Ugyanis, ha az $(AB)\phi_i = A(B\phi_i)$ vektort (4.10) mintájára írjuk fel, úgy a

$$\sum_{j=1}^{n} (AB)_{ji}\phi_j = A\sum_{r=1}^{n} B_{ri}\phi_r = \sum_{r=1}^{n} B_{ri}(A\phi_r) = \sum_{j,r=1}^{n} B_{ri}A_{jr}\phi_j = \sum_{j,r=1}^{n} (A_{jr}B_{ri})\phi_j$$

relációt kapjuk, amiből rögtön következik, hogy

$$(AB)_{ji} = \sum_{r=1}^{n} A_{jr}B_{ri}. \tag{27.4.15}$$

Ez pedig a lineáris algebrából ismert mátrix-szorzási szabállyal azonos. Mondhatjuk tehát, hogy az AB operátort reprezentáló mátrix AB lesz, vagy más szóval, ha

$$C = AB,$$

úgy a megfelelő mátrixok között is fennáll a

$$\mathsf{C} = \mathsf{AB}$$

kapcsolat.

Vizsgáljuk meg néhany speciális típusú operátor mátrixát. Elsőnek tekintsük az egységoperátort, melyet az $1\psi = \psi$ egyenlettel értelmeztünk. Ha ezt a bázisvektorokra alkalmazzuk, úgy a következő eredményhez jutunk

$$1\phi_i = \sum_{j=1}^{n} (1)_{ji}\phi_j = \phi_i,$$

amiből következik, hogy az egységoperátor mátrixelemei a *Kronecker*-féle δ_{ij}-vel egyeznek meg.

$$(1)_{ji} = \delta_{ji}. \tag{27.4.16}$$

Tehát az egységmátrix a következő lesz:

$$\mathsf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Második példaként tekintsünk egy ψ_e egységvektorhoz tartozó P_e projekciós operátort. Jelöljük ψ_e komponenseit e_i-vel:

$$\psi_e = \sum_{i=1}^{n} e_i\phi_i. \tag{27.4.17}$$

Ha a (2.17)-tel definiált P_e operátort a ϕ_i bázisvektorra alkalmazzuk, úgy az eredmény

$$P_e\phi_i = (\psi_e, \phi_i)\psi_e$$

lesz. Beírva ide (4.17)-et, kapjuk, hogy $(\psi_e, \phi_i) = (\phi_i, \psi_e)^* = e_i^*$, tehát

$$P_e\phi_i = e_i^*\psi_e = \sum_{j=1}^{n} e_i^* e_j \phi_j.$$

Összehasonlítva (4.10)-zel, megkapjuk a projekciós operátor mátrixelemeit:

$$(P_e)_{ji} = e_j e_i^*, \tag{27.4.18}$$

vagyis

$$\mathsf{P}_e = \begin{pmatrix} e_1e_1^* & e_1e_2^* \dots e_1e_n^* \\ e_2e_1^* & e_2e_2^* \dots e_2e_n^* \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ e_ne_1^* & e_ne_2^* \dots e_ne_n^* \end{pmatrix}.$$

Határozzuk most meg egy A operátor, valamint a hozzá adjungált A^+ operátor mátrixai közötti kapcsolatot. Legyen az A^+-et definiáló egyenletben $\psi_1 = \phi_i$ és $\psi_2 = \phi_j$:

$$(\phi_i, A\phi_j) = (A^+\phi_i, \phi_j) = (\phi_j, A^+\phi_i)^*.$$

A mátrixelemekre vonatkozó (4.12) szabály szerint a baloldalon A_{ij}, a jobboldalon pedig $(A^+)^*_{ji}$ áll. Tehát:

$$(A^+)_{ji} = A^*_{ij} \tag{27.4.19}$$

Az A^+-et reprezentáló mátrix e szerint a következő lesz:

$$\mathsf{A}^+ = \begin{pmatrix} A^*_{11} & A^*_{21} \dots A^*_{n1} \\ A^*_{12} & A^*_{22} \dots A^*_{n2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ A^*_{1n} & A^*_{2n} \dots A^*_{nn} \end{pmatrix}$$

Az A^+ mátrixot tehát úgy kapjuk meg az A mátrixból, ha A elemeit a főtengelyre tükrözzük, majd a mátrixelemek komplex konjugáltjait képezzük.

Hermitikus operátor sajátmaga adjungáltja: $F^+ = F$, ezért (4.19) szerint

$$F_{ji} = F^*_{ij}. \tag{27.4.20}$$

Tehát egy hermitikus operátor mátrixában a főtengelyre szimmetrikusan elhelyezkedő elemek egymás konjugált komplexei. Ha (4.20)-at az $i = j$ esetre alkalmazzuk, úgy az $F_{ii} = F^*_{ii}$ egyenletet kapjuk, tehát a főtengelyen elhelyezkedő mátrixelemek valós számok.

Unitérnek neveztük az olyan operátort, melynek adjungáltja azonos a reciprokával. Az unitér operátorokat reprezentáló mátrixok eleget tesznek a (2.21)-el analóg

$$\mathsf{U}\mathsf{U}^+ = \mathsf{U}^+\mathsf{U} = \mathsf{E} \tag{27.4.21}$$

relációnak, melynek a mátrixelemekkel kiírt alakja a következő:

$$\sum_{r=1}^{n} U_{jr} U^*_{ir} = \sum_{r=1}^{n} U^*_{ri} U_{rj} = \delta_{ij}. \tag{27.4.22}$$

A fentiekben a vektorok komponenseit és az operátorok mátrixait egy adott bázisra vonatkoztatva vezettük be. Egyik bázisról egy másikra való áttérést transzformációnak nevezzük. Legyen az eredeti bázisunk $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$ és az új bázis pedig $\phi'_1, \phi'_2, \dots, \phi'_n$. Az új bázis vektorait állítsuk elő az eredeti bázisvektorokkal:

$$\phi'_i = \sum_{j=1}^{n} S_{ji} \phi_j. \tag{27.4.23}$$

Az így bevezetett

$$\mathsf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \dots S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} \dots S_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ S_{n1} & S_{n2} \dots S_{nn} \end{pmatrix} \tag{27.4.24}$$

mátrixot a transzformáció mátrixának nevezzük.

Könnyen beláthatjuk, hogy az ortonormált bázisokat összekapcsoló transzformációs mátrixok unitérek. Képezzük ugyanis ϕ'_i és ϕ'_j skaláris szorzatát:

$$(\phi'_i, \phi'_j) = \left(\sum_{r=1}^{n} S_{ri}\phi_r , \sum_{s=1}^{n} S_{sj}\phi_s \right) = \sum_{r,s=1}^{n} S^*_{ri} S_{sj} (\phi_r , \phi_s) .$$

Ha mind a vesszőtlen, mind pedig a vesszős bázis vektorai eleget tesznek a (4.6) ortonormáltsági relációknak, úgy a fenti egyenletből kapjuk, hogy

$$\sum_{r=1}^{n} S^*_{ri} S_{rj} = \delta_{ij} ,$$

ami (4.22) szerint éppen az S mátrix unitér voltát fejezi ki.

A transzformációelmélet alapfeladata a vektorkomponensek és a mátrixelemek transzformációs szabályának megállapítása. Legyenek a ψ vektor komponensei a vesszőtlen bázisra vonatkoztatva $c_1, c_2, \ldots, c_n$, a vesszősre pedig $c'_1, c'_2, \ldots, c'_n$.

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \phi_i = \sum_{i=1}^{n} c'_i \phi'_i .$$

Beírva ide ϕ'_i-nek (4.23) kifejezését, kapjuk, hogy

$$\sum_{i=1}^{n} c_i \phi_i = \sum_{i,j=1}^{n} c'_i S_{ji} \phi_i = \sum_{i,j=1}^{n} (S_{ij} c'_j) \phi_i .$$

Ebből leolvashatjuk a c_i komponensek transzformációs szabályát:

$$c_i = \sum_{j=1}^{n} S_{ij} c'_j , \tag{27.4.25}$$

vagyis:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \ldots S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} \ldots S_{2n} \\ \vdots & \vdots \quad \vdots \\ S_{n1} & S_{n2} \ldots S_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_n \end{pmatrix} . \tag{27.4.26}$$

A mátrixelemek transzformációs szabályának megállapítása céljából írjuk fel az A operátor mátrixelemeit definiáló (4.10) egyenleteket a vesszős bázisra vonatkozólag:

$$A\phi'_i = \sum_{j=1}^{n} A'_{ji} \phi'_j = \sum_{j,k=1}^{n} A'_{ji} S_{kj} \phi_k = \sum_{k=1}^{n} (SA')_{ki} \phi_k , \tag{27.4.27}$$

ahol felhasználtuk a vesszős és vesszőtlen bázisokat összekapcsoló (4.23) egyenleteket. Másrészt fennáll, hogy:

$$A\phi'_i = A \sum_{j=1}^{n} S_{ji} \phi_j = \sum_{j,k=1}^{n} S_{ji} A_{kj} \phi_k = \sum_{k=1}^{n} (AS)_{ki} \phi_k . \tag{27.4.28}$$

Összehasonlítva (4.27) és (4.28) jobboldalát, leolvashatjuk az A operátorhoz tartozó mátrix transzformálási szabályát:

$$\mathsf{AS} = \mathsf{SA}',$$

amiből

$$\mathsf{A} = \mathsf{SA}'\mathsf{S}^{-1}. \tag{27.4.29}$$

Az A és A' mátrixokat tehát az S mátrixszal elvégzett *hasonlósági transzformáció* köti össze. Ortonormált bázisok esetén S unitér mátrix lesz, azaz $\mathsf{S}^{+} = \mathsf{S}^{-1}$ és ekkor a (4.29) transzformáció a következőképpen is felírható:

$$\mathsf{A} = \mathsf{SA}'\mathsf{S}^{+}. \tag{27.4.30}$$

Az alábbiakban még az operátorok sajátértékproblémáját fogjuk mátrixreprezentációban megtárgyalni. Írjuk fel az operátor sajátértékegyenletét:

$$A\psi = a\psi.$$

Ha a ψ sajátvektor komponenseit – egy meghatározott bázisra vonatkozólag – $c_1, c_2, \ldots, c_n$-nel jelöljük, akkor a fenti sajátértékegyenletek vektorkomponensekkel kifejezett alakja (4.13) és (4.4) alapján a következő lesz:

$$\sum_{j=1}^{n} A_{ij}c_j = ac_i, \tag{27.4.31}$$

Vagy mátrix alakban:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \ldots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \ldots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \ldots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}. \tag{27.4.32}$$

Ez egy lineáris homogén egyenletrendszer az ismeretlen komponensekre. Triviálistól különböző megoldása csak akkor van, ha az egyenlet együtthatóiból képzett determináns zérussal egyenlő:

$$\begin{vmatrix} A_{11} - a & A_{12} & \ldots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} - a & \ldots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \ldots & A_{nn} - a \end{vmatrix} = 0. \tag{27.4.33}$$

Ez egy n-ed fokú algebrai egyenlet az a sajátértékre, melyet az A mátrixhoz tartozó *karakterisztikus* vagy *szekuláris egyenlet*nek nevezünk. Ebből az A operátor sajátértékei kiszámíthatók, általában n számú gyök adódik. A sajátértékeket betéve a (4.32) lineáris egyenletrendszerbe, a sajátvektorok komponensei kiszámíthatók lesznek. A k-adik sajátértéket a_k-val, a hozzátartozó sajátvektor komponenseit pedig

$$c_1^k, \quad c_2^k, \ldots, c_n^k \qquad (k = 1, 2, \ldots n)$$

-nel jelöljük.

Ha a (4.23) baloldalán álló determinánst kifejtjük, majd az így kapott kifejezést rendezzük a hatványai szerint, akkor a sajátértékre vonatkozó egyenlet a következő lesz:

$$(-a)^n + (\mathrm{tr}\,\mathsf{A})(-a)^{n-1} + \ldots + (\det \mathsf{A}) = 0\,, \tag{27.4.34}$$

ahol $\mathrm{tr}\,\mathsf{A}$ az A mátrix diagonális elemeinek összegét jelöli:

$$\mathrm{tr}\,\mathsf{A} = \sum_{i=1}^{n} A_{ii}\,,$$

$\det \mathsf{A}$ pedig az A mátrixból képzett determináns értéke.

Kiemeljük, hogy bár a (4.33) szekuláris egyenlet felírásánál az A operátort egy meghatározott bázisra vonatkoztatott mátrixelemekkel reprezentáltuk, a szekuláris egyenlet gyökei, tehát A sajátértékei függetlenek lesznek a választott bázistól. Ennek bizonyítása a determinánsokra vonatkozó

$$\det(\mathsf{AB}) = (\det \mathsf{A})(\det \mathsf{B})$$

jól ismert szabály segítségével történik. A (4.33) szakuláris egyenlet tömören a következő alakban írható fel:

$$\det(\mathsf{A} - a\mathsf{E}) = 0\,. \tag{27.4.35}$$

Ha egy új bázisra térünk át, akkor a mátrixok a (4.29) szabály szerint transzformálódnak, tehát (4.35)-ből a következő egyenletet kapjuk:

$$\det[\mathsf{S}(\mathsf{A}' - a\mathsf{E})\mathsf{S}^{-1}] = (\det \mathsf{S})\det(\mathsf{A}' - a\mathsf{E})(\det \mathsf{S}^{-1}) = 0\,.$$

De mivel

$$(\det \mathsf{S})\det(\mathsf{S}^{-1}) = \det(\mathsf{S}\mathsf{S}^{-1}) = \det \mathsf{E} = 1\,,$$

ezért a fenti egyenletből marad, hogy

$$\det(\mathsf{A}' - a\mathsf{E}) = 0\,, \tag{27.4.36}$$

ami pedig nem más, mint az A' mátrixhoz tartozó szekuláris egyenlet. Látjuk tehát, hogy az A mátrix szekuláris egyenletének gyökei kielégítik az A' mátrixhoz tartozó szekuláris egyenletet, azaz a szekuláris egyenlet gyökei függetlenek a bázistól.

Mivel a szekuláris egyenlet független a bázistól, ezért a (4.34) kifejtésben a minden hatványa együtthatójának is függetlennek kell lennie a bázis választástól. $\mathrm{tr}\,\mathsf{A}$ és $\det \mathsf{A}$ esetében ez igen egyszerűen igazolható. Mivel általában

$$\mathrm{tr}\,(\mathsf{AB}) = \mathrm{tr}\,(\mathsf{BA})\,,$$

ezért

$$\mathrm{tr}\,\mathsf{A} = \mathrm{tr}\,(\mathsf{S}\mathsf{A}'\mathsf{S}^{-1}) = \mathrm{tr}\,(\mathsf{S}^{-1}\mathsf{S}\mathsf{A}') = \mathrm{tr}\,\mathsf{A}'.$$

Hasonlóképpen

$$\det \mathsf{A} = \det(\mathsf{S}\mathsf{A}\mathsf{S}^{-1}) = (\det \mathsf{S})(\det \mathsf{A}')(\det \mathsf{S}^{-1}) = \det \mathsf{A}'\,,$$

amivel bebizonyítottuk, hogy tr A és det A függetlenek a bázistól és magára az A operátorra jellemző mennyiségek. Ismeretes továbbá az algebrából, hogy a (4.34) alatti n-ed fokú egyenletben $(-a)^{n-1}$ együtthatója a gyökök összegével, az a-t nem tartalmazó konstans tag pedig a gyökök szorzatával egyenlő. Tehát:

$$\operatorname{tr} \mathsf{A} = a_1 + a_2 + \ldots + a_n,$$

$$\det \mathsf{A} = a_1 \cdot a_2 \ldots a_n. \tag{27.4.37}$$

Tehát az A mátrix diagonális tagjainak összege az A operátor sajátértékeinek összegével, az A mátrix determinánsa pedig az A operátor sajátértékeinek szorzatával egyenlő.

Tekintsük kissé részletesebben a hermitikus operátorok sajátértékproblémáját. Láttuk, hogy egy F hermitikus operátor sajátvektorai ortonormált rendszert képeznek, azaz $(\psi_k, \psi_l) = \delta_{kl}$. Ha a skaláris szorzatot (4.7) alapján a komponensekkel fejezzük ki, úgy a

$$\sum_{i=1}^{n} (c_i^k)^* c_i^l = \delta_{kl} \tag{27.4.38}$$

relációt kapjuk. Írjuk fel most a sajátvektorok teljességét kifejező (2.37) reláció mátrix alakját:

$$\sum_{k=1}^{n} \mathsf{P}_k = \mathsf{E}.$$

Felhasználva a projekciós operátorok mátrixelemeire vonatkozó (4.18) eredményünket, a fenti teljességi relációnak a mátrixelemekkel kifejezett alakja a következő lesz:

$$\sum_{k=1}^{n} (c_i^k)^* c_j^k = \delta_{ij}. \tag{27.4.39}$$

Ha a sajátvektorok c_i^k komponenseiből felépítünk egy mátrixot a következő módon:

$$\mathsf{C} = \begin{pmatrix} c_1^1 & c_1^2 & \ldots & c_1^n \\ c_2^1 & c_2^2 & \ldots & c_2^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_n^1 & c_n^2 & \ldots & c_n^n \end{pmatrix}, \tag{27.4.40}$$

úgy (4.22)-ből következik, hogy a (4.38) és (4.39) relációk ezen C mátrix unitér voltát fejezik ki.

Térjünk át az eredezi bázisunkról egy olyan új bázisra, hogy a transzformáció mátrixa éppen a fenti C mátrix legyen. Az F operátor mátrixa az új reprezentációban

$$\mathsf{F}' = \mathsf{C}^{-1}\mathsf{F}\mathsf{C} = \mathsf{C}^{+}\mathsf{F}\mathsf{C} \tag{27.4.41}$$

lesz. Részletesen kiírva:

$$F'_{ij} = \sum_{k,l=1}^{n} c_{ki}^* F_{kl} c_{lj} = \sum_{k,l=1}^{n} (c_k^i)^* F_{kl} c_l^j. \tag{27.4.42}$$

Mivel a sajátértékegyenlet szerint fennáll, hogy

$$\sum_{l=1}^{n} F_{kl} c_l^j = f_j c_k^j,$$

ezért az új bázisra vonatkozó mátrixelemre kapjuk, hogy

$$F'_{ij} = \sum_{k=1}^{n} (c_k^i)^* f_j c_k^j = f_j \sum_{k=1}^{n} (c_k^i)^* c_k^j = f_j \delta_{ij}, \tag{27.4.43}$$

ahol felhasználtuk a (4.38) relációt. Az F' mátrix tehát a következő alakú:

$$\mathsf{F}' = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & f_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & f_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & f_n \end{pmatrix}. \tag{27.4.44}$$

Az ilyen szerkezetű mátrixot *diagonális*nak nevezzük. Jellemzője, hogy a főátlóban álló mátrixelemek éppen az operátor sajátértékeivel egyenlők, a többi mátrixelem pedig zérus. Látjuk tehát, hogy az F operátor sajátértékproblémájának megoldása ekvivalens egy olyan unitér C mátrix megkeresésével, mely az F mátrixból az $\mathsf{F}' = \mathsf{C}^{-1}\mathsf{F}\mathsf{C}$ hasonlósági transzformációval egy diagonális mátrixot állít elő.

Végül még egy igen fontos fogalommal, a *szimmetriatranszformáció*val kell foglalkoznunk. Legyen a vizsgált rendszer *Hamilton*-operátorát reprezentáló mátrix H. Szimmetriatranszformációnak az olyan transzformációt nevezzük, melynél a H mátrix változatlan marad, tehát ha

$$\mathsf{H} = \mathsf{S}^{-1}\mathsf{H}\mathsf{S}. \tag{27.4.45}$$

Ebből következik, hogy

$$\mathsf{S}\mathsf{H} = \mathsf{H}\mathsf{S}, \tag{27.4.46}$$

tehát hogy a H és S mátrixok felcserélhetők. Az előző §-ban láttuk, hogy a *Hamilton*-operátorral felcserélhető mennyiségek a mozgás állandói. Így arra a fontos megállapításra jutunk, hogy a szimmetriatranszformációkat leíró S mátrixok mozgásállandók.

Egy transzformációt *infinitezimális*nak nevezünk, ha a transzformáció S mátrixa csak infinitezimális mértékben tér el az E egységmátrixtól. Az infinitezimális transzformáció általános alakja:

$$\mathsf{S} = \mathsf{E} + i\varepsilon\mathsf{G}, \tag{27.4.47}$$

ahol ε egy infinitezimálisan kicsiny szám. A Gmátrixot a transzformáció *generátor*ának nevezzük. S unitér voltából következik, hogy G hermitikus mátrix. Ugyanis:

$$\mathsf{E} = \mathsf{S}^+\mathsf{S} = (\mathsf{E} - i\varepsilon\mathsf{G}^+)(\mathsf{E} + i\varepsilon\mathsf{G}) = \mathsf{E} + i\varepsilon(\mathsf{G} - \mathsf{G}^+),$$

amiből kapjuk, hogy $\mathsf{G} = \mathsf{G}^+$, tehát hogy G hermitikus.

Ha a (4.47) infinitezimális transzformáció szimmetriatranszformáció, akkor (4.46)-ból következik, hogy a G generátora is felcserélhető H-val, azaz G is mozgásállandó. Az infinitezimális szimmetriatranszformációk generátorai általában a legfontosabb mozgásállandókkal azonosíthatók. Pl. a koordinátarendszer transzlációjának generátora a vizsgált rendszer összimpulzusával, a koordinátarendszer elforgatásának generátora pedig az összimpulzusmomentummal azonos.

5. §. A lineáris harmonikus oszcillátor

Az előző §-ban megbeszélt általános tételek illusztrálása céljából tárgyaljuk a lineáris harmonikus oszcillátort a mátrixmechanika alapján.

Egydimenziós mozgásról lévén szó, a tömegpont mozgásának leírására egyetlen x koordinátát és a hozzátartozó p impulzust kell bevezetnünk. Az ezekhez tartozó operátorok természetesen ki kell, hogy elégítsék a *Heisenberg*-féle felcserélési relációt:

$$xp - px = \frac{ih}{2\pi}. \tag{27.5.1}$$

Ezen reláció *Schrödinger*-féle megoldását (3.5) alatt adtuk meg. Most HEISENBERG nyomán az (5.1) felcserélési törvényt végtelen mátrixokkal fogjuk kielégíteni. E célból vegyük szemügyre a következő mátrixot:

$$\mathfrak{a}_{kn} = \sqrt{n}\,\delta_{k,n-1}. \qquad (k, n = 0, 1, 2, \ldots) \tag{27.5.2}$$

Az $\mathfrak{a}$ mátrix tehát a következő lesz:

$$\mathfrak{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}.$$

Az $\mathfrak{a}^+$ adjungált mátrixot a (4.19) szabály szerint képezzük:

$$(\mathfrak{a})^+{}_{kn} = (a_{nk})^* = \sqrt{n+1}\,\delta_{k,n+1}, \tag{27.5.3}$$

tehát

$$\mathfrak{a}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \ldots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}.$$

Határozzuk meg az $\mathfrak{a}$ és $\mathfrak{a}^+$ mátrixok felcserélési törvényét. A mátrix-szorzás

szabályának felhasználásával adódik, hogy

$$\mathsf{a}\mathsf{a}^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \mathsf{a}^+\mathsf{a} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}, \tag{27.5.4}$$

a kettőt egymásból kivonva pedig az egységmátrixot kapjuk:

$$\mathsf{a}\mathsf{a}^+ - \mathsf{a}^+\mathsf{a} = \mathsf{E}. \tag{27.5.5}$$

A valós fizikai mennyiségeket hermitikus mátrixok reprezentálják. Próbáljunk meg az a és a^+ mátrixokból olyan x és p hermitikus mátrixokat felépíteni, melyek kielégítik az (5.1) *Heisenberg*-törvényt. Vegyük fel x-t és p-t a következő alakban:

$$\begin{aligned} \mathsf{x} &= \lambda\mathsf{a} + \lambda^*\mathsf{a}^+, \\ \mathsf{p} &= \mu\mathsf{a} + \mu^*\mathsf{a}^+. \end{aligned} \tag{27.5.6}$$

Nyilvánvaló, hogy az így felvett x és p mátrixok tetszés szerinti λ és μ komplex számok esetében is hermitikusok lesznek. Behelyettesítve az (5.1) felcserélési törvénybe, kapjuk, hogy

$$\mathsf{x}\mathsf{p} - \mathsf{p}\mathsf{x} = (\lambda\mu^* - \mu\lambda^*)(\mathsf{a}\mathsf{a}^+ - \mathsf{a}^+\mathsf{a}) = \frac{ih}{2\pi}\mathsf{E}.$$

Ha tekintetbe vesszük az a és a^+ mátrixokra vonatkozó (5.5) felcserélési törvényt, úgy láthatjuk, hogy x és p valóban eleget tesz a *Heisenberg*-féle felcserélési relációnak, ha a λ és μ konstansok között teljesül a következő egyenlet:

$$\lambda\mu^* - \mu\lambda^* = \frac{ih}{2\pi}. \tag{27.5.7}$$

Az (5.6) és (5.7) egyenletekkel bevezetett koordináta és impulzus mátrixokból felépíthetjük a különböző fizikai mennyiségek mátrixait. Külön kiemelendő, hogy (5.7) még nem határozza meg λ-t és μ-t egyértelműen (hanem csak $\lambda\mu^*$ imaginárius részét), ezért λ és μ megválasztásában bizonyos fokú szabadságunk van. A 3. §-ban megbeszéltek szerint kizárólag a *Heisenberg*-féle felcserélési reláció bír fizikai tartalommal, hogy a benne szereplő x és p mennyiségeket milyen matematikai kifejezésekkel állítjuk elő, az fizikai szempontból érdektelen, a méréssel ellenőrizhető eredményeket nem érinti. Ezért λ és μ megválasztásában levő szabadságunkat úgy használjuk fel, hogy a számítások keresztülvitele a lehető legkényelmesebb legyen.

A lineáris harmonikus oszcillátor energiakifejezése (23.3.3) szerint:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + 2\pi^2 m_0 \nu^2 x^2, \tag{27.5.8}$$

ahol m_0 az oszcillátor tömege és ν a klasszikus frekvenciája. Beírva ide az impulzust és a koordinátát előállító (5.6) mátrixokat, kapjuk, hogy:

$$\mathsf{H} = \left(\frac{1}{2m_0}\mu^2 + 2\pi^2 m_0 \nu^2 \lambda^2\right)\mathsf{a}^2 + \left(\frac{1}{2m_0}\mu^{*2} + 2\pi^2 m_0 \nu^2 \lambda^{*2}\right)(\mathsf{a}^+)^2 +$$

$$+ \left(\frac{1}{2m_0}|\mu|^2 + 2\pi^2 m_0 \nu^2 |\lambda|^2\right)(\mathsf{a}\mathsf{a}^+ + \mathsf{a}^+\mathsf{a}).$$

E kifejezés első két tagja zérussá tehető, ha λ-t és μ-t úgy választjuk meg, hogy

$$\frac{1}{2m_0}\mu^2 + 2\pi^2 m_0 \nu^2 \lambda^2 = 0 \tag{27.5.9}$$

legyen. Ebből:

$$\mu = \pm 2\pi i m_0 \nu \lambda . \tag{27.5.10}$$

Behelyettesítve (5.7)-be, a λ konstansra a következő egyenlet adódik:

$$\mp 4\pi i m_0 \nu |\lambda|^2 = \frac{ih}{2\pi}. \tag{27.5.11}$$

Ez az egyenlet csak úgy elégíthető ki, ha (5.10)-ben az alsó, negatív előjelet választjuk. Ekkor egyenleteink a következőképpen alakulnak:

$$|\lambda| = \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 m_0 \nu}} \tag{27.5.12}$$

és

$$\mu = -2\pi i m_0 \nu \lambda , \quad \text{tehát} \quad |\mu| = \sqrt{\frac{m_0 h \nu}{2}} . \tag{27.5.13}$$

Beírva ezeket a H energiamátrixba és figyelembe véve az (5.4) mátrixalakokat, kapjuk, hogy

$$\mathsf{H} = \frac{h\nu}{2}(\mathsf{a}\mathsf{a}^+ + \mathsf{a}^+\mathsf{a}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}h\nu & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \left(1+\frac{1}{2}\right)h\nu & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \left(2+\frac{1}{2}\right)h\nu & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \tag{27.5.14}$$

Az energiamátrixot rögtön diagonális alakban kaptuk meg, tehát a diagonális alakra való transzformálást el sem kell végeznünk. (5.14) diagonális elemei rögtön

az energia sajátértékeit szolgáltatják:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu , \tag{27.5.15}$$

ami természetesen megegyezik a hullámmechanika alapján levezetett (23.3.22) formulával.

Az (5.12) egyenlet a λ konstansnak csak az abszolút értékét szabja meg. Az előzőekben megbeszéltek szerint azonban λ fázisát önkényesen választhatjuk meg, ez a fizikai eredményeket nem érinti. Az egyszerűség kedvéért válasszuk λ-t valós, pozitív számnak. Ekkor (5.12) és (5.13) szerint:

$$\lambda = \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 m_0 \nu}} \quad \text{és} \quad \mu = -i\sqrt{\frac{m_0 h\nu}{2}} .$$

Ezeket (5.6)-ba téve kapjuk a koordinátát és az impulzust előállító mátrixok *Heisenberg*-féle alakját:

$$\mathsf{x} = \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 m_0 \nu}}(\mathsf{a} + \mathsf{a}^+) = \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 m_0 \nu}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \tag{27.5.16}$$

$$\mathsf{p} = -i\sqrt{\frac{m_0 h\nu}{2}}(\mathsf{a} - \mathsf{a}^+) = -i\sqrt{\frac{m_0 h\nu}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \tag{27.5.17}$$

Írjuk fel az x koordinátamátrix sajátértékegyenletét. A sajátértéket x'-vel jelölve, a sajátértékegyenlet a következő lesz:

$$\sqrt{\frac{h}{8\pi^2 m_0 \nu}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \dots \end{pmatrix} = x' \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \dots \end{pmatrix}.$$

Ebből a sajátvektor komponenseire a következő egyenletrendszert kapjuk:

$$\begin{aligned}
\sqrt{1}\, c_1 &= \sqrt{2\alpha}\, x' c_0, \\
\sqrt{1}\, c_0 + \sqrt{2}\, c_2 &= \sqrt{2\alpha}\, x' c_1, \\
\sqrt{2}\, c_1 + \sqrt{3}\, c_3 &= \sqrt{2\alpha}\, x' c_2, \\
&\text{- - - - - - - - - - -} \\
\sqrt{n+1}\, c_n + \sqrt{n+2}\, c_{n+2} &= \sqrt{2\alpha} x'\, c_{n+1}, \qquad (27.5.18) \\
&\text{- - - - - - - - - - - - - - - -}
\end{aligned}$$

ahol α a (23.3.5) alatt bevezetett mennyiséget jelöli. Ezen egyenletrendszer megoldása céljából képezzük a *Hermite*-féle polinómokat definiáló (23.3.24) egyenletnek ξ szerinti első és második deriváltját:

$$H_n'(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - H_{n+1}(\xi),$$
$$H_{n+1}''(\xi) = (2 + 4\xi^2) H_n(\xi) - 4\xi H_{n+1}(\xi) + H_{n+2}(\xi).$$

Ezeket beírva (23.3.23)-ba, a *Hermite*-féle polinómokra vonatkozó rekurziós formulát vezethetjük le:

$$2(n+1) H_n(\xi) - 2\xi H_{n+1}(\xi) + H_{n+2}(\xi) = 0. \qquad (27.5.19)$$

Ezen rekurziós formula birtokában könnyen igazolhatjuk, hogy az (5.18) egyenletrendszer megoldása a következő alakú:

$$c_n(x') = \frac{B}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\sqrt{\alpha} x'), \qquad (27.5.20)$$

melyben B egy határozatlan állandó, mely nem függ n-től. B-t a sajátvektorrendszer teljességét kifejező

$$\int_{-\infty}^{\infty} c_n^*(x') c_m(x')\, dx' = \delta_{n,m}$$

reláció alapján határozhatjuk meg, melyből:

$$B = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\, e^{-\frac{\alpha x'^2}{2}}. \qquad (27.5.21)$$

Ezt beírva (5.20)-ba, megkapjuk az oszcillátornak a hullámmechanika alapján levezetett (23.3.25) sajátfüggvényét, ami a hullámmechanikai és a mátrixmechanikai tárgyalásmód teljes ekvivalenciáját bizonyítja.

6. §. A hullámmechanika és a mátrixmechanika kapcsolata

A 4. §-ban a mátrixmechanika alapjait arra az igen egyszerű esetre mutattuk be, amikor a vizsgált fizikai rendszer állapottere véges dimenziójú. A gyakorlatban igen sokszor találkozunk azzal az esettel, amikor az állapottér dimenziója végtelen.

Ekkor az állapotteret kifeszítő bázis végtelen sok vektorból áll, és következésképpen az operátorokat reprezentáló mátrixok is végtelen dimenziójúak lesznek.

Ha a bázisvektorok egy megszámlálhatóan végtelen sok tagból álló

$$\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_i, \ldots$$

sorozatot képeznek, akkor az A operátort reprezentáló mátrix (4.11) helyett a következő szerkezetű lesz:

$$\mathsf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \ldots A_{1i} \ldots \\ A_{21} & A_{22} \ldots A_{2i} \ldots \\ \vdots & \vdots \quad \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} \ldots A_{ii} \ldots \\ \vdots & \vdots \quad \vdots \end{pmatrix}. \tag{27.6.1}$$

Ilyen típusú mátrixokkal dolgoztunk az előző §-ban a harmonikus oszcillátor esetében. A mátrixmechanikának ez a formája a véges dimenziójú esetből az $n \to \infty$ határátmenet keresztülvitelével vezethető le.

A végtelen dimenziójú állapottérnek egy igen fontos típusa az, amelyben folytonosan végtelen számosságú bázisvektor vehető fel. Ekkor a bázisvektorokat ϕ_ξ-vel fogjuk jelölni, ahol a ξ index valamilyen ξ_1 és ξ_2 közötti intervallumban folytonosan változik. Látni fogjuk, hogy egy ilyen bázis esetén a mátrixmechanika átmegy a hullámmechanika formalizmusába.

Véges számú, vagy megszámlálhatóan végtelen sok bázisvektor esetén a bázis ortonormáltságát a

$$(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij} \tag{27.6.2}$$

reláció fejezte ki. Kérdés, hogyan általánosítsuk az ortonormáltság fogalmát arra az esetre, amikor a bázisvektorok számossága folytonosan végtelen. Ehhez a *Kronecker*-féle δ_{ij} szimbólumot kell általánosítanunk folytonos változók esetére. A *Kronecker*-féle δ_{ij}-t a

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{ha } i = j, \\ 0, & \text{ha } i \neq j \end{cases}$$

definícióval értelmeztük. Nyilvánvaló, hogy ezzel a definícióval ekvivalens a *Kronecker*-féle delta következő tulajdonsága:

$$\sum_i f(i)\, \delta_{ij} = f(j). \tag{27.6.3}$$

DIRAC nyomán a delta szimbólumot ezen egyenlet mintájára általánosítjuk folytonos változók esetére. A $\delta(x, y)$ szimbólum definíciója a következő

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x, y)dx = f(y), \tag{27.6.4}$$

ahol $f(x)$ egy tetszőleges folytonos függvény. Ezen definícióból rögtön következik, hogy $\delta(x, y)$ csak az $x-y$ különbségtől függ. Ugyanis (6.4) alapján írhatjuk, hogy

$$f(y+b) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x+b)\,\delta(x+b, y+b)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x+b)\,\delta(x, y)dx.$$

Ebből látszik, hogy $\delta(x+b, y+b)$ és $\delta(x, y)$ hatása ugyanaz, tehát $\delta(x+b, y+b) = \delta(x, y)$. Mivel pedig b tetszőlegesen választható állandó, ezért írjunk $b = -y$-t, és ekkor kapjuk, hogy $\delta(x-y, 0) = \delta(x, y)$, tehát a *Dirac*-féle delta tényleg csak $x-y$ függvénye. A továbbiakban $\delta(x, y)$ helyett a $\delta(x-y)$ jelölést fogjuk használni. A (6.4) definíció új alakja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-y)dx = f(y). \tag{27.6.5}$$

Az alábbiakban megbeszéljük a *Dirac*-féle delta szimbólumnak néhány fontos tulajdonságát. Legyen (6.5)-ben $y = 0$, akkor az

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0) \tag{27.6.6}$$

eredményt kapjuk. Ha speciálisan $f(x) = 1$, úgy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1. \tag{27.6.7}$$

A (6.6) reláció baloldalán álló integrál értéke $f(x)$-nek az $x \neq 0$ helyeken felvett értékeitől egyáltalán nem függ, ezért $\delta(x) = 0$, ha $x \neq 0$. Az $x = 0$ helyen pedig $\delta(x)$ nem lehet korlátos, hiszen akkor (6.7) nem állhatna fenn. $\delta(x)$ tehát nem reguláris függvény.

A matematikai szakirodalomban *disztribúciók*nak nevezik a reguláris függvényeket, valamint a reguláris függvények konvergens sorozatainak határértékét. (Ez utóbbiak nem szükségképp reguláris függvények.) Meg lehet mutatni, hogy $\delta(x)$ is egy ilyen disztribució, mely többféleképpen is előállítható, mint reguláris függvények sorozatának határértéke. Néhány fontosabb előállítás:

$$\delta(x) = \lim_{\eta \to 0} \frac{1}{\sqrt{\eta\pi}} e^{-\frac{x^2}{\eta}}, \tag{27.6.8}$$

$$\delta(x) = \lim_{\eta \to 0} \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2}, \tag{27.6.9}$$

$$\delta(x) = \lim_{N \to +\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin(Nx)}{x}. \tag{27.6.10}$$

A *Dirac*-féle delta szimbólum birtokában felírhatjuk a (6.2) ortonormáltsági relációt arra az esetre, amikor a bázisvektorok számossága folytonosan végtelen

$$(\phi_\xi, \phi_{\xi'}) = \delta(\xi - \xi'). \tag{27.6.11}$$

Legyen ψ az állapottér egy tetszőleges vektora. ψ-nek a bázisvektorok lineáris kombinációjaként való előállítása (4.2) mintájára történik, de most az i index szerinti összegezés szerepét a ξ paraméter szerinti integrálás veszi át. Ha ψ-nek ϕ_ξ-hez tartozó komponensét $\psi(\xi)$-vel jelöljük, úgy

$$\psi = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \psi(\xi)\phi_\xi d\xi\,. \tag{27.6.12}$$

$\psi(\xi)$-t a ψ állapotot leíró „hullámfüggvénynek" nevezzük.

A ψ állapot normált voltát kifejező egyenlet a következő lesz:

$$\begin{aligned}(\psi, \psi) &= \Big(\int_{\xi_1}^{\xi_2} \psi(\xi)\phi_\xi d\xi\,,\, \int_{\xi_1}^{\xi_2} \psi(\xi')\phi_{\xi'} d\xi'\Big) = \\ &= \int_{\xi_1}^{\xi_2}\int_{\xi_1}^{\xi_2} \psi^*(\xi)\psi(\xi')\,(\phi_\xi, \phi_{\xi'}) d\xi d\xi' = \\ &= \int_{\xi_1}^{\xi_2}\int_{\xi_1}^{\xi_2} \psi^*(\xi)\psi(\xi')\delta(\xi - \xi') d\xi d\xi' = \\ &= \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\,\psi(\xi)\,|^2 d\xi = 1\,.\end{aligned} \tag{27.6.13}$$

Tehát a hullámfüggvény abszolút négyzetének integrálja 1 kell, hogy legyen. Ez a hullámmechanika szokásos normáltsági követelményével azonos.

Hasonlóképpen igazolható, hogy a ψ_1 és ψ_2 állapotvektorok skaláris szorzata a következő integrállal egyenlő:

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \psi_1^*(\xi)\psi_2(\xi) d\xi, \tag{27.6.14}$$

ami nyilvánvalóan a hullámmechanikai (2.5) definíció általánosításának tekinthető.

A lineáris operátorok mátrixelemeit a (4.10) szabály mintájára definiáljuk:

$$A\phi_\xi = \int_{\xi_1}^{\xi_2} A(\xi', \xi)\phi_{\xi'}. \tag{27.6.15}$$

Határozzuk meg a $\psi' = A\psi$ vektorhoz tartozó hullámfüggvényt. E célból alkalmazzuk az A operátort a (6.12) egyenlet mindkét oldalára. Kapjuk, hogy

$$\psi' = A\psi = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \psi(\xi) A\phi_\xi d\xi = \int_{\xi_1}^{\xi_2}\int_{\xi_1}^{\xi_2} \psi(\xi) A(\xi', \xi)\phi_{\xi'}, d\xi d\xi'.$$

Felcserélve a ξ és ξ' integrációs változókat írhatjuk:

$$\psi' = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \int_{\xi_1}^{\xi_2} A(\xi, \xi')\psi(\xi')\phi_\xi d\xi' d\xi ,$$

amit ha összehasonlítunk a ψ'-höz tartozó hullámfüggvényt definiáló

$$\psi' = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \psi'(\xi)\phi_\xi d\xi$$

formulával, megállapíthatjuk, hogy

$$\psi'(\xi) = \int_{\xi_1}^{\xi_2} A(\xi, \xi')\psi(\xi')d\xi' \tag{27.6.16}$$

Ez a formula a mátrixmechanika (4.13) képletének hullámmechanikai megfelelője. Látjuk tehát, hogy a lineáris operátorok a hullámmechanikában általában mint *integráloperátorok* jelennek meg; az integráloperátor $A(\xi, \xi')$ *magját* (6.15) alapján határozhatjuk meg. Ha ugyanis (6.15)-öt skalárisan megszorozzuk $\phi_{\xi''}$-vel, úgy a

$$\begin{aligned}(\phi_{\xi''}, A\phi_\xi) &= \int_{\xi_1}^{\xi_2} A(\xi', \xi)(\phi_{\xi''}, \phi_{\xi'})\, d\xi' \\ &= \int_{\xi_1}^{\xi_2} A(\xi', \xi)\, \delta(\xi'' - \xi')\, d\xi' = A(\xi'', \xi)\end{aligned} \tag{27.6.17}$$

eredményt kapjuk, ami teljesen megfelel a mátrixmechanika (4.12) relációjának.

A hullámmechanikában előforduló valamennyi operátor hatása a ψ hullámfüggvényre megadható a (6.16) alakban, még akkor is, ha ez az előállítás nem szembeszökő. Például az egységoperátornak megfelelő integrálmag (6.17) szerint

$$E(\xi, \xi') = (\phi_\xi, 1\phi_\xi) = (\phi_\xi, \phi_{\xi'}) = \delta(\xi - \xi'). \tag{27.6.18}$$

Valóban, ezen integrálmag esetén (6.16) a következő eredményt adja:

$$\psi'(\xi) = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \delta(\xi - \xi')\psi(\xi')d\xi' = \psi(\xi).$$

A $\psi' = \psi$ eredmény mutatja, hogy a (6.16) integrálmag tényleg az egységoperátornak felel meg. Hasonlóan egyszerű igazolni azt is, hogy a ξ-vel való szorzást a

$$\xi'\delta(\xi - \xi')$$

integrálmag reprezentálja, sőt hogy általában ξ egy $f(\xi)$ függvényével való szorzásnak az

$$f(\xi')\delta(\xi - \xi') \tag{27.6.19}$$

integrálmag felel meg:

$$\psi'(\xi) = \int_{\xi_1}^{\xi_2} f(\xi')\delta(\xi - \xi')\psi(\xi')d\xi' = f(\xi)\psi(\xi).$$

A ξ változó szerinti differenciálás műveletének megfelelő integrálmag

$$-\frac{d}{d\xi'}\delta(\xi - \xi'), \tag{27.6.20}$$

hiszen

$$-\int_{\xi_1}^{\xi_2}\left[\frac{d}{d\xi'}\delta(\xi - \xi')\right]\psi(\xi')\,d\xi' = \int_{\xi_1}^{\xi_2}\delta(\xi - \xi')\frac{d\psi(\xi')}{d\xi'}\,d\xi' = \frac{d\psi(\xi)}{d\xi}.$$

Hasonlóképpen igazolható, hogy a ξ-szerinti n-ik differenciálást a

$$(-1)^n\frac{d^n}{d\xi'^n}\delta(\xi - \xi') \tag{27.6.21}$$

integrálmag állítja elő.

A *Schrödinger*-féle hullámmechanika a fentiekben megismert folytonos reprezentációnak egy speciális esete, amit akkor kapunk, ha a reprezentáció bázisául a helykoordináta sajátvektorait használjuk. Ezt a reprezentációt *koordináta-reprezentáció*nak pevezzük. Az egyszerűbb tárgyalásmód kedvéért szorítkozzunk egy tömegpont egydimenziós mozgására. Az x helykoordináta lehetséges és mérhető értékei az $x = -\infty$ és az $x = +\infty$ határok között folytonosan változnak, az x koordinátaoperátor sajátértékspektruma tehát folytonos. Az x' sajátértékhez tartozó sajátvektort jelöljük $\phi_{x'}$-vel:

$$x\phi_{x'} = x'\phi_{x'}. \tag{27.6.22}$$

Ha a reprezentáció bázisául ezeket a $\phi_{x'}$, vektorokat használjuk, úgy a ψ állapot leírására az általános (6.12) mintára bevezetett $\psi(x')$ hullámfüggvényt használjuk:

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\phi_{x'}dx'. \tag{27.6.23}$$

A $\psi(x')$ hullámfüggvényt a ψ állapotvektorral a következőképpen fejezhetjük ki:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\delta(x - x')dx' = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\,(\phi_x, \phi_{x'})dx' = \left(\phi_x, \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\phi_x\,dx'\right),$$

tehát

$$\psi(x) = (\phi_x, \psi). \tag{27.6.24}$$

Itt felhasználtuk a ϕ_x sajátvektorokra vonatkozó $(\phi_x, \phi_{x'}) = \delta(x - x')$ ortonormáltsági relációt.

Vizsgáljuk meg a H *Hamilton*-operátor sajátértékegyenletét koordináta-reprezentációban. A H operátor sajátértékeit E-vel, sajátvektorait ψ_E-vel jelölve, a

sajátértékegyenlet a következő alakot ölti:

$$H\psi_E = E\psi_E.$$

Beírva ide ψ_E-nek a (6.23) szerinti előállítását, kapjuk:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_E(x')H\phi_{x'}\,dx' = E\int_{-\infty}^{\infty} \psi_E(x')\phi_{x'}\,dx'.$$

Skalárisan szorozva ϕ_x-el, megkapjuk a $\psi_E(x)$ sajátfüggvényre vonatkozó egyenletet:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\phi_x, H\phi_{x'})\psi_E(x')dx' = E\psi_E(x). \tag{27.6.25}$$

A baloldalon fellépő $(\phi_x, H\phi_{x'})$ integrálmagot a H operátor konkrét alakjának ismeretében adhatjuk meg. A tömegpont nemrelativisztikus mozgása esetén H az impulzus- és a koordináta-operátorokból épül fel:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x).$$

A p impulzus operátora – mint láttuk – az x-szerinti első differenciálás operátorával, p^2 pedig az x-szerinti második differenciálás operátorával arányos. A differenciáloperátorokat előállító (6.21) integrálmag alapján H első tagjának, a kinetikus energiának integrálmagjára írhatjuk:

$$\left(\phi_x, \frac{p^2}{2m}\phi_{x'}\right) = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2}{dx'^2}\delta(x-x').$$

A potenciális energia csak az x koordinátától függ, ezért integrálmagja (6.19) alapján

$$(\phi_x, V\phi_{x'}) = V(x')\delta(x - x').$$

Ha e kettőt összeadjuk, megkapjuk a H *Hamilton*-operátor integrálmagját:

$$(\phi_x, H\phi_{x'}) = \left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d}{dx'^2} + V(x')\right]\delta(x - x').$$

Ezt behelyettesítve (6.25)-be, megkapjuk a $\psi_E(x)$ sajátvektorra vonatkozó egyenlet explicit alakját:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi_E}{dx^2} + V(x)\psi_E(x) = E\psi_E(x). \tag{27.6.26}$$

Ez pedig a hullámmechanikából jól ismert *Schrödinger*-egyenlettel azonos.

Látjuk tehát, hogy a Schrödinger-féle hullámmechanika a kvantumelmélet egy speciális reprezentációjának, a koordináta-reprezentációjának felel meg. A kvantumelméletnek ez a formája azért alakult ki történetileg először, mert szemléletünk elsődlegesen a térbeli tájékozódást igényli. Sokszor előfordul azonban,

hogy a kvantumelméleti számítások a koordináta-reprezentációban túlságosan bonyolultakká válnak és egy másik, alkalmasan választott reprezentációban ugyanezek a számítások sokkal egyszerűbben vihetők keresztül. A szilárdtestek fizikájában, a magfizikában és az elemi részek elméletében pl. sokszor célszerű az impulzus-reprezentáció használata, amikor is a reprezentáció bázisául az impulzus-operátor ϑ_p sajátvektorait tekintjük. Jelöljük a ψ állapotvektor impulzus-reprezentációbeli hullámfüggvényét $\chi(p)$-vel:

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(p)\vartheta_p dp. \tag{27.6.27}$$

A koordináta-reprezentációbeli $\psi(x)$ és az impulzus-reprezentációbeli $\chi(p)$ hullámfüggvények egyaránt alkalmasak a ψ állapot jellemzésére. A $\psi(x)$ és $\chi(p)$ közti kapcsolat meghatározása céljából írjuk fel ψ (6.23) és (6.27) előállításainak egyenlőségét:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x')\phi_{x'}\, dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(p)\vartheta_p dp.$$

Ha ezt az egyenletet skalárisan megszorozzuk ϕ_x-el, úgy a baloldalon a $(\phi_x, \phi_{x'}) = \delta(x - x')$ reláció miatt a $\psi(x)$ hullámfüggvény fog fellépni. Tehát:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} (\phi_x, \vartheta_p)\chi(p)dp = \int_{-\infty}^{\infty} S(x, p)\chi(p)dp. \tag{27.6.28}$$

Ez az összefüggés a mátrixmechanika (4.25) formulájának felel meg és megadja a koordináta- és impulzus-reprezentációkat összekapcsoló transzformációt. A transzformációt leíró

$$S(x,\ p) = (\phi_x, \vartheta_p) \equiv \vartheta_p(x) \tag{27.6.29}$$

integrálmag (6.24) alapján nem más, mint a ϑ_p impulzus-sajátvektor koordináta-reprezentációbeli hullámfüggvénye. Az impulzusoperátor sajátfüggvényeit (23.1.12) alatt írtuk fel, egydimenziós mozgás esetére ez a következőképpen egyszerűsödik:

$$\vartheta_p(x) = (\phi_x, \vartheta_p) = Ae^{\frac{2\pi i}{h}px}.$$

Az A normálási állandót most úgy kell megválasztanunk, hogy ϑ_p kielégítse a (6.11)-nek megfelelő

$$(\vartheta_p, \vartheta_{p'}) = \int_{-\infty}^{\infty} \vartheta_p^*(x)\vartheta_{p'}(x)\, dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{2\pi i}{h}(p'-p)x} dx = \delta(p' - p) \tag{27.6.30}$$

relációt. A *Fourier*-transzformáció jól ismert képeleteinek,

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(p)e^{\frac{2\pi i}{h}px} dp,$$

$$F(x) = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-\frac{2\pi i}{h} px} dx,$$

egymásba helyettesítésével (vagyis $f(x)$ kiküszöbölésével) láthatjuk, hogy

$$F(p) = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(p') e^{\frac{2\pi i}{h}(p'-p)x} dx dp'.$$

Ez tetszőleges $F(p)$-re igaz és ezért

$$\frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{2\pi i}{h}(p'-p)x} dx = \delta(p - p'). \tag{27.6.31}$$

A *Dirac*-féle δ-nak ezt az integrálkifejezését összevetve (6.30)-al, megkapjuk az A normálási állandó értékét: $A = h^{-1/2}$. A normált impulzus sajátfüggvény tehát:

$$\vartheta_p(x) = \frac{1}{h^{1/2}} e^{\frac{2\pi i}{h} px}. \tag{27.6.32}$$

(6.29) értelmében ugyanez a kifejezés adja meg a koordináta- és impulzusreprezentációkat összekapcsoló transzformációt:

$$S(p, x) = \frac{1}{h^{1/2}} e^{\frac{2\pi i}{h} px}. \tag{27.6.33}$$

Ezt beírva (6.28)-ba, megkapjuk a $\psi(x)$ és $\chi(p)$ hullámfüggvények közötti összefüggést:

$$\psi(x) = \frac{1}{h^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(p) e^{\frac{2\pi i}{h} px} dp. \tag{27.6.34}$$

Határozzuk meg ezek után a koordináta és az impulzus operátorát impulzusreprezentációban. Általában, valamely A operátornak a koordinátareprezentációbeli $A(x, x')$ és az impulzusreprezentációbeli $A'(p, p')$ mátrixai közötti kapcsolatot (4.30) alapján írhatjuk fel, de most a mátrix szorzásnál fellépő összegezés helyett integrálnunk kell:

$$A'(p, p') = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} S^+(p, x) A(x, x') S(x', p') dx dx'$$

$$= \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\pi i}{h} px} A(x, x') e^{\frac{2\pi i}{h} p'x'} dx dx'. \tag{27.6.35}$$

Alkalmazzuk ezt az általános képletet először az x koordináta impulzusreprezentációbeli alakjának meghatározására. x mátrixa koordinátareprezentációban:

$$X(x, x') = x'\delta(x - x'),$$

és ezt (6.35)-be téve kapjuk:

$$X'(p,p') = \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty} xe^{\frac{2\pi i}{h}(p'-p)x}\,dx = \frac{1}{2\pi i}\frac{d}{dp'}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{2\pi i}{h}(p'-p)x}\,dx.$$

(6.31) figyelembevételével a következő eredményre jutunk:

$$X'(p,p') = \frac{h}{2\pi i}\frac{d}{dp'}\delta(p-p'). \tag{27.6.36}$$

Összehasonlítva (6.20)-al, megállapíthatjuk, hogy az x koordináta operátora impulzusreprezentációban a

$$-\frac{h}{2\pi i}\frac{d}{dp} \tag{26.6.37}$$

differenciáloperátorral egyenlő.

Hasonlóképpen határozhatjuk meg az impulzus operátorát. Koordinátareprezentációban

$$P(x,x') = -\frac{h}{2\pi i}\frac{d}{dx'}\delta(x-x'),$$

melyet (6.35)-be téve kapjuk:

$$P'(p,p') = -\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\pi i}{h}px}\frac{d\delta(x-x')}{dx'}e^{\frac{2\pi i}{h}p'x'}\,dxdx' =$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\pi i}{h}px}\delta(x-x')\frac{d}{dx'}\left(e^{\frac{2\pi i}{h}p'x'}\right)dxdx' =$$

$$= \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} p'\delta(x-x')e^{\frac{2\pi i}{h}(p'x'-px)}\,dxdx' = p'\delta(p-p').$$

Ez pedig (6.19) szerint éppen a p-vel való szorzást írja le.

A *Hamilton*-operátor sajátértékegyenlete impulzus reprezentációban ezek szerint a következő lesz:

$$\frac{p^2}{2m}\chi(p) + V\left(-\frac{h}{2\pi i}\frac{d}{dp}\right)\chi(p) = E\chi(p). \tag{27.6.38}$$

Példaként oldjuk meg ezt az impulzusreprezentációbeli *Schrödinger*-egyenletet a harmonikus oszcillátor esetére. Az oszcillátorpotenciál (23.3.3) szerint:

$$V(x) = 2\pi^2 m_0 \nu^2 x^2,$$

tehát (6.38) a következőképpen alakul:

$$\frac{p^2}{2m_0}\chi(p) - \frac{1}{2}h^2\nu^2 m_0 \frac{d^2\chi(p)}{dp^2} = E\chi(p). \tag{27.6.39}$$

Bevezetve a (23.3.5) jelöléseket, egyenletünk a

$$\left(\frac{h^2\alpha}{4\pi^2}\right)^2 \frac{d^2\chi(p)}{dp^2} + \left[\frac{h^2}{4\pi^2}\lambda - p^2\right]\chi(p) = 0$$

alakot ölti. A p változóról áttérve a

$$\xi = \frac{2\pi}{h\sqrt{\alpha}}p$$

változóra, kapjuk, hogy

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - \xi^2\right)\chi = 0. \tag{27.6.40}$$

Ez a differenciálegyenlet alakilag azonos (23.3.8)-al. Amint láttuk, reguláris megoldása csak akkor van, ha

$$\frac{\lambda}{\alpha} = 2n + 1,$$

amiből az

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu$$

energiasajátértékeket kapjuk. A (6.40) egyenlet megoldását pedig (26.3.25) analógiájára írhatjuk fel:

$$\chi_n = A_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi),$$

vagyis

$$\chi_n(p) = A_n e^{-\frac{2\pi^2}{h^2\alpha}p^2} H_n\left(\frac{2\pi}{h\sqrt{\alpha}}p\right). \tag{27.6.41}$$

7. §. A Dirac-féle bra és ket vektorok

Az állapotvektorok jelölésére és a sajátértékproblémák tárgyalására DIRAC egy igen elegáns szimbolizmust vezetett be, melynek használata sokszor igen előnyös.

A *Dirac*-féle szimbolizmus bevezetésénél mindenekelőtt arra kell felhívnunk a figyelmet, hogy két állapotvektor skaláris szorzata nem szimmetrikus a tényе-

zőkben:

$$(\psi_1, \psi_2) \neq (\psi_2, \psi_1).$$

Ez az aszimmetria megnyilvánul abban is, hogy a skaláris szorzás csak a második (jobboldali) tényezőnek lineáris kifejezése, az első (baloldali) tényezőnek nem.

A jobboldali tényezőben való linearitást a (2.6) alatti szabályok fejezik ki:

$$(\psi_1, \psi_2 + \psi_3) = (\psi_1, \psi_2) + (\psi_1, \psi_3),$$
$$(\psi_1, c\psi_2) = c(\psi_1, \psi_2).$$

Ugyanakkor (2.6) és (2.8) szerint:

$$(\psi_1 + \psi_2, \psi_3) = (\psi_1, \psi_3) + (\psi_2, \psi_3),$$
$$(c\psi_1, \psi_2) = c^*(\psi_1, \psi_2).$$

A skaláris szorzatnak a baloldali tényezőtől való függését *antilineáris*nak mondjuk.

DIRAC nyomán a ψ állapotvektorok tere helyett *két* vektorteret vezetünk be, egyiket a skalárszorzatokban fellépő bal-, a másikat a jobboldali tényezők alkotják. Minden ψ állapothoz tehát két vektort rendelünk, egyik a baloldali, a másik a jobboldali tényezők vektorterébe tartozik. Ezeket a következő szimbólumokkal jelöljük:

$$< \psi \mid \quad \text{és} \quad \mid \psi >. \tag{27.7.1}$$

A $< \psi \mid$ baloldali vektort DIRAC javaslatára *bra-vektor*nak, $\mid \psi >$-t pedig *ket-vektor*nak nevezzük. A bra és ket vektorok tere nem független egymástól, hiszen minden fizikai állapothoz tartozik egy bra- és egy ket-vektor, tehát a bra- és ket-vektorok terei kölcsönösen egyértelmű módon leképezhetők egymásra. A leképezésről feltételezzük, hogy antilineáris, tehát:

$$\mid \psi_1 > + \mid \psi_2 > \leftrightarrow < \psi_1 \mid + < \psi_2 \mid,$$
$$c \mid \psi > \leftrightarrow c^* < \psi \mid. \tag{27.7.2}$$

A (ψ_1, ψ_2) skaláris szorzatot a *Dirac*-féle bra- és ket-vektorokkal $< \psi_1 \mid\mid \psi_2 >$ alakban írhatjuk fel. Felesleges azonban ψ_1 és ψ_2 közé kettős elválasztó vonalat írni, ezért a skaláris szorzat jele a következő lesz:

$$(\psi_1, \psi_2) = < \psi_1 \mid \psi_2 >. \tag{27.7.3}$$

Fennáll természetesen, hogy

$$< \psi_1 \mid \psi_2 > = < \psi_2 \mid \psi_1 >^*. \tag{27.7.4}$$

Ha az A operátor a $\mid \psi >$ ket-vektort $\mid \psi' >$-be viszi át, azt a következőképpen jelöljük:

$$\mid \psi' > = A \mid \psi' >. \tag{27.7.5}$$

Mivel a ket- és a bra-vektorok tere kölcsönösen egyértelmű módon leképezhető egymásra, ezért a ket-vektorok terében működő operátorhoz mindig tartozik egy

$\tilde{A}$ operátor a bra-vektorok terében olymódon, hogy

$$|\psi' > = A\,|\psi > \leftrightarrow < \psi'| = < \psi|\,\tilde{A} \tag{27.7.6}$$

legyen. (A $< \psi|$ bra-vektorra ható $\tilde{A}$ operátort $< \psi|\,\tilde{A}$-val jelöljük, tehát az operátor „visszafelé", jobbról balra hat.)

Az A operátor A^+ adjungáltját (2.19)-el definiáltuk, ezt a *Dirac*-szimbólumokkal a következőképpen írhatjuk fel:

$$< \psi_1|\,\{A\,|\psi_2 >\} = \{< \psi_1|\,\tilde{A}^+\}\,|\psi_2 > . \tag{27.7.7}$$

Ebből látszik, hogy egy skaláris szorzatban A hatása a ket-vektorra ekvivalens $\tilde{A}^+$ hatásával a bra-vektorra. Éppen ezért, ha az $\tilde{A}$ és A^+ operátorokat azonosnak vesszük,

$$\tilde{A} = A^+ \qquad \text{és} \qquad \tilde{A}^+ = A, \tag{27.7.8}$$

akkor (7.7)-ből a kapcsos zárójelek elhagyhatók:

$$< \psi_1|\,\{A\,|\psi_2 >\} = \{< \psi_1|\,A\}\,|\psi_2 > = < \psi_1|\,A\,|\psi_2 > . \tag{27.7.9}$$

Az A operátort akár a ket-, akár a bra-vektorra ható operátornak tekinthetjük, a skalár szorzat értékét ez nem befolyásolja.

(7.9) konjugált komplexét a következő módon írhatjuk fel:

$$< \psi_1|\,A\,|\psi_2 >^* = (< \psi_1|\,\{A\,|\psi_2 >\})^* = \{< \psi_2|\,\tilde{A}\}\,|\psi_1 > = \{< \psi_2|\,A^+\}\,|\psi_1 > .$$

De mivel a jobboldalon a kapcsos zárójel elhagyható, ezért:

$$< \psi_1|\,A\,|\psi_2 >^* = < \psi_2|\,A^+\,|\psi_1 > . \tag{27.7.10}$$

Írjuk fel a reprezentációelmélet legfontosabb összefüggéseit a *Dirac*-szimbólumokkal. A reprezentáció bázisául szolgáló vektorokat $|\phi_n >$ helyett röviden $|n >$-el fogjuk jelölni. Itt n lehet diszkrét értékeket felvevő, vagy pedig folytonosan változó paraméter. (Az első eset a mátrixmechanikának, a második a hullámmechanikának felel meg.) A bázisvektorok ortonormáltságát kifejező reláció:

$$< n'|\,n > = \delta_{n'n} \quad \text{ill.} \quad < n'|\,n > = \delta(n' - n) \tag{27.7.11}$$

attól függően, hogy n diszkrét vagy folytonos változó.

Az $|n >$ bázisvektorhoz tartozó projekciós operátor hatása $|\psi >$-re a (2.17) definíciós egyenlet szerint:

$$P_n\,|\psi > = |\,n > < n\,|\psi > .$$

Ennek alapján a projekciós operátort a következőképpen jelölhetjük:

$$P_n = |\,n > < n\,|. \tag{27.7.12}$$

A bázisvektorok rendszerének teljességét kifejező reláció ezzel a jelöléssel:

$$\sum_n P_n = \sum_n |\,n > < n\,| = 1, \tag{27.7.13a}$$

illetve folytonos n paraméter esetén

$$\int P_n dn = \int dn \,|\, n > < n \,|\, = 1 \,. \qquad (27.7.13b)$$

Ha (7.13)-at alkalmazzuk a $|\psi>$ állapotvektorra, akkor megkapjuk $|\psi>$-nek a bázisvektorokkal előállított alakját:

$$|\psi> = \sum_n |\, n > < n \,|\psi> = \sum_n \psi_n \,|\, n >, \qquad (27.7.14a)$$

ill.

$$|\psi> = \int dn \,|\, n > < n \,|\psi> = \int dn \psi_n \,|\, n >. \qquad (27.7.14b)$$

Összevetve (4.2)-vel és (6.12)-vel, láthatjuk, hogy a

$$\psi_n = < n \,|\psi> \qquad (27.7.15)$$

sorfejtési együttható a $|\psi>$ állapot komponensével, ill. hullámfüggvényével azonos.

Az A operátort reprezentáló mátrix (4.12), ill. (6.17) szerint a következő lesz:

$$A_{nn'} = < n \,|\, A \,|\, n' > \,. \qquad (27.7.16)$$

A (7.13) teljességi reláció felhasználásával a $|\psi'> = A\,|\psi>$ vektor komponenseit ki tudjuk fejezni a $|\psi>$ vektor komponenseivel és az A operátor mátrixelemeivel. Ehhez az A operátort A·1 alakban írjuk fel és az egységoperátor helyébe a (7.13) összeget, ill. integrált írjuk:

$$< n \,|\psi'> = < n \,|\, A \,|\psi> = < n \,|\, A \Big(\sum_{n'} |\, n' > < n' \,|\Big) \,|\psi> = \sum_{n'} < n \,|\, A \,|\, n' > < n' \,|\psi> \qquad (27.7.17a)$$

ill. folytonos n paraméter esetén:

$$< n \,|\psi'> = < n \,|\, A \,|\psi> = \int dn' < n \,|\, A \,|\, n' > < n' \,|\psi>. \qquad (27.7.17b)$$

Ezek a formulák a mátrixmechanika (4.13), ill. a hullámmechanika (6.16) összefüggéseinek felelnek meg.

A *Dirac*-szimbólumok segítségével igen egyszerűen tárgyalható az egyik bázisról egy másikra való transzformáció. Jelöljük az egyik bázis vektorait $|\, n >$-el, a másikét $|\, m >$-el. A rövidség kedvéért feltesszük, hogy mind n, mind pedig m diszkrét paraméter. (Folytonos paraméter esetén az összegezések helyett integrálokat kell írnunk.) Mindkét bázis ortonormált,

$$< n' \,|\, n > = \delta_{n'n}, \qquad < m' \,|\, m > \delta_{m'm}, \qquad (27.7.18)$$

és teljes

$$\sum_n |\, n > < n \,| = \sum_m |\, m > < m \,| = 1. \qquad (27.7.19)$$

A $|\psi>$ vektor komponenseinek transzformációs szabályát a következőképpen vezethetjük le:

$$< m \,|\psi> = < m \,| \Big(\sum_n |\, n > < n \,|\Big) \,|\psi> = \sum_n < m \,|\, n > < n \,|\psi>. \qquad (27.7.20)$$

Összevetve (4.25)-el, megállapíthatjuk, hogy a transzformáció mátrixa

$$S_{mn} = < m \mid n >.$$

A két bázis ortonormáltsága és teljessége maga után vonja a transzformációs mátrix unitér voltát. Ugyanis (7.18) és (7.19) miatt

$$\sum_n < m \mid n > < n \mid m' > = < m \mid m' > = \delta_{mm'},$$

$$\sum_m < n \mid m > < m \mid n' > = < n \mid n' > = \delta_{nn'}, \tag{27.7.21}$$

ez pedig az $SS^+ = S^+S = E$ unitaritási relációval ekvivalens.

Az A operátorhoz tartozó mátrixelemek transzformációs szabálya ugyancsak automatikusan adódik (7.19)-ből:

$$< m \mid A \mid m' > = \sum_{n,n'} < m \mid n > < n \mid A \mid n' > < n' \mid m' >. \tag{27.7.22}$$

Ez a (4.30) transzformációs szabálynak a *Dirac*-szimbólumokkal kifejezett alakja.

Egy F hermitikus operátor sajátértékegyenletét a *Dirac*-formalizmusban a következőképpen írjuk fel:

$$F \mid k > = f_k \mid k >, \tag{27.7.23}$$

ahol $\mid k >$ a k-adik sajátvektor és f_k a hozzátartozó sajátérték. Egy tetszőleges $\mid n >$ bázis esetén a sajátértékegyenletet (7.17) mintájára írhatjuk fel:

$$\sum_{n'} < n \mid F \mid n' > < n' \mid k > = f_k < n \mid k >. \tag{27.7.24}$$

Adott $< n \mid F \mid n' >$ mátrixelemek esetén (7.24) egy lineáris homogén egyenletrendszer a sajátvektor $< n \mid k >$ amplitúdóira, melyből az f_k sajátértékek és az $< n \mid k >$ amplitúdók meghatározhatók.

A sajátértékprobléma egy másik megfogalmazásához a (7.22) transzformációs szabály alapján juthatunk el, ha abban az $\mid m >$ bázisnak az F operátor $\mid k >$ sajátvektoraiból alkotott bázist választjuk:

$$\sum_{n,n'} < k \mid n > < n \mid F \mid n' > < n' \mid k' > = < k \mid F \mid k' >.$$

A jobboldalon felhasználva a (7.23) sajátértékegyenletet, valamint a sajátvektorok ortonormáltságát kifejező $< k \mid k' > = \delta_{kk'}$ relációt, kapjuk, hogy:

$$\sum_{n,n'} < k \mid n > < n \mid F \mid n' > < n' \mid k' > = f_k \delta_{kk'}. \tag{27.7.25}$$

Látjuk, hogy a keresett $< n \mid k >$ komponensek annak az

$$S_{nk} = < n \mid k >$$

unitér transzformációs mátrixnak elemei, mely az adott

$$F_{nn'} = < n \mid F \mid n' >$$

mátrixot az

$$F_{kk'} = f_k \delta_{kk'}$$

diagonális alakra transzformálja. A transzformált mátrix diagonális elemei éppen az f_k sajátértékekkel egyenlőek.

Végül megemlítjük, hogy a *Dirac*-formalizmus segítségével igen egyszerűen megkaphatjuk valamely F hermitikus operátor ún. *spektrális dekompozícióját*, vagyis F előállítását az f_k sajátértékek és a $P_k = |k><k|$ projekciós operátorok segítségével. A sajátvektorok rendszerének teljességét kifejező

$$\sum_k P_k = \sum_k |k><k| = 1$$

relációt megszorozva F-el, kapjuk, hogy

$$\sum_k F|k><k| = \sum_k f_k |k><k| = F,$$

vagyis

$$F = \sum_k f_k P_k . \tag{27.7.26}$$

Az F operátor sajátértékproblémáját tehát a következőképpen is megfogalmazhatjuk: keresendő egy olyan ortonormált $|k>$ bázis, hogy az F operátor a bázisvektorokhoz tartozó $P_k = |k><k|$ projekciós operátorok lineáris kombinációja legyen. Az f_k sorfejtési együtthatók épp az F operátor sajátértékeivel lesznek azonosak.

A fenti definíciók és szabályok a *Dirac*-féle szimbólikát ekvivalenssé teszik a korábbi jelöléstechnikánkkal. A kvantumelméleti számítások során mindkét jelölésmódot szokás használni, attól függően, hogy melyik a kényelmesebb.

HUSZONNYOLCADIK FEJEZET

LIPPMANN–SCHWINGER SZÓRÁSELMÉLET

1. §. Bevezetés

A modern fizika legtöbb ágának nélkülözhetetlen eszköze a szórási folyamatok vizsgálata. Az anyag szerkezetére, az elemi részecskék tulajdonságaira, kölcsönhatásaira, a nukleáris erők természetére, a magok szerkezetére vonatkozó – sokszor még igen hiányos – információinkat szóráskísérletekből nyerjük.

Az alábbiakban bemutatásra kerülő szórási formalizmust LIPPMANN és SCHWINGER dolgozták ki 1950-ben. Mint látni fogjuk, formalizmusunk a szórási folyamatok egységes és egzakt tárgyalását teszi lehetővé. A *Lippmann–Schwinger*-szóráselmélet – hasonlóan a többi manapság használatos szóráselmélethez, elválaszthatatlan az S mátrix formalizmustól.

Az S mátrixot egymástól függetlenül WHEELER (1937) és HEISENBERG (1943) vezették be. Az S mátrix formalizmus az évek során a fizika több ágában rendkívül gyümölcsözőnek bizonyult. Szemléltetésül (a teljesség igénye nélkül) néhány példát említünk.

A magfizikában a rugalmatlan szórási folyamatokra BREIT, WIGNER, PEIERLS, BETHE, PLACZEK és mások kidolgozták az ún. többcsatornás szóráselméletet, mely azóta is alapvetően fontos szerepet játszik a magszerkezetek tanulmányozásában.

A kvantumelektrodinamika éppúgy, mint az elemirész fizika, szinte elképzelhetetlen az S mátrix formalizmus nélkül, melyből a diszperziós relációk és a *Regge*-pólusok elmélete alakult ki.

Mint látni fogjuk, a *Lippmann–Schwinger*-egyenlethez a *Schrödinger*-egyenletből jutunk egzakt matematikai lépések során. Fizikai tartalma nem több és nem más, mint a *Schrödinger*-egyenleté. Ugyanakkor a *Lippmann–Schwinger*-egyenlet nem csupán szórási problémák megoldására alkalmas, kvantumátmenetek is tárgyalhatók ezen egységes formalizmus alapján.

Az alábbiakban végig $\frac{h}{2\pi} = 1$ egységrendszerben dolgozunk.

2. §. Kölcsönhatási reprezentáció

A szórási folyamatban a rendszer két, egymással kölcsönható részecskéből (melyek egyike, vagy mindkettő lehet összetett rendszer, pl. atommag) áll. A kölcsönhatásról feltesszük, hogy zérushoz tart, amennyiben a két kölcsönható részecske egymástól a térben távol van. Más szóval feltesszük, hogy a kölcsönhatás

rövid hatótávolságú, tehát a részecskék a potenciál hatósugarán kívül, jó közelítéssel szabadon mozognak. (A hosszúhatótávolságú (*Coulomb* v. gravitációs) terekben lezajló szórási folyamatokat itt nem tárgyaljuk.) Ennek megfelelően a rendszer teljes *Hamilton*-operátorát két tagra bontjuk,

$$H = H_0 + \mathcal{H}, \tag{28.2.1}$$

ahol H_0 az ún. aszimptotikus operátor, saját vektorai a rendszer kezdeti és végállapotának vektorai, melyeket $|\, i >$, $|\, f >$, ... vektorokkal jelölünk. Megjegyezzük, hogy ezen vektorok a problémától függően lehetnek egyrészecske állapottér vektorok (pl. potenciálszórás), de lehetnek bonyolult két- vagy többrészecske állapotvektorok annak megfelelően, hogy a H_0 aszimptotikus operátor milyen rendszert ír le.

A (2.1) egyenletben szereplő második tag, a $\mathcal{H}$ operátor írja le a két szóródó rendszer kölcsönhatását, melyet perturbáló operátornak nevezünk. A fentiekből természetesen következik, hogy $\mathcal{H}$-tól nem követelünk meg mást, mint a rövid hatótávolságot, tehát $r \to \infty$-re $\frac{1}{r}$-nél gyorsabban tartson zérushoz. Általában $\mathcal{H}$ csatolási állandója nem kicsiny.

Mivel feladatunk a szórás folyamatának, azaz $\mathcal{H}$ hatásának vizsgálata, célszerűnek látszik az

$$i \frac{d}{dt} |\, \psi(t) > = (H_0 + \mathcal{H}) |\, \psi(t) > \tag{28.2.2}$$

Schrödinger-egyenletből a H_0-lal kapcsolatos időfüggést kiiktatni. Ezt a

$$|\, \overline{\psi}(t) > = e^{iH_0 t} |\, \psi(t) > \tag{28.2.3}$$

unitér transzformációval érjük el, ugyanis (2.2)-be behelyettesítve $|\, \psi(t) >$-nek (2.3)-ból adódó kifejezését,

$$e^{-iH_0 t} \frac{d}{dt} |\, \overline{\psi}(t) > = \mathcal{H} e^{-iH_0 t} |\, \overline{\psi}(t) >,$$

ahonnan az egyenletet balról szorozva $e^{iH_0 t}$-vel és bevezetve a

$$\overline{\mathcal{H}}(t) = e^{iH_0 t} \mathcal{H} e^{-iH_0 t} \tag{28.2.4}$$

jelölést, a rendszer állapotvektorának $|\, \overline{\psi}(t) >$ kölcsönhatási reprezentációbeli alakjára érvényes *Schrödinger*-egyenletet kapjuk

$$i \frac{d}{dt} |\, \overline{\psi}(t) > = \overline{\mathcal{H}}(t) |\, \overline{\psi}(t) >. \tag{28.2.5}$$

Látható tehát, hogy a rendszer állapotának időbeli változását a kölcsönhatási reprezentációban valóban a $\overline{\mathcal{H}}$ operátor „vezérli".

Mivel a rendszer $|\psi(t)>$ állapotvektorát az e^{iH_0t} unitér transzformációnak vetettük alá, nyilvánvalóan bármely fizikai mennyiség F operátorát transzformálnunk kell az

$$\bar{F}(t) = e^{iH_0t} F e^{-iH_0t} \tag{28.2.6}$$

egyenlet szerint, hogy a mérhető $<\psi(t)|F|\psi(t)>$ mennyiség reprezentációfüggetlen maradjon.

(2.6)-ból levezethetjük az $\bar{F}(t)$ operátor

$$\frac{d}{dt}\bar{F}(t) = i(\bar{H}_0\bar{F} - \bar{F}\bar{H}_0) \tag{28.2.7}$$

mozgásegyenletét, melynek felírásánál felhasználtuk, hogy a *Schrödinger*-reprezentációbeli F operátor időfüggetlen, valamint azt a (2.6)-ból triviálisan következő tényt, hogy $\bar{H}_0 = H_0$.

Megjegyezzük, hogy a (2.3) és (2.6) egyenletekből világosan látszik, hogy a két reprezentáció $t = 0$-kor összeesik.

Látható továbbá, hogy a kölcsönhatási reprezentációban az $\bar{F}(t)$ operátorral leírt fizikai mennyiség időpontbani várható értékének ismeretéhez szükségképpen egyidejűleg meg kell oldanunk a (2.5) és a (2.7) egyenleteket. Valójában azonban a (2.7) egyenletet megoldottnak tekinthetjük, mivel megállapodásunk szerint H_0 sajátértékproblémája ismert.

3. §. Az S operátor

A szórásprobléma megoldásához, mint láttuk, ismernünk kell a kölcsönható rendszer állapotvektorát bármely t időpillanatban, azaz meg kell oldani a (2.5) egyenletet adott $\overline{\mathcal{H}}$ operátor esetén.

Ahelyett azonban, hogy közvetlenül a (2.5) állapotegyenletet oldjuk meg, vizsgáljuk az

$$i\frac{d}{dt}U(t) = \overline{\mathcal{H}}(t)U(t) \tag{28.3.1}$$

operátoregyenletet.

Belátható ezen egyenlet – egyelőre még ismeretlen megoldásainak következő tulajdonsága:

Legyen $U_1(t)$ és $U_2(t)$ a (3.1) egyenlet két tetszőleges megoldása. Bebizonyítjuk, hogy ezen két operátorból képezett

$$U_1^+(t)U_2(t)$$

szorzat időtől független operátor lesz, azaz

$$\frac{d}{dt}U_1^+(t)U_2(t) = 0\,. \tag{28.3.2}$$

Mivel $U_1(t)$, $U_2(t)$ (3.1) megoldásai, tehát

$$i\frac{d}{dt}U_2(t) = \overline{\mathcal{H}}(t)U_2(t)$$

és

$$-i\frac{d}{dt}U_1^+(t) = U_1^+(t)\overline{\mathcal{H}}(t).$$

Az első egyenletet balról $U_1^+(t)$-vel, a másodikat pedig jobbról $U_2(t)$-vel szorozva és a két egyenletet összeadva, (3.2) állításunkat könnyen igazolhatjuk.

(3.2) állításunk fontos következménye, hogy speciálisan

$$U^+(t)U(t) = \text{konstans.} \qquad (28\ 3.3)$$

Tekintsük most (3.1) két speciális megoldását, melyeket $U_+(t)$-vel és $U_-(t)$-vel jelölünk, és kezdeti feltételként kikötjük, hogy

$$U_+(-\infty) = 1 \quad \text{és} \quad U_-(+\infty) = 1 \qquad (28.3.4)$$

legyen.

A (3.3) alatti tételből következik, hogy mindkét operátor unitér, azaz

$$U_\pm^+(t)\ U_\pm(t) = 1, \qquad (28.3.5)$$

mivel $U_\pm^+(\mp\infty)U_\pm(\mp\infty) = 1$ a (3.4) kikötésünk szerint.

Definiáljuk a következő, időtől független operátort:

$$S = U_-^+U_+, \qquad (28.3.6)$$

melyről belátható, hogy

$$S = U_+(+\infty) \quad \text{és} \quad S^+ = U_-(-\infty),$$

valamint bizonyítani tudjuk, hogy unitér, azaz

$$S^+S = SS^+ = 1.$$

(S-nek (3.6) definícióját felhasználva, állításunk minden további nélkül belátható.)

A fentiekben bevezetett $U_+(t)$, $U_-(t)$, S operátorok fizikai tartalmát a következő gondolatmenettel érzékeltetjük:

A szóbanforgó fizikai rendszer $t = -\infty$-kor és $t = +\infty$-kor (tehát a kölcsönhatás „bekapcsolása" előtt és „kikapcsolása" után) ismert, $|\overline{\psi}(-\infty)>$, ill. $|\overline{\psi}(+\infty)>$ állapotban van. Amennyiben az $U_+(t)$, $U_-(t)$ operátorok megoldásai a (3.1) operátoregyenletnek, úgy a

$$|\overline{\psi}(t)> = U_+(t)\,|\overline{\psi}(-\infty)>,$$

valamint a

$$|\overline{\psi}(t)> = U_-(t)|\overline{\psi}(+\infty)>$$

vektorok megoldásai a (2.5) egyenletnek. Továbbá vegyük észre, hogy

$$|\overline{\psi}(+\infty)> = U_+(+\infty)\,|\overline{\psi}(-\infty)> = S\,|\overline{\psi}(-\infty)>. \qquad (28.3.7)$$

Tehát az $U_+(t)$, $U_-(t)$ unitér operátorok ismeretében meg tudjuk mondani adott kezdeti (vég-) állapot esetén, hogy a rendszer t időpillanatban milyen állapotban van. Hasonlóan, S ismeretében adott kezdeti, $|\overline{\psi}(-\infty)>$ állapot esetén ismertnek tekinthetjük a $|\overline{\psi}(+\infty)>$ végállapotot. (Nyilvánvaló, – l. (3.1)-t – hogy mind az $U_+(t)$, $U_-(t)$ operátorok, mind pedig S függvénye a szóbanforgó kölcsönhatásnak.)

A fentiek értelmében tehát meg kell oldanunk a (3.1) egyenletet az $U_+(t)$, ill. $U_-(t)$ operátorokra a (3.4) kezdeti feltételeket figyelembe véve. (3.1)-et $t' = -\infty$-től $t' = t$-ig integrálva,

$$U_+(t) = 1 - i \int_{-\infty}^{t} \overline{\mathcal{H}}(t')U_+(t')dt'. \tag{28.3.8}$$

Ezen integrálegyenlet ekvivalens a (3.1) differenciálegyenlettel és tartalmazza a (3.4) határfeltételt is. Hasonló egyenletre jutunk $U_-(t)$-vel kapcsolatban is,

$$U_-(t) = 1 + i \int_{t}^{\infty} \overline{\mathcal{H}}(t')U_-(t')dt'. \tag{28.3.9}$$

Mindkét egyenletet iterációs módszerrel oldjuk meg, vagyis kiindulunk az

$$U_+^{(0)}(t) = 1$$

nulladik közelítésből, melyet (3.8) jobboldalába helyettesítve nyerjük az

$$U_+^{(1)}(t) = 1 - i \int_{-\infty}^{t} dt_1 \overline{\mathcal{H}}(t_1)$$

első közelítést. Ezt ismét (3.8) jobboldalába írva jutunk a második közelítésre:

$$U_+(t) = 1 - i \int_{-\infty}^{t} dt_1 \overline{\mathcal{H}}(t_1) + (-i)^2 \int_{-\infty}^{t} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \overline{\mathcal{H}}(t_1)\overline{\mathcal{H}}(t_2).$$

Az egyre magasabbrendű közelítéseket mindig (3.8) jobboldalába helyettesítve, végül az

$$U_+(t) = 1 + \sum_{N=1}^{\infty} (-i)^N \int_{-\infty}^{t} dt_1 \ldots \int_{-\infty}^{t_{N-1}} dt_N \overline{\mathcal{H}}(t_1) \ldots \overline{\mathcal{H}}(t_N) \tag{28.3.10}$$

kifejezést kapjuk $U_+(t)$-re. Hasonlóan

$$U_-(t) = 1 + \sum_{N=1}^{\infty} (i)^N \int_{t}^{\infty} dt_1 \ldots \int_{t_{N-1}}^{\infty} dt_N \overline{\mathcal{H}}(t_1) \ldots \overline{\mathcal{H}}(t_N). \tag{28.3.11}$$

Mindkét operátor explicit kifejezéséből látható, hogy amennyiben a $\mathcal{H}$ kölcsönhatás csatolási állandója kicsiny, úgy a végtelen sort valahol az első néhány tag után levághatjuk. Általában azonban ezt nem tehetjük meg (vö. a 2. § elején elmondottakkal).

Az $U_+(t)$-ra vonatkozó (3.10) megoldás birtokában $S = U_+(+\infty)$ alapján az S operátorra a következő kifejezést kapjuk:

$$S = 1 + \sum_{N=1}^{\infty} (-i)^N \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{-\infty}^{t_{N-1}} dt_N \overline{\mathcal{H}}(t_1)\overline{\mathcal{H}}(t_2)\ldots\overline{\mathcal{H}}(t_N). \quad (28.3.12)$$

A (3.12) kifejezésből S-nek egy további tulajdonságát olvashatjuk le. Belátható ugyanis, hogy

$$\overline{\mathcal{H}}(t + \delta t_0) = \overline{\mathcal{H}}(t) + i[H_0\overline{\mathcal{H}}(t) - \overline{\mathcal{H}}(t)H_0]\delta t_0, \quad (28.3.13)$$

ahol δt_0 kis időintervallum. ($\overline{\mathcal{H}}(t + \delta t_0)$ *Taylor*-sorát képezve, δt_0-ban magasabbrendű tagokat elhagyva, és a (2.7) mozgásegyenletet $\overline{\mathcal{H}}$-ra alkalmazva, állításunk igazolható.)

(3.13)-t felhasználva igazolhatjuk, hogy tetszőleges számú tényezőre (3.13)-hoz hasonló kifejezés írható, vagyis

$$\overline{\mathcal{H}}(t_1 + \delta t_0)\ldots\overline{\mathcal{H}}(t_N + \delta t_0) = \overline{\mathcal{H}}(t_1)\ldots\overline{\mathcal{H}}(t_N) +$$

$$+ i[H_0\overline{\mathcal{H}}(t_1)\ldots\overline{\mathcal{H}}(t_N) - \overline{\mathcal{H}}(t_1)\ldots\overline{\mathcal{H}}(t_N)H_0]\delta t_0. \quad (28.3.14)$$

Ha (3.14) mindkét oldalát $t_1, \ldots, t_N$ szerint integráljuk, és ezt megismételjük $N = 1, 2, \ldots, \infty$ tényező esetén, az eredményeket $(-i)^N$-nel szorozzuk, összegezve és az így kapott eredményhez 1-et hozzáadva, a következő egyenlőséget kapjuk:

$$S = S + i[H_0S - SH_0]\delta t_0. \quad (28.3.15)$$

(A baloldalon $t_1 + \delta t_0 = t_1', \ldots$ helyettesítést végeztük az integrációs változókban.)

A (3.15) egyenlőség tetszőleges δt_0-ra nyilván csak akkor teljesül, ha

$$H_0S = SH_0. \quad (28.3.16)$$

Felhívjuk azonban a figyelmet arra, hogy (3.16) *nem* S, hanem a H_0 operátor megmaradását fejezi ki, S ugyanis nem hermitikus operátor, tehát nem egy fizikai mennyiséghez rendelt operátor. Ugyanakkor azonban unitér voltából és (3.16) tulajdonságából fakad, hogy a H_0 operátor a szórási folyamat során állandó marad. Ugyanis felhasználva (3.7)-et

$$<\overline{\psi}(\infty) \mid H_0 \mid \overline{\psi}(\infty)> = <\psi(-\infty) \mid S^+H_0S \mid \overline{\psi}(-\infty)>$$

$$= <\overline{\psi}(-\infty) \mid H_0 \mid \overline{\psi}(-\infty)>. \quad (28.3.17)$$

H_0 várható értéke a kezdeti és a végállapotban ugyanaz lesz.

4. §. Az átmeneti valószínűség meghatározása

Legyen a rendszer $t = -\infty$-kor a H_0 operátor i-edik sajátállapotában, melyre

$$H_0 \mid i> = E_i \mid i>. \quad (28.4.1)$$

Feltettük, hogy a kölcsönhatás véges hatótávolságú, tehát mindaddig, míg a szórásban résztvevő részecskék egymástól elegendő távol mozognak, a rendszert a

$$|\psi(t)> = e^{-iE_it} |i>$$

stacionárius állapotvektor írja le, melynek a

$$|\bar{\psi}(t)> = |i>$$

vektor felel meg a kölcsönhatási reprezentációban.

A kölcsönhatás ismeretében feladatunk annak meghatározása, hogy adott $|i>$ kezdeti állapot esetén milyen valószínűséggel kerül a rendszer valamely $|f>$ végállapotba.

Az előző §-ban láttuk, hogy az S operátor – definíció szerint – adott $|\bar{\psi}(-\infty)>$ kezdeti állapotból előállítja a $|\bar{\psi}(+\infty)>$ végállapotot. Tehát az

$$S_{fi} = <f|S|i> \tag{28.4.2}$$

mátrixelem lesz annak valószínűségi amplitúdója, hogy a rendszer $|i>$ kezdeti állapotból az $|f>$ végállapotba kerül.

Következő lépésként írjuk S helyébe annak (3.12) alatt felírt, $\bar{\mathcal{H}}$-operátorokkal kifejezett alakját

$$S_{fi} = \delta_{fi} - i\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 <f|\bar{\mathcal{H}}(t_1)|i> + \\ + (-i)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 <f|\bar{\mathcal{H}}(t_1)\bar{\mathcal{H}}(t_2)|i> + \ldots \tag{28.4.3}$$

H helyébe a (2.4) definíciós egyenletet írjuk és bevezetjük az

$$<f|\mathcal{H}|i> = \mathcal{H}_{fi}$$

jelölést. Ezek után az átmeneti valószínűség amplitúdójának első közelítéséül az

$$S_{fi}^{(1)} = \delta_{fi} - i\mathcal{H}_{fi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E_f-E_i)t}dt = \delta_{fi} - 2\pi i\mathcal{H}_{fi}\delta(E_f - E_i)$$

kifejezést kapjuk.

Az

$$S_{fi}^{(2)} = S_{fi}^{(1)} + (-i)^2\sum_n \mathcal{H}_{fn}\mathcal{H}_{ni}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{i(E_f-E_n)t_1}\int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{i(E_n-Ei)t_2}$$

második közelítésben először a t_2 szerinti integrálást végezzük el. Mivel az integrandus $t_2 = -\infty$-ben határozatlan, kiegészítjük az integrált egy $e^{\eta t_2}$ tényezővel, ahol η kis pozitív szám, mellyel a végeredményben majd zárushoz konvergálhatunk. (Az $e^{\eta t_2}$ tényezőt tekinthetjük az adiabatikus bekapcsolás matematikai kifejezéseként, vagyis a kölcsönhatást $\bar{\mathcal{H}}(t)$ helyett $\bar{\mathcal{H}}(t)e^{\eta t}$ írja le.) Ezzel

$$S_{fi}^{(2)} = S_{fi}^{(1)} - 2\pi i\sum_n \frac{\mathcal{H}_{fn}\mathcal{H}_{ni}}{E_i - E_n + i\eta}\,\delta(E_f - E_i).$$

Az itt vázolt módon számíthatjuk S_{fi} egyre magasabbrendű közelítéseit, melyek végeredményben az

$$S_{fi} = \delta_{fi} - 2\pi i \left[\mathcal{H}_{fi} + \sum_n \frac{\mathcal{H}_{fn}\mathcal{H}_{ni}}{E_i - E_n + i\eta} + \right.$$

$$\left. + \sum_{n,m} \frac{\mathcal{H}_{fn}\mathcal{H}_{nm}\mathcal{H}_{mi}}{(E_i - E_n + i\eta)(E_i - E_m + i\eta)} + \ldots \right] \delta(E_f - E_i) =$$

$$= \delta_{fi} - 2\pi i R_{fi} \delta(E_f - E_i) \qquad (28.4.4)$$

kifejezésre vezetnek, ahol R_{fi}-vel jelöltük a szögletes zárójelben álló sor összegét. R_{fi}-t reakciómátrixnak nevezzük. A reakciómátrix kiszámítása céljából írjuk fel R_{fi}-t a következő alakban:

$$R_{fi} = \mathcal{H}_{fi} + \sum_n \frac{\mathcal{H}_{fn}}{E_i - E_n + i\eta} \left[\mathcal{H}_{ni} + \sum_m \frac{\mathcal{H}_{nm}\mathcal{H}_{mi}}{E_i - E_m + i\eta} + \ldots \right]. \qquad (28.4.5)$$

A jobboldalon fellépő szögletes zárójelben ismét a reakciómátrix egy eleme, nevezetesen R_{ni} lép fel. Tehát:

$$R_{fi} = \mathcal{H}_{fi} + \sum_n \frac{\mathcal{H}_{fn}}{E_i - E_n + i\eta} R_{ni}. \qquad (28.4.6)$$

Ez egy mátrixegyenlet, melyből az R_{fi} reakciómátrix kiszámítható.

Az S_{fi} mátrixelem abszolút értékének négyzete adja meg az $|i> \to |f>$ átmenet valószínűségét. (4.4) abszolút értékének négyzete $f \neq i$ esetén a következő lesz:

$$|S_{fi}|^2 = 4\pi^2 |R_{fi}|^2 \delta^2(E_f - E_i) = 2\pi |R_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \int_{-\infty}^{\infty} dt. \qquad (28.4.7)$$

Mivel a (4.7)-ben szorzótényezőként fellépő t szerinti integrál (az átmenet időtartama) végtelen, célszerű az időegységre eső átmeneti valószínűséget megadnunk:

$$w_{fi} = 2\pi |R_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i). \qquad (28.4.8)$$

Ha a $\mathcal{H}$ kölcsönhatási operátor egy igen kis perturbációnak tekinthető, akkor a reakciómátrix (4.5) sorából elég az első tagot megtartani. Ebben a közelítésben $R_{fi} = \mathcal{H}_{fi}$ és az egységnyi időre eső átmeneti valószínűség

$$w_{fi} = 2\pi |\mathcal{H}_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \qquad (28.4.9)$$

lesz. Ezt a formulát elsőízben DIRAC vezette le az időbeli változásokra vonatkozó perturbációszámítás segítségével. (4.9)-t a *Dirac*-féle első közelítésnek nevezzük.

Vizsgáljuk most meg, S unitér volta milyen következménnyel jár az R_{fi} reakciómátrixra vonatkozóan. S operátor unitér voltát mátrixalakban a következőképpen

fejezzük ki:

$$\sum_n (S^+)_{kn} S_{ni} = \sum_n S^*_{nk} S_{ni} = \delta_{ki} . \tag{28.4.10}$$

Helyettesítsük (4.10) baloldalára a (4.4) kifejezést, és végezzük el a lehetséges összevonásokat. Végeredményül a

$$2\pi i(R_{ki} - R^*_{ik}) = 4\pi^2 \sum_n R^*_{nk} R_{ni} \delta(E_n - E_i) \tag{28.4.11}$$

relációt kapjuk.

Mint (4.8)-ból látható, a mérésekből közvetlenül R_{fi}-re kapunk felvilágosítást. A reakciómátrix birtokában az S operátort fogjuk meghatározni, hiszen láttuk S centrális szerepét. Ekkor viszont annak, hogy az eredményül kapott S operátor unitér legyen, szükséges és elégséges feltétele, hogy R_{fi}-k a (4.11) relációt kielégítsék. (4.11)-ből $k = i$ esetén az ún. optikai tétel,

$$\sum_n w_{ni} = -2ImR_{ii} , \tag{28.4.12}$$

adódik. Az optikai tétel kifejezi, hogy adott i kezdeti állapot esetén a reakciómátrix diagonális eleme egyértelműen meghatározza az összes végállapotba való átmenetet.

5. §. A Lippmann–Schwinger-egyenlet

Definiáljuk a következő, a z komplex síkon értelmezett operátort:

$$G(z) = \mathcal{H} + \mathcal{H} \frac{1}{z - H_0 - \mathcal{H}} \mathcal{H} , \tag{28.5.1}$$

melyet szórásoperátornak nevezünk.

Tételezzük fel, hogy ismerjük a rendszer $H = H_0 + \mathcal{H}$ energiaoperátorának $| \Phi_n >$ sajátvektorait, azaz birtokunkban van a

$$H | \Phi_n > = W_n | \Phi_n > \tag{28.5.2}$$

sajátértékegyenlet megoldásainak teljes rendszere.

Az (5.1)-ben definiált szórásoperátort akkor tekinthetjük ismertnek, ha az $< a | G(z) | b >$ mátrixelemet bármely $| a >$, $| b >$ állapotokra ismerjük. Írjuk fel az (5.1) operátoregyenletet mátrixalakban:

$$< a | G(z) | b > = < a | \mathcal{H} | b > + \\ + \sum_n \frac{< a | \mathcal{H} | \Phi_n > < \Phi_n | \mathcal{H} | b >}{z - W_n} . \tag{28.5.3}$$

Az (5.1) operátor- ill. (5.3) mátrixegyenletnél nehézséget okoz, hogy ismernünk kell az (5.2) sajátértékproblémát, mely követelmény ritkán teljesíthető.

Figyelembe véve az egyszerű algebrai átalakítás eredményeként adódó

$$\frac{1}{z-H}\mathcal{H}=\frac{1}{z-H_0}G(z)$$

egyenlőséget, az (5.1) explicit definíciós egyenlet helyett

$$G(z)=\mathcal{H}+\mathcal{H}\frac{1}{z-H_0}G(z) \tag{28.5.4}$$

implicit egyenletet, az ún. *Lippmann–Schwinger-egyenlet*et kapjuk. Mivel a H_0 operátor sajátértékproblémája ismert, az egyenlet implicit volta ellenére közelebb jutottunk célkitűzésünkhöz, hiszen (5.4) ugyan inhomogén lineáris egyenlet, azonban megoldása a mai számítógéppark mellett nem okoz nehézséget. Írjuk át (5.4)-et mátrixegyenletre. A $G_{fi} = <f \mid G \mid i>$ jelölés bevezetésével

$$G_{fi}(z)=\mathcal{H}_{fi}+\sum_n \frac{\mathcal{H}_{fn}G_{ni}(z)}{z-E_n}\,, \tag{28.5.5}$$

ahol $|f>$, $|i>$ a H_0 sajátállapotai. Az (5.5) egyenlet $G(z)$-nek a H_0 operátorhoz tartozó energiareprezentációbeli mátrixegyenlete.

(5.5)-ből látható, hogy a reakciómátrix a $G(z)$ operátor mátrixelemeinek speciális esete, nevezetesen

$$R_{fi}=G_{fi}(E_i+i\eta)\,. \tag{28.5.6}$$

Definiáljuk a $|\Phi_i>$ állapotvektorsokaságot a következő egyenlettel:

$$G(z)\mid i>\;=\mathcal{H}\mid\Phi_i>\,. \tag{28.5.7}$$

(5.7) lehetővé teszi, hogy a feltételezésünk szerint ismert $\mathcal{H}$ kölcsönhatás segítségével fejezzük ki az operátor mátrixelemeit:

$$<f\mid G\mid i>\;=<f\mid\mathcal{H}\mid\Phi_i>\,. \tag{28.5.8}$$

Ebben a megfogalmazásban természetesen $|\Phi_i>$-t kell meghatározni.

Szorozzuk be (5.4)-et jobbról $|i>$-vel és használjuk fel az (5.7) definíciós egyenletet. Ekkor $|\Phi_i>$-re a következő egyenletet kapjuk:

$$|\Phi_i>=|i>+\frac{1}{z-H_0}\mathcal{H}\,|\Phi_i>\,, \tag{28.5.9}$$

mely a $|\Phi_i>$ állapotvektorra vonatkozó *Lippmann–Schwinger*-egyenlet.

6. §. Potenciálszórás

A potenciálszórás problémájának eredményeit a huszonötödik fejezetben már megismertük, éppen ezért kézenfekvő az előző §-okban megismert *Lippmann–Schwinger*-szóráselmélet működését a potenciálszórás problémáján szemléltetni.

A $t = -\infty$-kor szabadon, **k** impulzussal mozgó részecske szóródik a $V(\mathbf{r})$ potenciálon (melyre a 2. § elején tett megállapítások érvényesek). Feladatunk meghatározni, mi a valószínűsége annak, hogy a részecske a szórás után, $t = +\infty$-ben **q** impulzussal végezzen szabadmozgást.

A rendszer teljes *Hamilton*-operátora ($\hbar = 2m = 1$) egységrendszerben

$$H = H_0 + \mathcal{H} = -\Delta + V(\mathbf{r}). \tag{28.6.1}$$

A $H_0 = -\Delta$ aszimptotikus operátor sajátvektorai (tehát a kezdeti és végállapot vektorai), melyek a

$$H_0 \mid \mathbf{k}> = k^2 \mid \mathbf{k}> \tag{28.6.2}$$

sajátértékegyenletet elégítik ki, *Dirac*-deltára normált síkhullámok:

$$\mid \mathbf{k} > = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{kr}}. \tag{28.6.3}$$

A szóráskísérletek eredményeként a $\sigma(\vartheta, \phi)$ differenciális hatáskeresztmetszetet kapjuk, ami a $w_{\mathbf{q},\mathbf{k}}$ átmeneti valószínűséggel a következő kapcsolatban áll:

$$\sigma(\vartheta, \phi) = \frac{\int_0^\infty w_{\mathbf{q},\mathbf{k}} q^2 dq}{s_0}, \tag{28.6.4}$$

ahol

$$w_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = 2\pi \mid (\mathbf{q}\mid R \mid \mathbf{k}) \mid^2 \delta(q^2 - k^2) \tag{28.6.5}$$

annak a valószínűsége, hogy a szóródó részecske a szóródás után **q** impulzusú lesz, és

$$s_0 = \rho v = \frac{2k}{(2\pi)^3} \tag{28.6.6}$$

a beeső monokromatikus részecskenyaláb áramsűrűsége. A (6.5)-ben fellépő *Dirac*-delta mutatja, hogy rugalmas szórásról van szó. (Megjegyezzük, hogy a reakciómátrix elemeire — mivel nem operátor mátrixeleméről van szó — megkülönböztetésül a $(\mathbf{q} \mid R \mid \mathbf{k})$ jelölést használjuk.)

Ha a (6.4)-ben kijelölt integrálást elvégezzük,

$$\sigma(\vartheta, \phi) = 4\pi^4 \mid (\mathbf{q} \mid R \mid \mathbf{k}) \mid^2 \tag{28.6.7}$$

eredményt kapjuk a hatáskeresztmetszetre.

Az alábbiakban megmutatjuk, hogy a szórásprobléma két megfogalmazása azonos eredményre vezet.

A szórásprobléma *Schrödinger*-egyenlete:

$$(\Delta + k^2)\psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}). \tag{28.6.8}$$

Ezen parciális differenciálegyenlet ekvivalens a következő integrálegyenlettel:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')dv' . \tag{28.6.9}$$

A ψ megoldás természetesen függ attól, mekkora impulzussal érkezik a részecske a szórócentrum erőterébe, erre utal a $\mathbf{k}$ index. Azt a tényt, hogy (6.9) valóban (6.8) megoldására vezet, könnyen beláthatjuk, ha észrevesszük, hogy a $(\Delta + k^2)\phi = -4\pi\rho$ általánosított *Poisson*-féle differenciálegyenlet megoldása:

$$\phi(\mathbf{r}) = \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \rho(\mathbf{r}')dv'.$$

(6.9) második tagja tehát már megoldása (6.8)-nak, de még nem teljesíti a

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \to e^{i\mathbf{kr}} + f(\vartheta, \phi)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{28.6.10}$$

határfeltételt. Jól tudjuk azonban, hogy valamely inhomogén differenciálegyenlet egy megoldása megkapható, ha egy speciális megoldásához hozzáadjuk a homogén egyenlet általános megoldását. Ezzel viszont eljutunk a (6.9)-ben felírt megoldáshoz.

Ezzel bebizonyítottuk, hogy a (6.9) integrálegyenlet ekvivalens a (6.8) differenciálegyenlettel és a (6.10) határfeltételt is tartalmazza. Pusztán a numerikus módszereket tekintve, melyekkel a szórásprobléma megoldásához akár a (6.8) és (6.10), akár (6.9) megoldása során eljutunk, célszerűbb a (6.9) integrálegyenletet megoldanunk, pontosabb eredményre jutunk.

Vegyük észre azt is, hogy (6.9) megoldásakor nem kell a teljes térre integrálnunk, hiszen az integrandusban szereplő $V(\mathbf{r})$ potenciáltól megköveteljük, hogy $r \to \infty$-re $\frac{1}{r}$-nél gyorsabban tartson zérushoz. Ez azt jelenti, hogy az integrálás során $\mathbf{r}'$-nek elegendő azt a térrészt befutni, ahol $V(\mathbf{r}') \neq 0$.

Felhasználva a

$$k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx kr - \mathbf{qr}' \tag{28.6.11}$$

közelítést, ahol $|\mathbf{q}| = |\mathbf{k}|$ és $\mathbf{q}$ iránya megegyezik $\mathbf{r}$ irányával, azaz $\mathbf{q}$ a szórás irányába mutat, (6.9)-et

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{kr}} - \frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\mathbf{qr}'} V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')dv' \tag{28.6.12}$$

közelítő alakra hozhatjuk. Az integráljel előtti szorzó nem más, mint egy kifutó gömbhullám, így tehát (6.10) és (6.12) összevetéséből adódik, hogy a kifutó gömbhullám amplitúdója

$$f(\vartheta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{qr}} V(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})dv. \tag{28.6.13}$$

$f(\vartheta, \phi)$ birtokában a $\sigma(\vartheta, \phi)$ hatáskeresztmetszetet is meghatároztuk (l. (25.1.6)-ot).

Most megmutatjuk, hogy (6.9) nem más, mint az állapotfüggvényre vonatkozó (5.9) *Lippmann–Schwinger*-egyenlet, mégpedig a

$$\mathcal{H} = V(\mathbf{r}), \qquad \frac{1}{z - H_0} = \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

szereposztással. Ehelyett azt – a fenti állításunkkal ekvivalens állítást – bizonyítjuk, hogy a

$$(\mathbf{q} \mid R \mid \mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) dv \tag{28.6.14}$$

reakciómátrixelem kielégíti a (4.6) *Lippmann–Schwinger*-egyenletet. (6.14) jobboldalán szereplő $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ definíció szerint (6.9) megoldása.

(6.9)-et (6.14)-be behelyettesítve, felhasználva a

$$-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{n}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2 - n^2 + i\eta} d^3\mathbf{n}$$

egyenlőséget, valamint bevezetve a

$$< \mathbf{q} \mid V \mid \mathbf{k} > = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} dv \tag{28.6.15}$$

jelölést, a

$$(\mathbf{q} \mid R \mid \mathbf{k}) = < \mathbf{q} \mid V \mid \mathbf{k} > + \int \frac{< \mathbf{q} \mid V \mid \mathbf{n} > (\mathbf{n} \mid R \mid \mathbf{k})}{k^2 - n^2 + i\eta} d^3\mathbf{n} \tag{28.6.16}$$

összefüggésre jutunk, mellyel állításunkat igazoltuk.

(6.13) és (6.14) összevetéséből adódik, hogy

$$f(\vartheta, \phi) = -2\pi^2 (\mathbf{q} \mid R \mid \mathbf{k}), \tag{28.6.17}$$

ahol $|\mathbf{q}| = |\mathbf{k}|$. Ezzel viszont a

$$\sigma(\vartheta, \phi) = |f(\vartheta, \phi)|^2 = 4\pi^4 |(\mathbf{q} \mid R \mid \mathbf{k})|^2$$

(6.7)-ben már másmódon kapott végeredményre jutunk.

7. §. Centrális erőtér

Érdemes az előző fejezetben kapott eredményeket felírni arra az elég gyakori esetre, amikor

$$V(\mathbf{r}) = V(r), \tag{28.7.1}$$

vagyis az erőteret leíró potenciál gömbszimmetrikus.

Ha V valóban teljesíti a (7.1) feltételt, úgy (6.15) a $P_l(\cos\vartheta)$ *Legendre*-polinomok szerint sorba fejthető:

$$<\mathbf{q} \mid V \mid \mathbf{k}> = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) V_l(q, k) P_l(\cos\vartheta), \tag{28.7.2}$$

ahol a független változók a be- és kilépő impulzus abszolút értéke, q és k, valamint az általuk bezárt szög, ϑ. (A probléma centrálszimmetrikus voltából következik, hogy a ϕ azimutszög nem lép fel független változóként.)

(7.2)-höz hasonlóan fejtsük sorba a $G(z)$ szórásoperátor mátrixelemét is:

$$<\mathbf{q} \mid G(z) \mid \mathbf{k}> = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) G_l(q, k, z) P_l(\cos\vartheta). \tag{28.7.3}$$

A (7.2), (7.3) sorfejtéseket behelyettesítve a

$$<\mathbf{q} \mid G(z) \mid \mathbf{k}> = <\mathbf{q} \mid V \mid \mathbf{k}> + \\ + \int \frac{<\mathbf{q} \mid V \mid \mathbf{n}><\mathbf{n} \mid G(z) \mid \mathbf{k}>}{z - n^2} \, d^3\mathbf{n} \tag{28.7.4}$$

definíciós egyenletbe, a *Lippmann – Schwinger*-egyenlet parciális hullámok szerint sorfejtett alakjához jutunk, melynek l-edik tagja:

$$G_l(q, k, z) = V_l(q, k) + \int_0^{\infty} V_l(q, n) \frac{4\pi n^2 dn}{z - n^2} G_l(n, k, z). \tag{28.7.5}$$

Láttuk, hogy a szórási amplitúdó

$$f(\vartheta, \phi) = -2\pi^2 <\mathbf{q} \mid G(k^2 + i\eta) \mid \mathbf{k}>$$

alakú, melynek sorfejtett alakja gömbszimmetrikus potenciál esetén

$$f(\vartheta) = -2\pi^2 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) G_l(k, k, k^2 + i\eta). \tag{28.7.6}$$

A gömbszimmetrikus szórásprobléma megoldásánál tehát először megoldjuk az adott $V(r)$ birtokában a (7.5) egyenletet, majd kiszámítjuk $f(\vartheta)$-t (melynek birtokában a $\sigma(\vartheta)$ hatáskeresztmetszet számítható).

A $G_l(k, k, k^2 + i\eta)$ mennyiség, egyetlen változótól, k-tól függ (η végtelen kicsiny pozitív szám.) Ahhoz, hogy G_l-re meg tudjuk oldani a (7.5) egyenletet, vizsgáljuk meg a

$$T_l(q, k, p) = G_l(q, k, p^2 + i\eta) \tag{28.7.7}$$

mennyiséget. Azonnal látható, hogy $T_l(q, k, p)$ nem szimmetrikus a változókban. Továbbá $T_l(q, k, p)$ kielégíti a

$$T_l(q, k, p) = V_l(q, k) + \int_0^{\infty} \frac{V_l(q, n) T_l(n, k, p)}{p^2 - n^2 + i\eta} 4\pi n^2 dn \tag{28.7.8}$$

Lippmann – Schwinger-egyenletet.

Felhasználva az

$$\frac{1}{E+i\eta} = \frac{\mathcal{S}}{E} - i\pi\delta(E)$$

összefüggést, (7.8)-at átalakítjuk:

$$T_l(q,k,p) = V_l(q,k) + \mathcal{S}\int_0^\infty \frac{V_l(q,n)T_l(n,k,p)}{p^2-n^2}\,4\pi n^2 dn -$$

$$- 2\pi^2 ipV_l(q,p)T_l(p,k,p). \qquad (28.7.9)$$

Definiáljuk az $A_l(q,k,p)$ valós mennyiséget:

$$A_l(q,k,p) = V_l(q,k) + \mathcal{S}\int_0^\infty \frac{V_l(q,n)A_l(n,k,p)}{p^2-n^2}\,4\pi n^2 dn \qquad (28.7.10)$$

(mivel rugalmas szórásról van szó, V_l szükségképpen valós mennyiség), melynek bevezetésével a problémát visszavezethetjük a (7.10) integrálegyenlet megoldására. Ugyanis keressük a T_l-re vonatkozó egyenlet megoldását

$$T_l(q,k,p) = A_l(q,k,p) + \xi_l(q,p)T_l(p,k,p) \qquad (28.7.11)$$

alakban. A (7.11)-ben feltételezett megoldást helyettesítsük (7.9)-be és vonjuk le az így nyert egyenletből az A_l-re vonatkozó egyenletet. Végeredményünket, a

$$\xi_l(q,p)T_l(p,k,p) = \mathcal{S}\int_0^\infty \frac{V_l(q,n)\xi_l(n,p)T_l(p,k,p)}{p^2-n^2}\,4\pi n^2 dn -$$

$$- 2\pi^2 ipV_l(q,p)T_l(p,k,p)$$

egyenletet $T_l(p,k,p)$-vel végigoszthatjuk, (ezt (7.11) speciális választása teszi lehetővé):

$$\xi_l(q,p) = \mathcal{S}\int_0^\infty \frac{V_l(q,n)\xi_l(n,p)}{p^2-n^2}\,4\pi n^2 dn - 2\pi^2 ipV_l(q,p),$$

mely (7.10) figyelembevételével mutatja, hogy

$$\xi_l(q,p) = -2\pi^2 ipA_l(q,p,p). \qquad (28.7.12)$$

Ezen eredményünket (7.11)-be helyettesítve kapjuk:

$$T_l(q,k,p) = A_l(q,k,p) - 2\pi^2 ipA_l(q,p,p)T_l(p,k,p), \qquad (28.7.13)$$

melynek speciális esete

$$T_l(p,k,p) = A_l(p,k,p) - 2\pi^2 ipA_l(p,p,p)T_l(p,k,p),$$

ahonnan

$$T_l(p,k,p) = \frac{A_l(p,k,p)}{1 + 2\pi^2 ip A_l(p,p,p)} . \tag{28.7.14}$$

Ha (7.14)-et (7.13)-ba helyettesítjük, a

$$T_l(q,k,p) = A_l(q,k,p) - 2\pi^2 ip \frac{A_l(q,p,p)A_l(p,k,p)}{1 + 2\pi^2 ip A_l(p,p,p)} \tag{28.7.15}$$

ún. *diszperziós relációt* kapjuk eredményül. Fizikai tartalma az optikai tétellel azonos, és a $T_l(q,k,p)$ komplex mennyiséget (7.15) alapján valóban meg tudjuk határozni, ha az $A_l(q,k,p)$ valós mennyiséget ismerjük.

Láttuk, hogy a (7.6) szórási amplitúdó hogyan fejezhető ki a szórási mátrix sorfejtésében fellépő $G_l(k,k,k^2 + i\eta)$ mennyiséggel. (7.7)-et figyelembe véve

$$f(\vartheta) = -2\pi^2 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) T_l(k,k,k) P_l(\cos\vartheta). \tag{28.7.16}$$

Tudjuk, hogy

$$\sigma(\vartheta) = |f(\vartheta)|^2 \tag{28.7.17}$$

és a σ totális hatáskeresztmetszet

$$\sigma = \int_0^{\pi} \sigma(\vartheta) 2\pi \sin\vartheta d\vartheta. \tag{28.7.18}$$

(7.16)-ot behelyettesítve (7.17)-be, majd a kapott eredményt (7.18)-ba írva

$$\sigma = 16\pi^5 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |T_l(k,k,k)|^2. \tag{28.7.19}$$

A (7.15) diszperziós relációból azonnal leolvasható, hogy

$$|T_l(k,k,k)|^2 = -\frac{1}{2\pi^2 k} Im T_l(k,k,k). \tag{28.7.20}$$

mely a (4.12) optikai tétel más megfogalmazása, ugyanis az előreszórás amplitúdója

$$f(0) = -2\pi^2 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) T_l(k,k,k) .$$

Így azonnal látható, hogy (7.20) nem más, mint a (25.2.17) alatti

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} Im f(0)$$

jól ismert reláció megfelelője.

Ugyanakkor vegyük észre, hogy a már ismert

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l(k)} - 1) P_l(\cos\vartheta)$$

parciális hullámokra bontott szórási amplitúdó $\delta_l(k)$ fázisállandói és $T_l(k, k, k)$ között az

$$\frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_l(k)} - 1) = 2\pi^2 T_l(k, k, k) \tag{28.7.21}$$

összefüggés adódik, ahonnan $T_l(k, k, k)$ és $A_l(k, k, k)$ értéke

$$\begin{aligned} T_l(k, k, k) &= \frac{1}{2\pi^2 k(i - \operatorname{ctg} \delta_l)} \\ A_l(k, k, k) &= \frac{\operatorname{tg} \delta_l}{2\pi^2 k}. \end{aligned} \tag{28.7.22}$$

8. §. Centrális szórás koordinátareprezentációban

(6.15) és (7.2) összevetéséből (felhasználva a síkhullám sorfejtését szférikus *Bessel*-függvények szerint) a következő összefüggésekre jutunk.

$$V_l(q, k) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty j_l(q, r) V(r) j_l(kr) r^2 dr, \tag{28.8.1}$$

ill.

$$V(r) j_l(kr) = 4\pi \int_0^\infty V_l(q, k) j_l(kr) r^2 dr. \tag{28.8.2}$$

Mind (8.1), mind pedig (8.2) kapcsolatot teremt az impulzusreprezentációbeli $V_l(q, k)$ ill. koordinátareprezentációbeli $V(r)$ potenciál között. (8.2) felírásánál felhasználtuk, hogy

$$\int_0^\infty j_l(qr) j_l(qr') q^2 dq = \frac{\pi}{2r^2} \delta(r - r').$$

Definiáljuk a szórási probléma radiális hullámfüggvényét a következő egyenlettel:

$$V(r) f_l(r, k) = 4\pi \int_0^\infty A_l(q, k, k) j_l(qr) q^2 dq, \tag{28.8.3}$$

melynek inverze:

$$A_l(q, k, k) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty j_l(qr) V(r) f_l(r, k) r^2 dr. \tag{28.8.4}$$

(8.4)-et és (8.1)-et a (7.10) definíciós egyenletbe helyettesítve, a szórási probléma

$f_l(r, k)$ radiális hullámfüggvényére az

$$f_l(r, k) = j_l(kr) + 4\pi \int_0^\infty K_l(r, r', k) V(r') f_l(r', k) r'^2 dr' \qquad (28.8.5)$$

egyenletet kapjuk, ahol a $K_l(r, r'; k)$ *Green*-függvény:

$$K_l(r, r', k) = \frac{\mathcal{S}}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{j_l(nr)\, j_l(nr')}{k^2 - n^2} n^2 dn . \qquad (28.8.6)$$

Ha tehát adott $V(r)$ esetén $f_l(r, k)$-ra (8.5)-öt megoldjuk, a belőle számított $A_l(k, k, k)$ mennyiség (7.22) alapján a $\delta_l(k)$ fázisállandót is egyértelműen meghatározza. Ugyanis:

$$A_l(k, k, k) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty j_l(kr) V(r) f_l(r, k)\, r^2 dr . \qquad (28.8.7)$$

Ebből pedig

$$\operatorname{tg} \delta_l = -k \int_0^\infty j_l(kr) V(r) f_l(r, k) r^2 dr. \qquad (28.8.8)$$

A fázisállandóknak a (8.5) és (8.8) egyenletek alapján való számítása lényegében ugyanaz a módszer, mint amit a huszonötödik fejezet 6. §-ában, mint integrálegyenlet módszert megismertünk.

HUSZONKILENCEDIK FEJEZET

A KVANTUMMECHANIKAI TÖBBTEST PROBLÉMA

1. §. A többtest probléma Schrödinger-egyenlete

A *Newton*-féle klasszikus mechanikában az N számú részecskéből álló rendszert egy olyan „tömegpont"-ként tárgyalhatjuk, mely az $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2 \ldots, x_N, y_N, z_N$ koordinátákkal jellemzett $3N$ dimenziós térben mozog. Ezt a teret a rendszer *konfigurációs terének* nevezzük. A rendszer pillanatnyi helyzetét a konfigurációs térnek egy pontja reprezentálja, e pont koordinátáinak megadása egyenértékű a háromdimenzióban levő N számú részecske összes koordinátájának megadásával, azaz a rendszer pillanatnyi konfigurációjának leírásával.

A kvantumelméleti tárgyalásnál a Ψ hullámfüggvény az összes szabadsági fokhoz tartozó koordinátáknak és a t időnek függvénye. Ha a könnyebb áttekinthetőség kedvéért a részecskék spinjét egyelőre nem vesszük tekintetbe, akkor

$$\Psi = \Psi(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_k, y_k, z_k, \ldots, x_N, y_N, z_N, t). \tag{29.1.1}$$

Ezt a hullámfüggvényt az N-részecske rendszer konfigurációs térbeli hullámfüggvényének nevezzük. Ha $d\tau$-al jelöljük a konfigurációs tér egy infinitezimális elemét:

$$d\tau = dx_1 dy_1 dz_1 \ldots dx_k dy_k dz_k \ldots dx_N dy_N dz_N, \tag{29.1.2}$$

akkor

$$w(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_k, y_k, z_k, \ldots, x_N, y_N, z_N, t) d\tau = \Psi^* \Psi d\tau \tag{29.1.3}$$

adja meg annak valószínűségét, hogy a rendszert reprezentáló pont a t időben a konfigurációs tér $d\tau$ térfogatelemében van, vagyis hogy az első részecske koordinátái a háromdimenziós tér $dx_1 dy_1 dz_1$ térfogatelemébe, a k-ik részecske koordinátái a $dx_k dy_k dz_k$ térfogatelembe stb. esnek.

Ha keressük annak valószínűségét, hogy a k-adik részecske koordinátái a háromdimenziós tér $dx_k dy_k dz_k$ térfogatelemébe essenek, függetlenül attól, hogy a többi részecske hol helyezkedik el, akkor (1.3)-at integrálnunk kell az összes részecske koordinátái szerint a k-adikat kivéve:

$$w(x_k, y_k, z_k, t) dx_k dy_k dz_k = [\int \Psi^* \Psi d\tau_k] dx_k dy_k dz_k, \tag{29.1.4}$$

ahol $d\tau_k$ a konfigurációs tér azon alterének egy térfogateleme, melyet

$$d\tau = dx_k dy_k dz_k d\tau_k \tag{29.1.5}$$

definiál. Hasonlóképpen írhatjuk fel annak valószínűségét, hogy a k-adik részecske a $dx_k dy_k dz_k$ és ugyanakkor az l-edik részecske a $dx_l dy_l dz_l$ térfogatelemben

tartózkodjék:

$$w(x_k, y_k, z_k, x_l, y_l, z_l, t)dx_k dy_k dz_k dx_l dy_l dz_l =$$
$$= [\int \Psi^* \Psi d\tau_{kl}] dx_k dy_k dz_k dx_l dy_l dz_l, \tag{29.1.6}$$

ahol $d\tau_{kl}$ a következőképpen van definiálva:

$$d\tau = dx_k dy_k dz_k dx_l dy_l dz_l d\tau_{kl}. \tag{29.1.7}$$

Ezek alapján a Ψ hullámfüggvényből kiszámíthatjuk a rendszer bármely konfigurációjának, vagy bármelyik részecske helyzetének vagy bármely részecskepár elhelyezkedésének, stb. valószínűségét. Ugyanígy, a huszonhetedik fejezetben megismert általános törvények alapján, Ψ-ből bármelyik, minket érdeklő operátor várható értéke és bármely állapot valószínűsége is meghatározható.

A többtestprobléma Ψ hullámfüggvénye eleget tesz az általánosan érvényes állapotegyenletnek:

$$\frac{ih}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi, \tag{29.1.8}$$

ahol most H a részecske-rendszer *Hamilton*-operátora. Ez általában három részből épül fel: a részecskék T kinetikus energiájából, a részecskéknek a külső erőtértől (vagy erőterektől) származó U potenciális energiájából és végül a részecskék egymással való kölcsönhatásának V energiájából.

Ha a részecskék tömegeit rendre $m_1, \ldots, m_N$-el jelöljük, akkor a kinetikus energia a következő lesz:

$$T = \frac{p_1^2}{2m_1} + \ldots + \frac{p_N^2}{2m_N} = \sum_{k=1}^{N} \frac{p_k^2}{2m_k}.$$

Az impulzusoperátorok (22.6.7) kifejezéseit ide behelyettesítve, kapjuk, hogy

$$T = \sum_{k=1}^{N} \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m_k} \Delta_k \right), \tag{29.1.9}$$

ahol

$$\Delta_k = \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \tag{29.1.10}$$

a k-adik részecske koordinátáira ható *Laplace*-operátor.

A részecske-rendszer potenciális energiáját a következőképpen írhatjuk fel:

$$U = U_1(\mathbf{r}_1) + \ldots + U_N(\mathbf{r}_N) = \sum_{k=1}^{N} U_k(\mathbf{r}_k), \tag{29.1.11}$$

ahol $\mathbf{r}_k = (x_k, y_k, z_k)$ a k-adik részecske helyzetvektora és U_k a k-adik részecskére ható külső erő potenciálja.

A részecskék egymással való kölcsönhatásának energiájáról feltesszük, hogy

az a részecskepárok kölcsönhatási energiáiból épül fel:

$$V = V_{12}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + V_{13}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) + \ldots + V_{N-1,N}(\mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N),$$

vagyis

$$V = \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^{N} V_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l), \tag{29.1.12}$$

ahol V_{kl} a k-adik és az l-edik részecske közötti kölcsönhatás, mely csak e részecskék kölcsönös távolságától függ.

A teljes *Hamilton*-operátor tehát:

$$H = T + U + V = \sum_{k=1}^{N} \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m_k} \Delta_k + U_k(\mathbf{r}_k) \right) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^{N} V_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l). \tag{29.1.13}$$

A részecske-rendszer stacionárius állapotait és a rendszer lehetséges energianívóit a *Hamilton*-operátor sajátértékproblémája határozza meg. A sajátértékegyenlet, amit a rendszer (időtől független) *Schrödinger*-egyenletének nevezünk, a következő lesz:

$$H\Psi = \left\{ \sum_{k=1}^{N} \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m_k} \Delta_k + U_k(\mathbf{r}_k) \right) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^{N} V_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l) \right\} \Psi = E\Psi. \tag{29.1.14}$$

Ezen egyenlet megoldása a kvantummechanikai többtestprobléma alapvető feladata. Ez általában áthidalhatatlan matematikai nehézségekhez vezet, ugyanis egy tetszőleges N-részecske rendszer *Schrödinger*-egyenlete általában nem oldható meg. A többtestprobléma tárgyalásánál ezért igen jelentős szerepük van a H-val felcserélhető operátorok (mozgásállandók) meghatározásának, mert ezek révén a rendszer viselkedésére egzakt pontosságú megállapításokat tehetünk anélkül, hogy az (1.14) *Schrödinger*-egyenlet konkrét megoldását ismernénk. A rendszer részletes tulajdonságainak ismeretéhez már elengedhetetlen a Ψ sajátfüggvény meghatározása. Ilyen esetekben közelítő módszerekre vagyunk utalva. A fejezet hátralevő részében az általánosan érvényes mozgásállandókkal és a legfontosabb közelítő módszerekkel fogunk foglalkozni.

2. §. Az impulzusmegmaradási törvény. A súlypont mozgása

Az alábbiakban azzal a fontos speciális esettel foglalkozunk, amikor a részecskerendszerre külső erők nem hatnak, tehát $U_k = 0$. A klasszikus mechanika szerint ebben az esetben a rendszer **P** teljes impulzusa mozgásállandó lesz és a rendszer súlypontja vagy nyugalomban van (ha $\mathbf{P} = 0$) vagy egyenes vonalú egyenletes mozgást végez (ha $\mathbf{P} \neq 0$). Meg fogjuk mutatni, hogy a kvantummechanikában érvényben maradnak a klasszikus mechanika ezen tételei.

A részecske-rendszer teljes impulzusa az egyes részecskék impulzusvektorainak eredője:

$$\mathbf{P} = \sum_{k=1}^{N} \mathbf{p}_k = \frac{h}{2\pi i} \sum_k \operatorname{grad}_k , \tag{29.2.1}$$

ahol

$$\operatorname{grad}_k = \left(\frac{\partial}{\partial x_k}, \frac{\partial}{\partial y_k}, \frac{\partial}{\partial z_k} \right)$$

a k-adik részecskére ható gradiens-operátor.

A kvantumelmélet általános eredményei értelmében **P**-ről akkor mondhatjuk, hogy mozgásállandó, ha felcserélhető a *Hamilton*-operátorral, mely esetünkben az (1.9) kinetikus és az (1.12) kölcsönhatási energiából épül fel:

$$H = T + V = \sum_{k=1}^{N} \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m_k} \Delta_k \right) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^{N} V_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l). \tag{29.2.2}$$

Nyilvánvaló, hogy a (2.1) **P** operátor felcserélhető a kinetikus energia T operátorával, hiszen mindkettő csak differenciáloperátorokat tartalmaz és a különböző differenciálások sorrendje felcserélhető. Tehát

$$\mathbf{P}T - T\mathbf{P} = 0.$$

Most megmutatjuk, hogy **P** felcserélhető a H operátor második tagjával, a V kölcsönhatási energiával is. A k-adik és az l-edik részecske kölcsönhatását leíró $V_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)$ nyilván felcserélhető az összes részecske impulzusával, kivéve éppen a k-adik és az l-edik részecskét. Azaz

$$\mathbf{P}V_{kl} - V_{kl}\mathbf{P} = (\mathbf{p}_k + \mathbf{p}_l)V_{kl} - V_{kl}(\mathbf{p}_k + \mathbf{p}_l) . \tag{29.2.3}$$

De mivel

$$\mathbf{p}_k V_{kl} - V_{kl}\mathbf{p}_k = \frac{h}{2\pi i} \operatorname{grad}_k V_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)$$

és

$$\mathbf{p}_l V_{kl} - V_{kl}\mathbf{p}_l = \frac{h}{2\pi i} \operatorname{grad}_l V_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l) = -\frac{h}{2\pi i} \operatorname{grad}_k V_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l) ,$$

ezért (2.3) jobboldalán zérust kapunk. Tehát:

$$\mathbf{P}V_{kl} - V_{kl}\mathbf{P} = 0 .$$

Ha ezt összegezzük minden részecskepárra, úgy a

$$\mathbf{P}V - V\mathbf{P} = 0$$

eredményhez jutunk, amivel bebizonyítottuk, hogy **P** felcserélhető V-vel is. Mivel **P** felcserélhető a *Hamilton*-operátor mindkét tagjával, ezért felcserélhető magával H-val is. Látjuk tehát, hogy a **P** összimpulzus a mozgás állandója lesz.

Tudjuk, hogy két v. több egymással felcserélhető operátor sajátfüggvényei közösek. Ezért a (2.2) energiaoperátor sajátfüggvényeinek meghatározásánál úgy járhatunk el, hogy először megkeressük a P impulzus sajátfüggvényeit (ami matematikai szempontból viszonylag egyszerű feladat) és ezután H sajátfüggvényeit **P** sajátfüggvényei között keressük meg.

A részecskék $x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N$ koordinátái helyett új koordinátákat vezetünk be a rendszer jellemzésére, a rendszer súlypontjának X, Y, Z koordinátáit:

$$X = \frac{m_1x_1 + m_2x_2 + \ldots + m_Nx_N}{m_1 + m_2 + \ldots + m_N},$$

$$Y = \frac{m_1y_1 + m_2y_2 + \ldots + m_Ny_N}{m_1 + m_2 + \ldots + m_N}, \tag{29.2.4}$$

$$Z = \frac{m_1z_1 + m_2z_2 + \ldots + m_Nz_N}{m_1 + m_2 + \ldots + m_N}$$

és a súlyponthoz viszonyított $3N - 3$ relatív koordinátát. A relatív koordináták megválasztásának többféle módja lehetséges; sokszor igen alkalmasak az ún. *Jacobi*-koordináták, melyeket a következőképpen definiálunk:

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= x_1 - x_2, \\
\xi_2 &= \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2} - x_3, \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
\xi_k &= \frac{m_1x_1 + \ldots + m_kx_k}{m_1 + \ldots + m_k} - x_{k+1}, \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
\xi_{N-1} &= \frac{m_1x_1 + \ldots + m_{N-1}x_{N-1}}{m_1 + \ldots + m_{N-1}} - x_N
\end{aligned} \tag{29.2.5}$$

és hasonló módon transzformáljuk az y és z koordinátákat is:

$$\begin{aligned}
\eta_k &= \frac{m_1y_1 + \ldots + m_ky_k}{m_1 + \ldots + m_k} - y_{k+1} \\
\zeta_k &= \frac{m_1z_1 + \ldots + m_kz_k}{m_1 + \ldots + m_k} - z_{k+1}
\end{aligned} \qquad (k = 1, 2, \ldots, N-1). \tag{29.2.5a}$$

Az így bevezetett koordináták a kéttest problémában használt (23.17.3) súlyponti és (23.17.4) relatív koordináták értelemszerű általánosításai.

Ha a T kinetikus energia operátorát kifejezzük az új koordinátákkal, akkor kapjuk, hogy

$$T = -\frac{h^2}{8\pi^2M}\Delta - \sum_{k=1}^{N-1}\frac{h^2}{8\pi^2\mu_k}\Delta_k, \tag{29.2.6}$$

ahol

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2},$$

$$\Delta_k = \frac{\partial^2}{\partial \xi_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta_k^2}$$

a súlyponti, ill. a *Jacobi*-koordinátákra ható *Laplace*-operátorok, továbbá M a rendszer teljes tömege, μ_k pedig az első k részecskének és a $(k+1)$-edik részecskének redukált tömege:

$$M = m_1 + m_2 + \ldots + m_N = \sum_{k=1}^{N} m_k,$$

$$\frac{1}{\mu_k} = \frac{1}{\sum_{l=1}^{k} m_l} + \frac{1}{m_{k+1}}.$$

A (2.2) *Hamilton*-operátor az új koordinátákkal a következő alakban írható fel:

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 M}\Delta - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{h^2}{8\pi^2 \mu_k}\Delta_k + V(\xi_1, \eta_1, \zeta_1, \ldots, \xi_{N-1}, \eta_{N-1}, \zeta_{N-1}). \tag{29.2.7}$$

E *Hamilton*-operátor lényeges tulajdonsága az, hogy a kölcsönhatási energiában nem szerepelnek a súlypont koordinátái. Éppen ezért, ha a *Jacobi*-koordináták helyett tetszőleges más $q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}$ relatív koordinátákat vezetünk be, akkor ez a koordináta-transzformáció (2.7)-nek csak a második és harmadik tagját érinti, a súlypont kinetikus energiájának $-\frac{h^2}{8\pi^2 M}\Delta$ operátorát változatlanul hagyja. Következésképpen (2.7) helyett írhatjuk, hogy

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 M}\Delta + H_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}), \tag{29.2.8}$$

ahol H_r a relatív mozgás *Hamilton*-operátora és nem tartalmazza a súlypont koordinátáit.

(2.4) és (2.5) alapján felírhatjuk a (2.1) impulzusoperátort is az új koordináták segítségével. Kapjuk, hogy

$$P_x = \frac{h}{2\pi i}\sum_{k=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_k} = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial X},$$

$$P_y = \frac{h}{2\pi i}\sum_{k=1}^{N}\frac{\partial}{\partial y_k} = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial Y}, \tag{29.2.9}$$

$$P_z = \frac{h}{2\pi i}\sum_{k=1}^{N}\frac{\partial}{\partial z_k} = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial Z}.$$

Ez az operátor alakilag megegyezik a tömegpont impulzusának (22.6.5) operátorával, csak a tömegpont koordinátái helyébe most a rendszer súlypontjának koordinátái lépnek. A tömegpont impulzusának sajátfüggvényét a (23.1.5) alatti síkhullám kifejezés adja meg, melyben szereplő A amplitúdó a koordinátáktól független konstans. Hasonló alakban írhatjuk fel a (2.9) impulzusoperátor sajátfüggvényét is, azzal a lényeges különbséggel, hogy most a síkhullám amplitúdója csak a súlyponti koordinátáktól kell, hogy független legyen, a relatív mozgást leíró $q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}$ koordinátáknak tetszőleges kifejezése lehet. A (2.9) impulzusoperátor sajátfüggvényei tehát a következő alakúak:

$$\psi(X, Y, Z, q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}) = e^{iK(\alpha X+\beta Y+\gamma Z)}\psi_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}). \tag{29.2.10}$$

Valóban, ha (2.10)-re alkalmazzuk a (2.9) operátorokat, akkor a

$$P_x\psi = \frac{hK\alpha}{2\pi}\psi, \quad P_y\psi = \frac{hK\beta}{2\pi}\psi, \quad P_z\psi = \frac{hK\gamma}{2\pi}\psi \tag{29.2.11}$$

relációkat kapjuk, ami mutatja, hogy (2.10) valóban sajátfüggvénye P-nek.

Az előzőekben megbeszéltek szerint a *Hamilton*-operátor sajátfüggvényeit is a (2.10) alakban, vagyis a teljes impulzus sajátfüggvényei között kell keresnünk. Behelyettesítve (2.10)-et, a (2.8) *Hamilton*-operátor

$$H\psi = \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 M}\Delta + H_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3})\right)\psi = E\psi$$

sajátértékegyenletébe, kapjuk, hogy

$$H_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3})\psi_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}) = \left(E - \frac{h^2K^2}{8\pi^2 M}\right)\psi_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}). \tag{29.2.12}$$

A súlypont mozgásának kinetikus energiája (2.11) szerint éppen a

$$\frac{P^2}{2M} = \frac{h^2K^2}{8\pi^2 M} \tag{29.2.13}$$

kifejezéssel egyenlő. Bevezetjük a relatív mozgás

$$E_r = E - \frac{h^2K^2}{8\pi^2 M} \tag{29.2.14}$$

energiáját, ezzel (2.12) a következő sajátértékegyenletbe megy át:

$$H_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3})\psi_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}) = E_r\psi_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}). \tag{29.2.15}$$

Ezzel a súlypont mozgását és a relatív mozgás vizsgálatát sikerült teljesen szétválasztani. A súlyponti mozgást a rendszer belső szerkezetétől függetlenül egy

síkhullám kifejezés írja le. Ez azt jelenti, hogy pl. egy atom súlypontjának haladó mozgását egy ugyanolyan *deBroglie*-anyaghullám jellemzi, mint egyetlen elektronét. A *deBroglie*-féle anyaghullámok tehát a kvantumrendszerek esetében a részecskék mozgásának általános törvényszerűségéről adnak számot, mely független a részecskék egyedi tulajdonságaitól.

A kvantumrendszer belső szerkezetének meghatározásához a (2.15) *Schrödinger*-egyenletet kell megoldani. Ez az egyenlet viszont független a súlyponti koordinátáktól és ezért 3 független változóval kevesebbet tartalmaz, mint az eredeti (1.14) *Schrödinger*-egyenlet. A változók számának csökkentése gyakorlati szempontból mindig jelentős, mert a matematikai nehézségek a változók számával rohamosan nőnek.

Különösen egyszerű a helyzet akkor, ha a részecske-rendszert az ún. súlyponti koordinátarendszerben vizsgáljuk, melyet az jellemez, hogy benne a súlypont nyugszik, azaz az összimpulzus zérus. $K = 0$ esetén a (2.10)-ben szereplő síkhullámkifejezés $+1$-be megy át és a súlypont mozgásának (2.13) energiája zérus lesz. Súlyponti rendszerben tehát

$$\psi = \psi_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}) \quad \text{és} \quad E = E_r, \tag{29.2.16}$$

vagyis a rendszer sajátfüggvénye a relatív mozgás sajátfüggvényével, az energia pedig a relatív mozgás energiájával egyenlő.

3. §. Az impulzusmomentum megmaradási törvénye

Legyenek $N_x^{(k)}$, $N_y^{(k)}$ és $N_z^{(k)}$ a k-adik részecske impulzusmomentumának komponensei. Ezek operátorai (l. huszonharmadik fejezet, 9. §):

$$\begin{aligned} N_x^{(k)} &= \frac{h}{2\pi i}\left(y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k}\right), \\ N_y^{(k)} &= \frac{h}{2\pi i}\left(z_k \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial z_k}\right), \\ N_z^{(k)} &= \frac{h}{2\pi i}\left(x_k \frac{\partial}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial}{\partial x_k}\right). \end{aligned} \tag{29.3.1}$$

A rendszer teljes impulzusnyomatéka az egyes részecskék impulzusnyomatékainak eredője lesz:

$$N_x = \sum_{k=1}^{N} N_x^{(k)}, \quad N_y = \sum_{k=1}^{N} N_y^{(k)}, \quad N_z = \sum_{k=1}^{N} N_z^{(k)}. \tag{29.3.2}$$

Elemi – de kissé hosszadalmas – számítással meggyőződhetünk arról, hogy a (3.2) operátorok felcserélhetők a (2.2) energiaoperátorral, tehát az **N** eredő impulzusmomentum a mozgás állandója. Az energia sajátfüggvények tehát egyben az impulzusmomentum sajátfüggvényei is lesznek, vagyis az energia sajátfüggvé-

nyeinek meghatározásánál elég az impulzusmomentum-sajátfüggvények terére szorítkozni.

Az impulzusmomentum-sajátfüggvények meghatározásához mindenekelőtt meg kell jegyeznünk, hogy míg a (3.2) N_x, N_y, N_z operátorok mindegyike felcserélhető a *H Hamilton*-operátorral, N_x, N_y és N_z *egymással nem felcserélhető* mennyiségek. (Ez lényeges eltérés az előző §-ban tárgyalt **P** összimpulzushoz képest, hiszen P_x, P_y, P_z nemcsak H-val, hanem egymással is felcserélhető operátorok voltak.) Az N_x, N_y, N_z operátorok csererelációit a (3.1), (3.2) definiáló egyenletek alapján vezethetjük le. Kapjuk:

$$N_xN_y - N_yN_x = \frac{ih}{2\pi} N_z,$$

$$N_yN_z - N_zN_y = \frac{ih}{2\pi} N_x, \tag{29.3.3}$$

$$N_zN_x - N_xN_z = \frac{ih}{2\pi} N_y,$$

továbbá:

$$N^2N_x - N_xN^2 = 0,$$

$$N^2N_y - N_yN^2 = 0, \tag{29.3.4}$$

$$N^2N_z - N_zN^2 = 0,$$

ahol $N^2 = N_x^2 + N_y^2 + N_z^2$ a teljes impulzusmomentum négyzetének operátora. Láthatjuk tehát, hogy bár (3.3) szerint N_x, N_y és N_z nem felcserélhető operátorok, (tehát közös sajátfüggvényrendszerük nincsen), az N^2 operátorral mindegyik komponens felcserélhető. Meghatározhatjuk tehát N^2 és valamelyik komponens, pl. N_z közös sajátfüggvényeit. Ezeket a közös sajátfüggvényeket fogjuk az impulzusmomentum sajátfüggvényeinek tekinteni.

Az impulzusmomentum sajátfüggvények meghatározása céljából a relatív mozgást leíró $q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}$ koordinátákat a következőképpen választjuk meg. Legyen a tömegpontrendszernek, mint *merev testnek*, a súlypont körüli elfordulását jellemző három *Euler*-szög ψ, ϑ, ϕ és legyenek $q_1, q_2, \ldots, q_{3N-6}$ a tömegpontrendszer konfigurációját a forgástól függetlenül megadó egyéb koordináták. Végeredményben tehát az egyes részecskék x_k, y_k, z_k ($k = 1, 2, \ldots, N$) koordinátái helyett a súlypont X, Y, Z koordinátáit, a súlypont körüli forgás ψ, ϑ, ϕ *Euler*-szögeit és az ezektől független $q_1, q_2, \ldots, q_{3N-6}$ konfigurációs koordinátákat vezetjük be:

$$(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N) \to (X, Y, Z, \psi, \vartheta, \phi, q_1, q_2, \ldots, q_{3N-6}). \tag{29.3.5}$$

A teljes impulzusmomentumot (3.1) és (3.2) alatt még az egyes részecskék x_k, y_k, z_k ($k = 1, 2, \ldots, N$) koordinátáival fejeztük ki. Ha ezeken az operátorokon a (3.5) koordinátatranszformációt végrehajtjuk, akkor olyan kifejezéseket kapunk, melyek csak a ψ, ϑ, ϕ *Euler*-szögeket tartalmazzák. Speciálisan, N^2-re és N_z-re

kapjuk, hogy

$$N^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \operatorname{ctg}\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\psi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) - \frac{2\cos\vartheta}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\psi}\right\}. \tag{29.3.6}$$

$$N_z = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial\psi}. \tag{29.3.7}$$

Ezek a kifejezések a tömegpont (23.9.1–2) impulzusmomentum operátora általánosításainak tekinthetők. (3.6) és (3.7) közös sajátfüggvényeinek meghatározása is hasonló módon történhet, mint az egyszerű tömegpont esetében, természetesen a helyzetet kissé elbonyolítja az, hogy most a ϑ polárszög mellett két azimutszög, ψ és ϕ lép fel. A számítások szerint N^2 és N_z sajátértékeire a (23.9.6) és (23.9.7) képletekkel azonos eredmények adódnak:

$$\begin{aligned} &N^2 \text{ sajátértékei: } \frac{l(l+1)h^2}{4\pi}, \quad \text{ahol } l = 0, 1, 2, \ldots, \\ &N_z \text{ sajátértékei: } \frac{mh}{2\pi}, \quad \text{ahol } m = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l. \end{aligned} \tag{29.3.8}$$

Ez az eredmény természetes következménye annak, hogy N^2 és N_z sajátértékeit a (3.3) és (3.4) csererelációk egyértelműen meghatározzák és ezek a csererelációk egyaránt érvényesek egyetlen tömegpontra és egy pontrendszerre. Lényeges eltérés azonban az, hogy míg egy tömegpont esetén az l és m kvantumszámok adott értékéhez csak egyetlen sajátfüggvény, az Y_m^l gömbfüggvény tartozott, pontrendszer esetén l és m adott értékéhez $2l + 1$ számú sajátfüggvény tartozik, melyeket egy k kvantumszámmal különböztetünk meg egymástól ($k = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l$). Az impulzusmomentum sajátfüggvényeket tehát az l, m, k kvantumszámok jellemzik, szokásos jelük: $D^l_{mk}(\psi, \vartheta, \phi)$. N^2 és N_z sajátértékegyenlete tehát:

$$\begin{aligned} N^2 D^l_{mk}(\psi, \vartheta, \phi) &= \frac{l(l+1)h^2}{4\pi} D^l_{mk}(\psi, \vartheta, \phi), \\ N_z D^l_{mk}(\psi, \vartheta, \phi) &= \frac{mh}{2\pi} D^l_{mk}(\psi, \vartheta, \phi). \end{aligned} \tag{29.3.9}$$

A $D^l_{mk}(\psi, \vartheta, \phi)$ sajátfüggvények részletes kiszámítását nem ismertetjük, csak a végeredményt közöljük:

$$D^l_{mk}(\psi, \vartheta, \phi) = R_{S,D,P}\left(\sin^2\frac{\vartheta}{2}\right)e^{i(m\psi + k\phi)}, \tag{29.3.10}$$

ahol

$$S = |m + k|, \quad D = |m - k|, \quad P = l - \frac{1}{2}(D + S), \tag{29.3.11}$$

továbbá

$$R_{S,D,P}(t) = = \sqrt{\frac{(1+D+S+2P)(D+S+P)!(D+P)!}{8\pi^2 P!(D!)^2(S+P)!}}\, t^{D/2}(1-t)^{S/2} \times$$

$$\times J_P(1+D+S, 1+D, t). \tag{29.3.12}$$

Ebben J_P a P-ed fokú *Jacobi*-polinomot jelöli:

$$J_P(A,B,t) = \frac{t^{1-B}(1-t)^{B-A}(B-1)!}{(P+B-1)!}\frac{d^P}{dt^P}\left[t^{P+B-1}(1-t)^{A+P-B}\right]. \tag{29.3.13}$$

A fentebb mondottak szerint N^2 és N_z sajátértékei nem határozzák meg egyértelműen az impulzusmomentum sajátfüggvényt: a probléma $(2l+1)$-szeresen degenerált. N^2 és N_z adott sajátértékeihez tartozó legáltalánosabb sajátfüggvény a $D^l_{mk}(\psi, \vartheta, \phi)$ függvényeknek a különböző k értékekhez tartozó lineárkombinációja lesz:

$$\sum_{k=-l}^{l} f_k D^l_{mk}(\psi, \vartheta, \phi).$$

Mivel N^2 és N_z felcserélhetőek az energiaoperátorral, ugyanilyen szerkezetű lesz a relatív mozgást leíró ψ_r sajátfüggvény is. Az f_k kombinálási együtthatók természetesen függvényei lesznek az *Euler*-szögektől független $q_1, q_2, \ldots, q_{3N-6}$ koordinátáknak. Tehát

$$\psi_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3}) = \sum_{k=-l}^{l} D^l_{mk}(\psi, \vartheta, \phi) f_k(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-6}). \tag{29.3.14}$$

Ha ψ_r-nek ezt a kifejezését behelyettesítjük a (2.15) *Schrödinger*-egyenletbe, akkor egy differenciálegyenletrendszert kapunk az f_k függvényekre, melynek megoldásával az E_r energiasajátértékek és a ψ_r sajátfüggvények meghatározhatók.

Összefoglalva megállapíthatjuk tehát, hogy a súlypont körüli forgás leválasztásával a probléma olyképpen egyszerűsödött, hogy a $3N-3$ számú változótól függő $\psi_r(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-3})$ helyett $2l+1$ számú $f_k(q_1, q_2, \ldots, q_{3N-6})$ függvényt kell meghatároznunk, melyek mindegyike már csak $3N-6$ számú változót tartalmaz.

Nézzük például a háromtest problémát. Ha a független koordinátáknak az egyes részecskék derékszögű koordinátáit tekintjük, akkor a ψ sajátfüggvény ezen változók függvénye lesz:

$$\psi = \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3). \tag{29.3.15}$$

Az X, Y, Z súlyponti koordináták és a ψ, ϑ, ϕ *Euler*-szögek bevezetése után már csak három szabadsági fok marad, melyeknek megfelelő koordináták a három részecske egymáshoz viszonyított helyzetét határozzák meg. Válasszuk e három koordinátának pl. a részecskék kölcsönös távolságait:

$$q_1 = r_{23},\ q_2 = r_{31},\ q_3 = r_{12}.$$

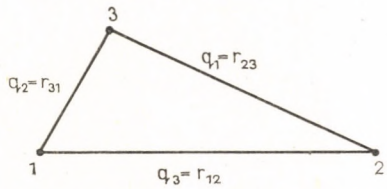
Ez a három koordináta egyértelműen meghatározza azt a háromszöget, melynek csúcspontjaiban vannak a részecskék (l. 98 ábrát).

Az újonnan bevezetett koordinátákkal kifejezett

$$\psi = \psi(X, Y, Z, \psi, \vartheta, \phi, r_{23}, r_{31}, r_{12}) \tag{29.3.16}$$

sajátfüggvény meghatározása lényegesen egyszerűbb lesz, mint az eredeti (3.15)-é, hiszen (X, Y, Z)-től, valamint (ψ, ϑ, ϕ)-től való függést egzaktul meg tudjuk adni, anélkül, hogy ismernénk a rendszer részletes dinamikáját. Valóban, (2.10) és (3.14) alapján írhatjuk, hogy

$$\psi = e^{iK(\alpha X+\beta Y+\gamma Z)} \sum_{k=-l}^{l} D^{l}_{mk}(\psi, \vartheta, \phi) f_k(r_{23}, r_{31}, r_{12}) . \tag{29.3.17}$$



98. ábra. Három részecske egymáshoz viszonyított helyzetét meghatározó r_{12}, r_{23}, r_{31} koordináták

A *Schrödinger*-egyenletet tehát nem a kilencváltozós (3.15) alatti ψ függvényre, hanem csak a háromváltozós f_k függvényekre kell megoldanunk.

Súlyponti rendszerben ($K = 0$) és zérus eredő impulzusmomentumú S-állapot esetén ($l = 0$) (3.17) tovább egyszerűsödik:

$$\psi = f(r_{23}, r_{31}, r_{12}) . \tag{29.3.18}$$

Az alapállapotbeli sajátfüggvény tehát csak a három relatív távolság függvénye lesz. Még egyszer kiemeljük, hogy ez a megállapításunk egzakt, semmilyen közelítést nem tartalmaz, gyakorlati szempontból azonban e tény figyelembevétele nagymértékben leegyszerűsíti a probléma megoldását.

4. §. Azonos részecskék. Pauli-elv

A hullámmechanikai többtestproblémában kitüntetetten fontos helyet foglalnak el azok a vizsgálatok, melyek azonos részecskékből felépülő rendszerekre vonatkoznak. Azonosaknak azokat a mikrorészecskéket tekintjük, melyeknek minden fizikai tulajdonságuk megegyezik, tehát egyenlő az m tömegük, e töltésük, s spinjük, stb. Azonos részecskék ugyanazon külső körülmények között tökéletesen megegyező módon viselkednek.

Álljon a rendszerünk N számú azonos részecskéből. A k-adik részecske koordinátáit foglaljuk össze az x_k szimbólumban, mely tartalmazza a részecske $\mathbf{r}_k$ helyzetvektorát és s_k spinkoordinátáját: $x_k = (\mathbf{r}_k, s_k)$.

A rendszer *Hamilton*-operátorát az (1.13) általános minta alapján írhatjuk fel. Lényeges azonban, hogy azonos részecskék esetén minden részecske azonos tömegű:

$$m_1 = m_2 = \ldots = m_N = m, \tag{29.4.1}$$

a külső erőtérnek az egyes részecskékre való hatását ugyanaz a potenciálfüggvény írja le:

$$U_1(x) = U_2(x) = \ldots = U_N(x) = U(x) \tag{29.4.2}$$

és végül bármely két részecske kölcsönhatása azonos:

$$V_{12}(x, x') = V_{13}(x, x') = \ldots = V_{N-1,N}(x, x'). \tag{29.4.3}$$

Ezek figyelembevételével a *Hamilton*-operátor a következőképpen alakul:

$$H(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \sum_{k=1}^{N} \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta_k + U(x_k) \right) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^{N} V(x_k, x_l). \tag{29.4.4}$$

Ha ebben a *Hamilton*-operátorban felcseréljük egymással a k-adik és az l-edik részecske koordinátáit, akkor H nem változik meg, hiszen x_k és x_l felcserélése után adódó operátor (4.4)-től csak az összegekben fellépő tagok sorrendjében különbözik. Tehát:

$$H(x_1, x_2, \ldots, x_k, \ldots, x_l, \ldots, x_N) = H(x_1, x_2, \ldots, x_l, \ldots, x_k, \ldots, x_N). \tag{29.4.5}$$

A *Hamilton*-operátornak ez a tulajdonsága alapvető, mert éppen ez fejezi ki a kvantummechanikai tárgyalásban a részecskék azonosságát: az azonos részecskékből álló rendszer *Hamilton*-operátora invariáns bármely részecskepár koordinátáinak felcserélésével szemben.

A koordináták felcserélésének áttekinthető tárgyalására vezessük be a permutációs operátorokat. A P_{kl} permutációs operátor hatása valamely $f(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ függvényre az x_k és x_l koordináták felcseréléséből áll:

$$P_{kl} f(x_1, x_2, \ldots, x_k, \ldots, x_l, \ldots, x_N) = f(x_1, x_2, \ldots, x_l, \ldots, x_k, \ldots, x_N). \tag{29.4.6}$$

Ha a P_{kl} permutációs operátort egy Hf alakú kifejezésre alkalmazzuk, akkor az x_k és x_l koordinátákat H-ban is és f-ben is fel kell egymással cserélnünk. De a *Hamilton*-operátor (4.5) szimmetriája miatt H ezen permutációkor változatlan marad, tehát az eredmény ugyanaz lesz, mintha x_k-t és x_l-et csak f-ben cserélnénk fel. Tehát

$$P_{kl} H f = H P_{kl} f.$$

Mivel ez tetszőleges f-re igaz, ezért írhatjuk, hogy

$$P_{kl} H = H P_{kl}. \tag{29.4.7}$$

A H operátor tehát felcserélhető valamennyi permutációs operátorral. A *Hamilton*-operátornak ez a tulajdonsága ekvivalens (4.5)-tel, tehát ismét a részecskék azonosságát fejezi ki.

Ezek után vizsgáljuk meg a P_{kl} operátorok hatását a rendszer $\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t)$ állapotfüggvényére. Könnyen beláthatjuk, hogy ha Ψ kielégíti az

$$\frac{ih}{2\pi}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \tag{29.4.8}$$

időtől függő *Schrödinger*-egyenletet, akkor $\Psi' = P_{kl}\Psi$ szintén kielégíti ezt az egyenletet. Ennek bizonyítására cseréljük fel (4.8)-ban az x_k és x_l koordinátákat, azaz alkalmazzuk P_{kl}-et az egyenlet mindkét oldalára. Kapjuk

$$\frac{ih}{2\pi}\frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{ih}{2\pi}\frac{\partial (P_{kl}\Psi)}{\partial t} = P_{kl}H\Psi = H(P_{kl}\Psi) = H\Psi',$$

amivel állításunkat igazoltuk is. Mondhatjuk tehát, hogy Ψ-vel együtt Ψ' is a rendszer egy-egy lehetséges állapotát fogja leírni. Természetesen Ψ'-re ismét alkalmazhatunk egy P_{rs} permutációs operátort és ezáltal a *Schrödinger*-egyenlet egy újabb $\Psi'' = P_{rs}\Psi'$ megoldásához jutunk, stb. Ily módon a

$$\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t) \tag{29.4.9}$$

állapotfüggvényből a *Schrödinger*-egyenletnek összesen $N!$ számú megoldását képezhetjük, melyek egymástól csak a részecskék koordinátáinak sorrendjében különböznek. Egy ilyen megoldást a

$$\Psi^{(\alpha)} = \Psi(x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2}, \ldots, x_{\alpha N}, t) \tag{29.4.10}$$

alakban írhatunk fel, ahol $(\alpha) = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)$ az $(1, 2, \ldots, N)$ számoknak egy permutációját jelöli.

A részecskék azonosságának elve értelmében a rendszer állapota nem függhet az egyes részecskék sorszámozásától, tehát a $\Psi^{(\alpha)}$ állapot nem különböztethető meg fizikailag a Ψ állapottól. Tudjuk, hogy azok az állapotfüggvények, melyek egy és ugyanazon fizikai állapothoz tartoznak, egymástól csupán egy egységnyi abszolút értékű fázistényezőben különbözhetnek. Tehát a részecskék azonosságából következik, hogy $\Psi^{(\alpha)} = e^{i\Theta(\alpha)}\Psi$, vagyis

$$\Psi(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \ldots, x_{\alpha_N}, t) = e^{i\Theta(\alpha)}\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t). \tag{29.4.11}$$

Az $e^{i\Theta(\alpha)}$ fázistényezők megállapítása céljából írjuk fel (4.11)-et az x_k és x_l koordináták inverziója esetére:

$$P_{kl}\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_k, \ldots, x_l, \ldots, x_N, t) = \Psi(x_1, x_2, \ldots, x_l, \ldots, x_k, \ldots, x_N, t) =$$
$$= e^{i\Theta(k,l)}\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_k, \ldots, x_l, \ldots, x_N, t). \tag{29.4.12}$$

Ez az egyenlet tulajdonképpen nem más, mint a P_{kl} operátor sajátértékegyenete. Azonos részecskékből álló rendszer Ψ állapotfüggvénye tehát sajátfüggvénye

lesz a P_{kl} permutációs operátoroknak, a megfelelő sajátérték az $e^{i\Theta(k,l)}$ fázistényezővel azonos.

Alkalmazzuk most P_{kl}-t még egyszer a (4.12) egyenlet mindkét oldalára:

$$P_{kl}^2\Psi = e^{i\Theta(k,l)}P_{kl}\Psi = e^{2i\Theta(k,l)}\Psi\,. \tag{29.4.13}$$

P_{kl}^2, vagyis a kétszer egymás után alkalmazott permutáció természetesen visszaállítja a koordináták eredeti sorrendjét, tehát P_{kl}^2 az egységoperátorral azonos. Ezért (4.13) baloldalán maga a Ψ függvény áll és innen következik, hogy

$$e^{2i\Theta(k,l)} = 1 \tag{29.4.14}$$

kell, hogy legyen. Ez a $0 \leq \Theta < 2\pi$ intervallumban két értékre teljesül:

$$\Theta(k, l) = 0, \text{ vagy } \Theta(k, l) = \pi. \tag{29.4.15}$$

Ezt (4.12)-be írva kapjuk, hogy a Ψ állapotfüggvény a következő tulajdonságú:

$$P_{kl}\Psi = \Psi, \tag{29.4.16}$$

vagy

$$P_{kl}\Psi = -\Psi. \tag{29.4.17}$$

Az első esetben az állapotfüggvényt szimmetrikusnak, a másodikban antiszimmetrikusnak nevezzük. Az első esetben az x_k és x_l koordináták felcserélése esetén Ψ változatlan marad, a második esetben előjelet vált. A részecskék azonosságának elvéből természetesen az is következik, hogy vagy minden részecskepárra vonatkozólag szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus. Nem lehetséges az, hogy Ψ a részecskék egy részének felcserélésével szemben szimmetrikus, más részével szemben antiszimmetrikus legyen. Vizsgáljuk meg ezt részletesen három részecske esetén. Tegyük fel, hogy $\Psi(x_1, x_2, x_3)$ olyan, hogy az első két helyen álló koordináta felcserélésekor előjelet vált, a második és a harmadik, valamint az első és a harmadik felcserélése változatlanul hagyja. Ekkor

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \Psi(x_3, x_2, x_1) = \Psi(x_3, x_1, x_2) = -\Psi(x_1, x_3, x_2) =$$
$$= -\Psi(x_1, x_2, x_3),$$

amiből következik hogy

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) \equiv 0.$$

Általában is belátható, hogy ha Ψ bizonyos részecskepárokra szimmetrikus, más részecskepárokra pedig antiszimmetrikus volna, akkor Ψ azonosan zérussal egyenlő.

Az azonos részecskékből álló rendszerek állapotfüggvényei tehát a szimmetriatulajdonságaik alapján két nagy osztályba sorolhatók: a szimmetrikus állapotoknál minden k, l-re (4.16), az antiszimmetrikus állapotoknál pedig minden k, l-re (4.17) teljesül. Most már könnyen felelhetünk arra a kérdésre is, hogy hogyan változik meg az állapotfüggvény egy (4.11) típusú általános permutáció esetén. Tudjuk, hogy az $(\alpha) = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)$ permutáció mindig felépíthető véges számú P_{kl} inverzió egymásutáni végrehajtásával. Szimmetrikus állapotfüggvény esetén

Ψ egyik inverzió esetén sem változik meg, következésképpen

$$\Psi(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \ldots, x_{\alpha_N}, t) = \Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t) \tag{29.4.18}$$

lesz. Antiszimmetrikus állapotfüggvény minden egyes inverziónál előjelet vált. Ha az inverziók száma páros, akkor végül is Ψ változatlan marad, ha pedig az inverziók száma páratlan, úgy Ψ előjelet fog váltani. Ha bevezetjük az $(\alpha) = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)$ permutáció előjelét a

$$(-1)^{\alpha} = \begin{cases} +1, & \text{ha az inverziók száma páros,} \\ -1, & \text{ha az inverziók száma páratlan} \end{cases} \tag{29.4.19}$$

definícióval, akkor az antiszimmetrikus állapotokat a következőképpen jellemezhetjük:

$$\Psi(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \ldots, x_{\alpha_N}, t) = (-1)^{\alpha}\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t). \tag{29.4.20}$$

Hogy az azonos részecskéknek egy bizonyos rendszere szimmetrikus vagy pedig antiszimmetrikus állapotú-e, ez csak a rendszert alkotó részecskék természetétől függ. A tapasztalat szerint a természetben mindkét típusú részecskék előfordulnak. Azon részecskék esetében, melyeknek spinje egész, tehát a spintől származó impulzusmomentumuk $\frac{h}{2\pi}$ egész számú többszöröse, a Ψ hullámfüggvény szimmetrikus lesz. Az ilyen részecskéket *Bose*-féle részecskéknek, vagy röviden *bozonok*nak nevezzük.

Ha viszont a részecskék spinje feles, azaz spinmomentumuk $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$-nek páratlan számú többszöröse, akkor a rendszer állapotfüggvénye antiszimmetrikus. Ezeket a részecskéket *Fermi*-féle részecskéknek, vagy *fermionok*nak nevezzük.

A fermionok legfontosabb tulajdonsága az, hogy eleget tesznek a *Pauli*-elvnek. A *Pauli*-elv az eredeti megfogalmazás szerint a következőt mondja ki: egy atomban nem lehet két vagy több olyan elektron, melyek egy és ugyanazon kvantumállapotban vannak, azaz mind a négy kvantumszámuk megegyezik.

Atomok esetén egy elektron kvantumállapotát az n, l, m és m_s kvantumszámok határozták meg: az n főkvantumszám az energiát, l a pályaimpulzusmomentum abszolút értékét, m a pályaimpulzusmomentum vetületét és m_s a spinmomentum vetületét. Az elektronállapotnak ezen adatokkal való jellemzése elsősorban az atomfizikában bír jelentőséggel. Általában egy elektron állapotát tetszőleges négy olyan mechanikai mennyiséggel jellemezhetjük, melyek egymástól függetlenek és egyidejűleg mérhetőek. Jelöljük ezeket K_1, K_2, K_3, K_4-gyel, a megfelelő elektron-állapot pedig legyen

$$\psi_{K_1K_2K_3K_4}(x) = \psi_K(x), \tag{29.4.21}$$

ahol bevezettük a $K = (K_1, K_2, K_3, K_4)$ összefoglaló jelölést. A *Pauli*-elv szerint egy fermion rendszerben nincs két vagy több olyan részecske, melyek ugyanazon ψ_K állapotban vannak.

A *Pauli*-elv ezen megfogalmazása csak közelítő érvényű, hiszen N részecske esetén általában nem rendelhetünk minden részecskéhez külön-külön egy $\psi_K(x)$

állapotfüggvényt, hanem csak az egész rendszert leíró $\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t)$ állapotfüggvényről beszélhetünk. A *Pauli*-elv szabatosan megfogalmazva a következőt mondja ki: *a fermionok rendszerében megmérve az egyes részecskék állapotát jellemző* $K = (K_1, K_2, K_3, K_4)$ *mennyiségeket, mindegyik lehetséges K értéknégyest legfeljebb csak egy részecske esetében kaphatjuk.*

A *Pauli*-elv levezethető a *Fermi*-részecskék hullámfüggvényének antiszimmetriájából. Fejtsük ugyanis sorba a $\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t)$ hullámfüggvényt a (4.21) egyrészecskeállapotok szerint:

$$\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t) = \sum_{K^{(1)}} \sum_{K^{(2)}} \ldots \sum_{K^{(N)}} c(K^{(1)}, K^{(2)}, \ldots, K^{(N)}, t) \Psi_{K^{(1)}}(x_1) \times$$

$$\times \psi_{K^{(2)}}(x_2) \ldots \psi_{K^{(N)}}(x_N) . \qquad (29.4.22)$$

Annak valószínűsége, hogy a K értéknégyes mérése az első elektron esetében a $K^{(1)}$ eredményre, a második elektronnál a $K^{(2)}$ eredményre, stb. vezessen, a c amplitúdó abszolút négyzetével egyenlő, tehát

$$w(K^{(1)}, K^{(2)}, \ldots, K^{(N)}, t) = | c(K^{(1)}, K^{(2)}, \ldots, K^{(N)}, t) |^2 . \qquad (29.4.23)$$

Mivel *Fermi*-részecskék rendszeréről van szó ezért az állapotfüggvényben felcserélve egymással a k-adik és l-edik részecske koordinátáit, Ψ előjelet fog váltani: $P_{kl}\Psi = -\Psi$. Beírva a hullámfüggvény (4.22) sorfejtését, kapjuk, hogy:

$$\sum_{K^{(1)}} \ldots \sum_{K^{(k)}} \ldots \sum_{K^{(l)}} \ldots \sum_{K^{(N)}} c(K^{(1)}, \ldots, K^{(k)}, \ldots, K^{(l)}, \ldots, K^{(N)}, t) \times$$

$$\times \psi_{K^{(1)}}(x_1) \ldots \psi_{K^{(k)}}(x_l) \ldots \psi_{K^{(l)}}(x_k) \ldots \psi_{K^{(N)}}(x_N) =$$

$$= - \sum_{K^{(1)}} \ldots \sum_{K^{(k)}} \ldots \sum_{K^{(l)}} \ldots \sum_{K^{(N)}} c(K^{(1)}, \ldots, K^{(k)}, \ldots, K^{(l)}, \ldots, K^{(N)}, t) \times$$

$$\times \psi_{K^{(1)}}(x_1) \ldots \psi_{K^{(k)}}(x_k) \ldots \psi_{K^{(l)}}(x_l) \ldots \psi_{K^{(N)}}(x_N) .$$

Cseréljük fel a baloldalon a $K^{(k)}$ és $K^{(l)}$ összegező indexeket. Akkor egyenletünk a következőképpen írható fel:

$$\sum_{K^{(1)}} \ldots \sum_{K^{(k)}} \ldots \sum_{K^{(l)}} \ldots \sum_{K^{(N)}} c(K^{(1)}, \ldots, K^{(l)}, \ldots, K^{(k)}, \ldots, K^{(N)}, t) \times$$

$$\times \psi_{K^{(1)}}(x_1) \ldots \psi_{K^{(k)}}(x_k) \ldots \psi_{K^{(l)}}(x_l) \ldots \psi_{K^{(N)}}(x_N)$$

$$= - \sum_{K^{(1)}} \ldots \sum_{K^{(k)}} \ldots \sum_{K^{(l)}} \ldots \sum_{K^{(N)}} c(K^{(1)}, \ldots, K^{(k)}, \ldots, K^{(l)}, \ldots, K^{(N)}, t) \times$$

$$\times \psi_{K^{(1)}}(x_1) \ldots \psi_{K^{(k)}}(x_k) \ldots \psi_{K^{(l)}}(x_l) \ldots \psi_{K^{(N)}}(x_N) .$$

A bal- és jobboldalon álló sorfejtések csak akkor lehetnek egymással egyenlőek a koordináták minden értékére, ha a sorfejtési együtthatók azonosak:

$$c(K^{(1)}, \ldots, K^{(l)}, \ldots, K^{(k)}, \ldots, K^{(N)}, t) = -c(K^{(1)}, \ldots, K^{(k)}, \ldots, K^{(l)}, \ldots, K^{(N)}, t).$$

(29.4.24)

Az antiszimmetrikus állapotfüggvény sorfejtési együtthatói tehát antiszimmetrikusak a K kvantumszámok felcserélésével szemben.

Legyen most $K^{(l)} = K^{(k)}$. (4.24)-ből azonnal következik, hogy ebben az esetben c zérussal lesz egyenlő:

$$c(K^{(1)}, \ldots, K^{(k)}, \ldots, K^{(k)}, \ldots, K^{(N)}) = 0 .$$

Ezt (4.23)-ba téve, láthatjuk, hogy egyenlő $K^{(l)}$ és $K^{(k)}$ esetén a w valószínűség is zérus lesz:

$$w(K^{(1)}, \ldots, K^{(k)}, \ldots, K^{(k)}, \ldots, K^{(N)}) = 0 . \qquad (29.4.25)$$

Ezzel be is bizonyítottuk a *Pauli*-elvet, hiszen (4.25) szerint zérus annak a valószínűsége, hogy két olyan részecskét találjunk, melyek állapotát jellemző K értéknégyesek mérési eredményei megegyeznek.

* * *

A kvantummechanika általános törvényei szerint stacionárius állapotban a rendszer állapotfüggvénye

$$\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t) = \psi(x_1, x_2, \ldots, x_N) e^{-\frac{2\pi i}{h} Et} \qquad (29.4.26)$$

alakú, ahol E a *Hamilton*-operátor egyik sajátértéke és ψ a hozzá tartozó sajátfüggvény:

$$H\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N) = E\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N). \qquad (29.4.27)$$

Azonos részecskékből álló rendszer esetén a Ψ állapotfüggvénynek szimmetrikusnak, ill. antiszimmetrikusnak kell lennie. Ez nyilván akkor teljesül, ha a ψ sajátfüggvény maga is szimmetrikus, ill. antiszimmetrikus. Azonos részecskékből álló rendszerek esetén a (4.27) sajátértékegyenletnek csak azon megoldásai érdekelnek bennünket, melyek rendelkeznek a kívánt szimmetriatulajdonsággal. (4.18), ill. (4.20) mintájára írhatjuk:

$$\psi(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \ldots, x_{\alpha_N}) = \psi(x_1, x_2, \ldots, x_N) \textit{ Bose}\text{-részecskék esetén,}$$
$$\psi(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \ldots, x_{\alpha_N}) = (-1)^{\alpha}\psi(x_1, \ldots, x_N) \textit{ Fermi}\text{-részecskék esetén.} \qquad (29.4.28)$$

A gyakorlatban sokszor előfordul, hogy sikerül a (4.27) sajátértékegyenlet valamely ψ megoldását meghatározni, de ez nem tesz eleget a (4.28) szimmetriakövetelményeknek. Ilyenkor a megoldást szimmetrizálni kell. Ehhez mindenekelőtt megjegyezzük, hogy egy $\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ megoldás meghatározásával tulajdonképpen $N!$ számú sajátfüggvényt kaphatunk, hiszen a H operátor szimmetriája miatt $\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$-nel együtt sajátfüggvény lesz a koordináták permutálásával nyerhető $\psi(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \ldots, x_{\alpha_N})$ is. Az E sajátértékhez tartozó általános sajátfüggvény ezen $N!$ számú függvényből képzett lineáris kombináció lesz:

$$\psi'(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \sum_{\alpha} c_\alpha \psi(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \ldots, x_{\alpha_N}),$$

ahol az α-szerinti összegezés az $(1, 2, \ldots, N)$ számok valamennyi permutációjára

kiterjed. A c_α együtthatók alkalmas megválasztásával könnyen elérhetjük, hogy az eredményül kapott ψ' rendelkezzen a (4.28) szimmetriatulajdonsággal. Nevezetesen, ha valamennyi $c_\alpha = 1$, akkor ψ' szimmetrikus, ha pedig $c_\alpha = (-1)^\alpha$, akkor ψ' antiszimmetrikus lesz. A ψ sajátfüggvényből tehát a szimmetriakövetelményeknek is eleget tevő ψ' megoldást a következőképpen állíthatjuk elő:

$$\psi'(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \sum_\alpha \psi(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \ldots, x_{\alpha_N}) \quad \textit{Bose}\text{-részecskék esetén,}$$

$$\psi'(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \sum_\alpha (-1)^\alpha \psi(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \ldots, x_{\alpha_N}) \quad \textit{Fermi}\text{-részecskék esetén.} \tag{29.4.29}$$

Vezessük be az $(\alpha) = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)$ permutációhoz tartozó P_α operátort a

$$P_\alpha \psi(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \psi(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \ldots, x_{\alpha_N}) \tag{29.4.30}$$

definícióval. A ψ sajátfüggvényből (4.29) alapján előállított szimmetrikus és antiszimmetrikus megoldásokat az

$$\psi' = \mathcal{S}\psi, \quad \text{ill.} \quad \psi' = \mathcal{A}\psi$$

alakban írhatjuk fel, ahol $\mathcal{S}$ a szimmetrizáló, $\mathcal{A}$ pedig az antiszimmetrizáló operátor:

$$\mathcal{S} = \sum_\alpha P_\alpha, \quad \mathcal{A} = \sum_\alpha (-1)^\alpha P_\alpha. \tag{29.4.31}$$

5. §. Spintől független kölcsönhatás

Atomok, molekulák és szilárd testek tárgyalásánál igen gyakran előfordul, hogy a *Hamilton*-operátor csak az elektronok helykoordinátáit tartalmazza, a spinváltozókat nem. Példaként a Z rendszámú atomot említjük, amely esetén a (4.5) *Hamilton*-operátor a következő lesz:

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \sum_{k=1}^{N} \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta_k - \frac{Ze^2}{r_k} \right) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^{N} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|}. \tag{29.5.1}$$

Egy ilyen típusú H operátor sajátfüggvényeit mindig felvehetjük a

$$\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)\Theta(s_1, s_2, \ldots, s_N) \tag{29.5.2}$$

szorzat alakjában, ahol ϕ csak a helykoordinátákat és Θ csak a spinváltozókat tartalmazza. Mivel a *Hamilton*-operátor a spinváltozókat nem tartalmazza, ezért H hatására (5.2)-ben csak ϕ változik meg, Θ változatlan marad. Azaz

$$H\psi = H(\phi\Theta) = (H\phi)\Theta.$$

Éppen ezért a $H\psi = E\psi$ energiasajátértékegyenlet $(H\phi)\Theta = (E\phi)\Theta$ alakba írható és az egyenlet a Θ spintényezővel egyszerűsíthető. Ily módon arra az eredményre jutunk, hogy spintől független *Hamilton*-operátor esetén a spinről mintegy „meg-

feledkezve", a koordinátáktól függő $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ sajátfüggvényt kell a

$$H\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = E\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \tag{29.5.3}$$

sajátértékegyenletből meghatározni. (Lényegében véve így jártunk el a H és He atomok elméletében, és a H_2^+-molekula tárgyalásánál.) A ϕ sajátfüggvény meghatározása után pedig ψ-t úgy kapjuk meg, hogy ϕ-t kiegészítjük egy *tetszőleges* Θ spintényezővel.

Az energiasajátértékek meghatározásánál valóban nagy gyakorlati jelentősége van annak, hogy a sajátértékprobléma megoldásánál a spinváltozókra nem kell tekintettel lennünk. A ψ sajátfüggvény felépítésénél azonban (5.2) még nem veszi figyelembe a részecskék azonosságából adódó szimmetria követelményeket. Az előző §-ban megbeszéltek szerint elektronok esetében a sajátfüggvénynek antiszimmetrikusnak kell lennie. Ezért a ψ sajátfüggvény előállításánál úgy járunk el, hogy az (5.3) megoldásaként adódó ϕ sajátfüggvényt megszorozzuk egy Θ spintényezővel és az eredményt antiszimmetrizáljuk. Tehát:

$$\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \mathcal{A}(\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)\Theta(s_1, s_2, \ldots, s_N)) =$$
$$= \sum_{\alpha} (-1)^{\alpha} \phi(\mathbf{r}_{\alpha_1}, \mathbf{r}_{\alpha_2}, \ldots, \mathbf{r}_{\alpha_N})\Theta(s_{\alpha_1}, s_{\alpha_2}, \ldots, s_{\alpha_N}). \tag{29.5.4}$$

Az antiszimmetrizálás művelete korlátozza a lehetséges Θ spintényezők kifejezését, ugyanis csak olyan Θ jöhet szóba, mely esetén az (5.4) egyenlet jobboldalán álló kifejezés nem lesz azonosan zérus.

Világítsuk ezt meg részletesen a héliumatom esetében. A héliumatom alapállapotának (közelítő) sajátfüggvényét (24.10.2) alatt írtuk fel:

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{Z^*}{\pi a_H^3} e^{-\frac{Z^*}{a_H}(r_1 + r_2)}. \tag{29.5.5}$$

Ezt (5.4)-be téve, a következő eredményre jutunk:

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{Z^*}{\pi a_H^3} e^{-\frac{Z^*}{a_H}(r_1 + r_2)} [\Theta(s_1, s_2) - \Theta(s_2, s_1)]. \tag{29.5.6}$$

Kihasználtuk, hogy ϕ szimmetrikus kifejezése $\mathbf{r}_1$- és $\mathbf{r}_2$-nek. Két elektron esetén a lineárisan független spinfüggvények száma összesen négy, ezeket (24.8.31) alatt soroltuk fel. A legáltalánosabb spinfüggvény ezeknek valamilyen lineárkombinációja lesz:

$$\Theta(s_1, s_2) = c_{++}\chi_{++}(s_1, s_2) + c_{+-}\chi_{+-}(s_1, s_2) + c_{-+}\chi_{-+}(s_1, s_2) + c_{--}\chi_{--}(s_1, s_2).$$

Ha ebből képezzük az (5.6) sajátfüggvény szögletes zárójelében szereplő spintényezőt, akkor az

$$\Theta(s_1, s_2) - \Theta(s_2, s_1) = (c_{+-} - c_{-+})\,[\chi_{+-}(s_1, s_2) - \chi_{-+}(s_1, s_2)] =$$
$$= (c_{+-} - c_{-+})\,[\chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2) - \chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2)] =$$
$$= \sqrt{2}(c_{+-} - c_{-+})\chi_{00}(s_1, s_2)$$

eredményt kapjuk, tehát egy konstans szorzótól eltekintve a szinglett spinállapotot leíró spinfüggvényt. A héliumatom alapállapotának egy szinglett term felel meg, vagyis az alapállapot a para-hélium állapotok közé tartozik.

A fenti esetben a $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ függvény szimmetriája egyértelműen meghatározta a sajátfüggvény spinfüggését: csakis a $\Theta(s_1, s_2) = \chi_{00}(s_1, s_2)$ szinglett állapot jöhet szóba. Előfordulhat az is, hogy az (5.3) sajátértékproblémának olyan ϕ megoldását találjuk meg, hogy nincs egyetlen olyan Θ sem, mellyel az (5.4) antiszimmetrizálás végrehajtható volna. Példaként a három elektront tartalmazó Li atom esetét említjük. Ha ennek sajátfüggvényét (5.5) általánosításaként adódó

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \left(\frac{Z^*}{\pi a_H^3}\right)^{3/2} e^{-\frac{Z^*}{a_H}(r_1+r_2+r_3)} \tag{29.5,7}$$

alakban vesszük fel, vagy más olyan alakban keressük, mely $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$, $\mathbf{r}_3$-ban teljesen szimmetrikus, akkor az (5.4)-ből adódó sajátfüggvényre kapjuk, hogy:

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)\ [\Theta(s_1, s_2, s_3) + \Theta(s_2, s_3, s_1) + \Theta(s_3, s_1, s_2) - \\ - \Theta(s_2, s_1, s_3) - \Theta(s_1, s_3, s_2) - \Theta(s_3, s_2, s_1)]. \tag{29.5.8}$$

Három részecske esetén az egymástól lineárisan független spinfüggvények száma $2^3 = 8$. Ezek rendre a következők:

$$\begin{aligned}
&\chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_3),\\
&\chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_3),\\
&\chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_3),\\
&\chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_3),\\
&\chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_3),\\
&\chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_3),\\
&\chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_3),\\
&\chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_3).
\end{aligned} \tag{29.5.9}$$

A legáltalánosabb $\Theta(s_1, s_2, s_3)$ ezeknek valamilyen lineárkombinációja. Könnyen beláthatjuk, hogy az (5.9) függvények bármelyikét is tesszük Θ helyébe az (5.8) sajátfüggvényben, eredményül azonosan zérust kapunk. Következésképpen zérus lesz az eredmény akkor is, ha Θ az (5.9) függvények egy tetszőleges lineárkombinációja. Ezzel bebizonyítottuk, hogy nincs olyan Θ, mellyel az (5.8) típusú sajátfüggvény képezhető volna, ami azt jelenti, hogy a sajátfüggvény $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ térbeli része nem lehet szimmetrikus függvénye a helykoordinátáknak.

Általában, ha (5.3)-nak egy olyan ϕ megoldását találjuk meg, melyet bármilyen Θ-val kiegészítve az antiszimmetrikus $\psi = \mathcal{A}(\phi\Theta)$ sajátfüggvény azonosan zérus lesz, akkor ezt a ϕ megoldást (és a hozzá tartozó E sajátértéket), mint fizikailag értelmetlent, el kell vetnünk.

6. §. Betöltési szám-reprezentáció. Emissziós és abszorbciós operátorok

Azonos részecskékből álló rendszerek egy különleges módszerrel is tárgyalhatók, melyet *betöltési szám-reprezentáció*nak nevezünk. A régebbi irodalomban ugyanezt a módszert második kvantálásnak nevezték. A régi elnevezés azért nem szerencsés, mert a második kvantálás módszere semmilyen új kvantumfizikai felismerést nem tartalmaz, hanem matematikailag ekvivalens a többtestprobléma *Schrödinger*-egyenletével.

Tegyük fel, hogy rendszerünk N számú azonos részecskéből áll, ezek koordinátái legyenek rendre $x_1, x_2, \ldots, x_N$. A betöltési szám-reprezentáció bevezetéséhez mindenekelőtt vegyük fel az egyrészecske állapotok egy teljes rendszerét,

$$\phi_1(x), \phi_2(x), \ldots \phi_p(x), \ldots,$$

melyről feltételezzük, hogy egyes tagjai normáltak és egymásra ortogonálisak:

$$\int \phi^*_{p_1}(x)\phi_{p_2}(x)dx = \delta_{p_1 p_2} \tag{29.6.2}$$

A (6.1) függvényeket a reprezentáció bázisának fogjuk nevezni. Sokszor célszerű, ha a bázisnak a

$$\mathcal{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\Delta + U(x) \tag{29.6.3}$$

egyrészecske *Hamilton*-operátor sajátfüggvényeit választjuk, tehát ha

$$\mathcal{H}\phi_p(x) = \varepsilon_p \phi_p(x). \tag{29.6.4}$$

Ez a választás azonban nem feltétlen szükségszerű és a jelen §-ban nem is fogjuk felhasználni, hogy a bázisfüggvények eleget tesznek a (6.4) sajátérték egyenletnek.

Mivel a (6.1) bázis teljes rendszert képez, ezért egyetlen részecske $\psi(x)$ állapotfüggvénye sorbafejthető a bázisfüggvények szerint:

$$\psi(x) = \sum_p c_p \phi_p(x).$$

Hasonlóképpen, ha két részecskénk van, akkor a $\psi(x_1, x_2)$ állapotfüggvény a bázisfüggvények $\phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2)$ szorzatai szerint fejthető sorba:

$$\psi(x_1, x_2) = \sum_{p_1 p_2} c_{p_1 p_2} \phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2).$$

Általában, N részecske esetén az állapotfüggvényt a bázisfüggvényekből alkotott N-szeres szorzatok szerint fejthetjük ki:

$$\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \sum_{p_1 p_2 \ldots p_N} c_{p_1 p_2 \ldots p_N} \phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2) \ldots \phi_{p_N}(x_N). \tag{29.6.5}$$

A $c_{p_1 p_2 \ldots p_N}$ együtthatók jellemzik a rendszer ψ állapotát, e sorfejtési együtthatók ismerete egyben ψ ismeretét is jelenti. Tudjuk azonban, hogy a ψ állapotfüggvénynek szimmetrikusnak vagy antiszimmetrikusnak kell lennie attól függően,

hogy a rendszer *Bose*-féle vagy *Fermi*-féle részecskékből épül fel. ψ ezen szimmetriatulajdonságát automatikusan úgy vehetjük figyelembe, hogy a (6.5) sorfejtésben a $\phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_N)$ szorzatot *Bose*-részecskék esetén az

$$\mathcal{S}\left(\phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_N)\right) \tag{29.6.6}$$

szimmetrikus szorzattal, *Fermi*-részecskék esetén az

$$\mathcal{A}\left(\phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_N)\right) \tag{29.6.7}$$

antiszimmetrikus szorzattal helyettesítjük. Ezek a kifejezések egyértelműen meg vannak határozva azáltal, ha megmondjuk, hogy mely $p_1, p_2, \ldots, p_N$ indexű bázisfüggvények szerepelnek bennük, és függetlenek attól, hogy az $\mathcal{S}$, ill. $\mathcal{A}$ operátorok alatt álló szorzatban melyik bázisfüggvény argumentumában hányadik részecske koordinátája szerepel.

A (6.6) és (6.7) kifejezések még nincsenek 1-re normálva. Megfelelő normálási tényezővel ellátva, az N-részecskerendszer szimmetrikus, ill. antiszimmetrikus bázisainak tekintjük őket. Jelük:

$$|\, p_1, p_2, \ldots, p_N >_s, \quad \text{ill.} \quad |\, p_1, p_2, \ldots, p_N >_a.$$

Az állapotfüggvény tehát a következő sor alakjában adható meg:

$$\psi = \sum_{p_1 \le p_2 \le \ldots \le p_N} c_{p_1 p_2 \ldots p_N} |\, p_1, p_2, \ldots, p_N >_{s,a}. \tag{29.6.8}$$

Itt az összegezést valamennyi *különböző* $|\, p_1, p_2, \ldots, p_N >_{s,a}$ állapotra kell kiterjeszteni, de az állapot nem függ a $p_1, p_2, \ldots, p_N$ indexek sorrendjétől, ezért (6.8)-ban az összegezés csak a $p_1 \le p_2 \le \ldots \le p_N$ esetre terjed ki.

A továbbiakban külön foglalkozunk a *Bose*- és a *Fermi*-részecskék esetével.

Fermi-részecskék. Mindenekelőtt írjuk ki részletesen a (6.7) antiszimmetrizált szorzatot:

$$\mathcal{A}\left(\phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_N)\right) = \sum_{\alpha} (-1)^{\alpha}\phi_{p_1}(x_{\alpha_1})\phi_{p_2}(x_{\alpha_2})\ldots\phi_{p_N}(x_{\alpha_N}). \tag{29.6.9}$$

A jobboldalon álló összegben éppen a determinánsok jól ismert kifejtési szabályát ismerhetjük fel. Tehát:

$$\mathcal{A}\left(\phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_N)\right) = \begin{vmatrix} \phi_{p_1}(x_1) & \phi_{p_2}(x_1) & \ldots & \phi_{p_N}(x_1) \\ \phi_{p_1}(x_2) & \phi_{p_2}(x_2) & \ldots & \phi_{p_N}(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_{p_1}(x_N) & \phi_{p_2}(x_N) & \ldots & \phi_{p_N}(x_N) \end{vmatrix}. \tag{29.6.10}$$

Ezt a determinánst a $\phi_{p_1}, \phi_{p_2}, \ldots, \phi_{p_N}$ bázisfüggvényekből felépített *Slater-determináns*nak nevezzük. Nyilvánvaló, hogy e determináns azonosan zérus, ha a $p_1, p_2, \ldots, p_N$ indexek közül kettő (vagy több) egymással megegyezik, mert ez esetben a determinánsban két (vagy több) oszlop megegyezik egymással.

Állapítsuk meg az antiszimmetrizált szorzat normáját. Ha a (6.10) determinánst a sorok helyett az oszlopai szerint fejtjük ki, akkor (6.9) helyett a következő ki-

fejezést kapjuk:

$$\mathcal{A}(\phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_N)) = \sum_{\alpha}(-1)^{\alpha}\,\phi_{p_{\alpha_1}}(x_1)\phi_{p_{\alpha_2}}(x_2)\ldots\phi_{p_{\alpha_N}}(x_N)\,.$$

Képezzük ennek abszolút négyzetét:

$$\begin{aligned}
&|\,\mathcal{A}(\phi_{p_1}(x_1)\,\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N})x_N))\,|^2 = \\
&= \sum_{\alpha,\beta}(-1)^{\alpha}(-1)^{\beta}\,\phi^*_{p_{\alpha_1}}(x_1)\,\phi^*_{p_{\alpha_2}}(x_2)\ldots\phi^*_{p_{\alpha_N}}(x_N)\,\phi_{p_{\beta_1}}(x_1)\,\phi_{p_{\beta_2}}(x_2)\ldots\phi_{p_{\beta_N}}(x_n) = \\
&= \sum_{\alpha,\beta}(-1)^{\alpha}(-1)^{\beta}\,\phi^*_{p_{\alpha_1}}(x_1)\,\phi_{p_{\beta_1}}(x_1)\,\phi^*_{p_{\alpha_2}}(x_2)\,\phi_{p_{\beta_2}}(x_2)\ldots\phi^*_{p_{\alpha_N}}(x_N)\,\phi_{p_{\beta_N}}(x_N)\,.
\end{aligned}$$

Integráljuk ezt $x_1, x_2, \ldots, x_N$ szerint. Az integrál szétesik az egyes változókra vonatkozó integrálok szorzatává, a k-adik tényező

$$\int \phi^*_{p_{\alpha_k}}(x_k)\,\phi_{p_{\beta_k}}(x_k)\,dx_k = \delta_{p_{\alpha_k}p_{\beta_k}}$$

lesz. Azaz

$$\begin{aligned}
&\int |\,\mathcal{A}(\phi_{p_1}(x_1)\,\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_N))\,|^2\,dx_1dx_2\ldots dx_N = \\
&\qquad = \sum_{\alpha,\beta}(-1)^{\alpha}(-1)^{\beta}\,\delta_{p_{\alpha_1}p_{\beta_1}}\ldots\delta_{p_{\alpha_N}p_{\beta_N}}.
\end{aligned}$$

A jobboldalon fellépő *Kronecker*-delták miatt csak azok a tagok nem lesznek zérussal egyenlők, amelyeknél

$$p_{\alpha_1} = p_{\beta_1}, \quad p_{\alpha_2} = p_{\beta_2}, \ldots, \quad p_{\alpha N} = p_{\beta N},$$

vagyis amikor az $(\alpha) = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)$ permutáció megegyezik a $(\beta) = (\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_N)$ permutációval. $(\alpha) = (\beta)$ esetén viszont az összeg alatt $+1$ áll. Tehát

$$\int |\,\mathcal{A}(\phi_{p_1}(x_1)\,\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_N))\,|^2\,dx_1dx_2\ldots dx_N = \sum_{\alpha} 1 = N!$$

Az antiszimmetrizált szorzat normája tehát $N!$-sal egyenlő. Innen következik, hogy (6.9), ill. (6.10) elé az $(N!)^{-1/2}$ normálási tényezőt kell írnunk ahhoz, hogy a normált $|\,p_1, p_2, \ldots, p_N >_a$ bázisfüggvényt megkapjuk:

$$|\,p_1, p_2, \ldots, p_N>_a = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \phi_{p_1}(x_1) & \phi_{p_2}(x_1)\ldots\phi_{p_N}(x_1) \\ \phi_{p_1}(x_2) & \phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_2) \\ \vdots & \vdots \quad\ \vdots \\ \phi_{p_1}(x_N) & \phi_{p_2}(x_N)\ldots\phi_{p_N}(x_N) \end{vmatrix}. \qquad (29.6.11)$$

A $|\,p_1, p_2, \ldots, p_N>_a$ állapotot leírhatjuk oly módon is, hogy a $p_1, p_2, \ldots, p_N$ indexek felsorolása helyett megadjuk minden p-hez az N_p betöltési számot: $N_p = 1$, ha $p = p_1, p_2, \ldots,$ vagy p_N és $N_p = 0$, ha $p \neq p_1, p_2, \ldots$ és p_N. A betöltési számokkal jellemzett állapot jele:

$$|\,N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots>. \qquad (29.6.12)$$

Nézzünk egy példát. Legyen négy részecskénk és a (6.11) determináns épüljön fel a ϕ_2, ϕ_3, ϕ_5 és ϕ_7 egyrészecske állapotokból. Ezen állapotot (6.11) szerint a következőképpen jelöljük: $|\, 2, 3, 5, 7 >_a$. A betöltési szám-reprezentációbeli (6.12) jelölés a következő: $|\, 0, 1, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, \ldots >$. Nyilvánvaló, hogy a két jelöléstechnika egymással ekvivalens és a (6.12) betöltési szám-reprezentációra való áttérést a kényelmi szempontok diktálják.

A betöltési szám-reprezentációbeli számításokat nagymértékben leegyszerűsíti az *abszorpciós* és *emissziós operátorok* bevezetése. Az a_p abszorpciós operátor eltünteti a rendszerből a $\phi_p(x)$ állapotú részecskét, feltéve, hogy ez az állapot be volt töltve. Ha nem, úgy a_p hatása az állapotra zérust eredményez.

$$a_p \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > = \begin{cases} Z_p \,|\, N_1, N_2, \ldots, 0, \ldots >, & \text{ha } N_p = 1, \\ 0, & \text{ha } N_p = 0. \end{cases} \tag{29.6.13}$$

Itt $Z_p = \pm 1$, attól függően, hogy a p-edik állapot előtt betöltött állapotok száma páros vagy páratlan. Tehát

$$Z_p = \prod_{t<p} (-1)^{N_t} = \prod_{t<p} (1 - 2N_t). \tag{29.6.14}$$

Ezzel a faktorral az állapotvektorok antiszimmetriáját vesszük figyelembe.

A (6.13) definíciós egyenletet nyilván felírhatjuk a következő összefoglalt alakban is:

$$a_p \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > = Z_p N_p \,|\, N_1, N_2, , \ldots, N_p - 1, \ldots > . \tag{29.6.15}$$

Az emissziós operátorok a részecskék keletkezését írják le. A $\phi_p(x)$ állapotú részecskét keltő operátor jele a_p^+. Definiáló egyenlete:

$$a_p^+ \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > = \begin{cases} Z_p \,|\, N_1, N_2, \ldots, 1, \ldots >, & \text{ha } N_p = 0, \\ 0, & \text{ha } N_p = 1, \end{cases} \tag{29.6.16}$$

vagyis a_p^+ hatására megjelenik egy részecske a p-edik állapotban, ha ilyen nem volt, de ha már ez az állapot be volt töltve, úgy a_p^+ hatása zérust eredményez. (6.16)-ot a következőképpen is felírhatjuk:

$$a_p^+ \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > = Z_p(1 - N_p) \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p + 1, \ldots > . \tag{29.6.17}$$

Az emissziós operátor ezen definíciójából következik, hogy a (6.11) N-részecske állapotot előállíthatjuk a

$$|\, 0 > \equiv |\, 0, 0, 0, \ldots >$$

vákuum-állapotból N számú emissziós operátor alkalmazásával:

$$|\, p_1, p_2, \ldots, p_N >_a = a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ \ldots a_{p_N}^+ \,|\, 0 > . \tag{29.6.18}$$

Az abszorpciós és emissziós operátorokat a (6.15) és (6.17) relációk egyértelműen definiálják és valamennyi tulajdonságukat ezen definíciókból le lehet vezetni. Mindenekelőtt azt mutatjuk meg, hogy a_p és a_p^+ egymás adjungáltjai. Az adjungált operátor definíciója szerint ehhez azt kell bebizonyítani, hogy tetszőleges $|N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots>$ és $|M_1, M_2, \ldots, M_p, \ldots>$ esetén:

$$<M_1, M_2, \ldots, M_p, \ldots | a_p^+ | N_1, N_2, \ldots N_p, \ldots> =$$
$$= (<N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots | a_p | M_1, M_2, \ldots, M_p \ldots>)^* .$$

Ennek fennállásáról könnyen meggyőződhetünk. Ugyanis (6.17) alapján

$$<M_1, M_2, \ldots, M_p, \ldots | a_p^+ | N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots> =$$
$$= Z_p(1 - N_p)\delta_{M_1N_1}\delta_{M_2N_2} \ldots \delta_{M_pN_p+1} \ldots \qquad (29.6.19)$$

Ugyanakkor (6.15) alapján

$$<N_1, N_2, \ldots, N_{p_2} \ldots | a_p | M_1, M_2, \ldots, M_p, \ldots> =$$
$$= Z_p M_p \delta_{N_1M_1}\delta_{N_2M_2} \ldots \delta_{N_pM_p-1} \ldots \qquad (29.6.20)$$

Azt kell belátnunk, hogy (6.19) és (6.20) jobboldalain álló kifejezések egymás konjugált komplexei. Mivel mindkét kifejezés valós, ezért egymással egyenlőek kell, hogy legyenek. Ez viszont tényleg fennáll, hiszen elemi úton beláthatjuk, hogy $N_p = 0{,}1$ és $M_p = 0{,}1$ esetén

$$(1 - N_p)\delta_{M_pN_p+1} = M_p\delta_{N_p,M_p-1} ,$$

amivel bebizonyítottuk, hogy a_p és a_p^+ egymás adjungáltjai.

Állapítsuk meg az abszorpciós és emissziós operátorok csererelációit. Vizsgáluk először a $p \neq q$ esetet és legyen pl. $q > p$. Ekkor

$$a_q a_p | N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots, N_q, \ldots> =$$
$$= \prod_{p<t<q} (1 - 2N_t) N_p N_q | N_1, N_2, \ldots, N_p - 1, \ldots, N_q - 1, \ldots>, \qquad (29.6.21)$$

mert a_q alkalmazásakor $N_p = 0$, tehát a Z_q tényezőben a p-edik állapot $+1$ faktort ad. Ha az abszorpciós operátorokat fordított sorrendben alkalmazzuk, akkor az eredmény a következő lesz:

$$a_p a_q | N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots, N_q, \ldots> =$$
$$= - \prod_{p<t<q} (1 - 2N_t) N_p N_q | N_1, N_2, \ldots, N_p - 1, \ldots, N_q - 1, \ldots> , \qquad (29.6.22)$$

hiszen most a_q alkalmazásakor $N_p = 1$, tehát a p-edik állapot most -1 faktort ad a Z_q tényezőhöz. Mivel (6.21) és (6.22) jobboldalán ellentetten egyenlő kifejezések állanak, ezért fennáll, hogy

$$a_p a_q = -a_q a_p . \qquad (29.6.23)$$

Teljesen hasonló módon belátható, hogy

$$a_p^+ a_q^+ = -a_q^+ a_p^+ \tag{29.6.24}$$

és

$$a_p^+ a_q = -a_q a_p^+ . \tag{29.6.25}$$

Nézzük most a $p = q$ esetet. Mivel egyazon p állapotból nem lehet kétszer egymás után részecskét abszorbeálni, ezért $a_p a_p = 0$. Ez viszont azt jelenti, hogy (6.23) $p = q$ esetén is fennáll. Ugyanígy megállapíthatjuk azt is, hogy $a_p^+ a_p^+ = 0$, mert a p állapotot nem lehet kétszer betölteni. Tehát (6.24) is fennáll $p = q$ esetén. Vizsgáljuk még meg a_p és a_p^+ felcserélési törvényét. (6.15) és (6.17) alapján kapjuk, hogy:

$$a_p^+ a_p \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > = (2 - N_p) N_p \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots >,$$

$$a_p a_p^+ \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > = (N_p + 1)\,(1 - N_p) \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots >.$$

De mivel $N_p = 0{,}1$ esetén $(2 - N_p)N_p = N_p$ és $(N_p + 1)\,(1 - N_p) = 1 - N_p$, ezért írhatjuk, hogy

$$a_p^+ a_p \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > = N_p \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots >,$$

$$a_p a_p^+ \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > = (1 - N_p) \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > . \tag{29.6.26}$$

E két egyenlet összeadásával a következő felcserélési törvényt kapjuk:

$$a_p a_p^+ + a_p^+ a_p = 1 . \tag{29.6.27}$$

Eredményeinket a következő képletekkel foglalhatjuk össze, melyek tetszőleges p, q-ra fennállnak:

$$a_p a_q + a_q a_p = 0 , \quad a_p^+ a_q^+ + a_q^+ a_p^+ = 0 , \quad a_p a_q^+ + a_q^+ a_p = \delta_{p,q} . \tag{29.6.28}$$

Ezzel az abszorbciós és emissziós operátorok összes algebrai tulajdonságát megállapítottuk.

Megjegyezzük még, hogy (6.26) első egyenlete szerint az

$$n_p = a_p^+ a_p \tag{29.6.29}$$

operátor az $\mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots >$ állapotot az N_p betöltési számmal szorozza meg. Ezért n_p-t a betöltési szám operátorának nevezzük.

Bose-részecskék. Betöltési szám-reprezentációban a *Bose*-részecskék rendszerének $\mid p_1, p_2, \ldots, p_N >_s$ állapotait is (6.12)-vel analóg módon adhatjuk meg. Lényeges különbség azonban a *Fermi*-részecskékkel szemben az, hogy most p_1, $p_2, \ldots$ és p_N nem feltétlenül különbözőek, ami azt jelenti, hogy az

$$\mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > \tag{29.6.30}$$

állapotban az $N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots$ betöltési számok nem csak 0 és 1, hanem minden nemnegatív értéket felvehetnek:

$$N_p = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{29.6.31}$$

Például, ha hat részecskénk van és a rendszer állapota a $\phi_1(x_1)$, $\phi_1(x_2)$, $\phi_1(x_3)$, $\phi_3(x_4)$, $\phi_7(x_5)$, $\phi_7(x_6)$ egyrészecske állapotok szimmetrizált szorzata, akkor az állapotot $|1, 1, 1, 3, 7, 7>_s$-sel jelöljük. Ugyanezen állapot jele a (6.30) betöltési számreprezentációban: $|3, 0, 1, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, \ldots>$.

Az abszorbciós és emissziós operátorokat most a következő definícióval vezetjük be:

$$a_p \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots> = \sqrt{N_p}\,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p - 1, \ldots>,$$

$$a_p^+ \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots> = \sqrt{N_p + 1}\,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p + 1, \ldots>. \quad (29.6.32)$$

Az abszorbciós operátor tehát eggyel csökkenti, az emissziós operátor pedig eggyel növeli az N_p betöltési számot.

Ismét beláthatjuk, hogy a_p és a_p^+ egymás adjungáltjai. Ugyanis

$$<M_1, M_2, \ldots, M_p, \ldots \,|\, a_p^+ \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots> =$$

$$= \sqrt{N_p + 1}\,\delta_{M_1N_1}\delta_{M_2N_2}\ldots\delta_{M_pN_p+1}\ldots$$

és

$$<N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots \,|\, a_p \,|\, M_1, M_2, \ldots, M_p, \ldots> =$$

$$= \sqrt{M_p}\delta_{N_1M_1}\delta_{N_2M_2}\ldots\delta_{N_pM_p-1}\ldots$$

a_p és a_p^+ akkor adjungáltak, ha a fenti két mátrixelem egymás konjugált komplexe. Ez viszont nyilvánvaló, hiszen a jobboldalon álló kifejezések valósak és egymással egyenlőek, mert

$$\sqrt{N_p + 1}\,\delta_{M_pN_p+1} = \sqrt{M_p}\delta_{N_pM_p-1}$$

nyilván teljesül minden M_p, N_p-re.

Ezek után állapítsuk meg a felcserélési törvényeket. Könnyen beláthatjuk, hogy két abszorbciós operátor mindig felcserélhető egymással, hiszen

$$a_pa_q \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots, N_q, \ldots> =$$

$$= \sqrt{N_pN_q}\,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p - 1, \ldots, N_q - 1, \ldots> =$$

$$= a_qa_p \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots, N_q, \ldots>,$$

amiből következik, hogy

$$a_pa_q = a_qa_p.$$

Hasonlóan egyszerű belátni azt is, hogy az emissziós operátorok felcserélhetők egymással

$$a_p^+a_q^+ \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots, N_q, \ldots> =$$

$$= \sqrt{(N_p+1)(N_q+1)}\,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p + 1, \ldots, N_q + 1, \ldots> =$$

$$= a_q^+a_p^+ \,|\, N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots, N_q, \ldots>,$$

amiből

$$a_p^+ a_q^+ = a_q^+ a_p^+ .$$

Végül vizsgáljuk meg a_p és a_q^+ felcserélési törvényét. $p \neq q$ esetén:

$$a_p a_q^+ \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots, N_q, \ldots > =$$

$$= \sqrt{N_p(N_q + 1)} \mid N_1, N_2, \ldots, N_p - 1, \ldots, N_q + 1, \ldots > =$$

$$= a_q^+ a_p \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots, N_q, \ldots > ,$$

tehát

$$a_p a_q^+ = a_q^+ a_p, \quad \text{ha} \quad p \neq q .$$

Ha viszont $p = q$, úgy

$$a_p a_p^+ \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > = \sqrt{N_p + 1}\, a_p \mid N_1, N_2, \ldots, N_p + 1, \ldots > =$$

$$= (N_p + 1) \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > \qquad (29.6.33)$$

és

$$a_p^+ a_p \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > = \sqrt{N_p}\, a_p^+ \mid N_1, N_2, \ldots, N_p - 1, \ldots > =$$

$$= N_p \mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots > . \qquad (29.6.34)$$

(6.33)-ból kivonva (6.34)-et, a következő felcserélési törvényt kapjuk:

$$a_p a_p^+ - a_p^+ a_p = 1 .$$

A *Bose*-részecskék abszrobciós és emissziós operátorainak felcserélési törvényei tehát a következő képletekben foglalhatók össze:

$$a_p a_q - a_q a_p = 0, \quad a_p^+ a_q^+ - a_q^+ a_p^+ = 0, \quad a_p a_q^+ - a_q^+ a_p = \delta_{pq} . \qquad (29.6.35)$$

Ezek a felcserélési törvények egyértelműen meghatározzák az abszorbciós és emissziós operátorok algebráját. Észrevehetjük, hogy a *Bose*-részecskékre vonatkozó (6.35) és a *Fermi*-részecskékre vonatkozó (6.28) felcserélési törvények egy előjelben különböznek egymástól.

(6.34)-ből látjuk, hogy *Bose*-részecskék esetén is az

$$n_p = a_p^+ a_p$$

operátor hatása $\mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots >$-re az N_p betöltési számmal való szorzással azonos, ezért n_p-t itt is a betöltési szám operátorának nevezzük.

* * *

Az abszorbciós és emissziós operátorok két szempontból is igen fontos szerepet játszanak a többtestprobléma elméletében. A fentiekben láttuk, hogy ezen operátorok segítségével hogyan lehet generálni a betöltési szám-reprezentáció $\mid N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots >$ bázisvektorait. Másrészt, amint látni fogjuk, az a_p és a_p^+ operátorból az összes egyéb operátor felépíthető. A gyakorlatilag fontos operátorok mindössze néhány a_p és a_p^+ operátort tartalmaznak. Mivel az abszorbciós és

az emissziós operátorok viszonylag egyszerű algebrai tulajdonságokkal rendelkeznek, ezért a fizikai mennyiségeket reprezentáló operátorokkal való számításokat nagymértékben leegyszerűsíti, ha az operátorokat a_p és a_p^+ segítségével fejezzük ki.

A legegyszerűbb típusú operátor, mely a többtestprobléma elméletében előfordul, az ún. egyrészecske-operátor. Egyrészecske-operátor egy olyan fizikai mennyiségnek felel meg, mely az egyes részecskékhez tartozó mennyiségekből additívan tevődik össze

$$F = \sum_{k=1}^{N} F(x_k). \tag{29.6.36}$$

Ilyen pl. a rendszer kinetikus energiája, összimpulzusa, impulzusnyomatéka, stb. Mivel az F operátor nem változtatja meg a részecskék N számát, hanem legfeljebb az egyes részecskék állapotát, ezért F az $a_q^+ a_p$ típusú szorzatok lineáris kombinációjaként kell, hogy előállítható legyen:

$$F = \sum_{p,q} (q \mid F \mid p) a_q^+ a_p. \tag{29.6.37}$$

A $(q \mid F \mid p)$ kifejtési együtthatók az $N = 1$ eset vizsgálatával állapíthatók meg. Az $a_q^+ a_p$ operátor hatására a részecske a $\phi_p(x)$ állapotból átkerül a $\phi_q(x)$ állapotba, tehát

$$<0, 0, \ldots, N_q = 1, 0, 0, \ldots \mid F \mid 0, 0, \ldots, N_p = 1, 0, 0, \ldots> = (q \mid F \mid p).$$

Ugyanezen állapotok közötti mátrixelemet a (6.36) koordinátareprezentációval az $\int \phi_q^* F \phi_p dx$ alakban adhatjuk meg. (6.37)-ben fellépő kifejtési együtthatók tehát az $F(x)$ operátor mátrixelemeivel azonosak.

$$(q \mid F \mid p) = \int \phi_q^*(x) F(x) \phi_p(x) dx. \tag{29.6.38}$$

A teljesség kedvéért megemlítjük, hogy (6.37) nem a legáltalánosabb olyan kifejezés, amely a részecskék számát változatlanul hagyja, hiszen $a_q^+ a_p$ mellett még $a_p a_q^+$ is ugyanezen tulajdonsággal bír. De a (6.28), ill. a (6.35) felcserélési törvények miatt az ilyen típusú tagok csak egy additív konstanssal változtatják meg az F egyrészecske-operátort. A legáltalánosabb alak tehát

$$F = \sum_{p,q} (q \mid F \mid p) a_q^+ a_p + F_0,$$

ahol F_0 egy szám. Mivel a vákuumból nem lehet részecskét abszorbeálni, azaz

$$a_p \mid 0> = 0 \tag{29.6.39}$$

minden p-re, ezért $F \mid 0> = F_0 \mid 0>$ lesz. F_0 fizikai jelentése tehát: az F fizikai mennyiség vákuum-értéke. Mivel a gyakorlatilag fontos fizikai mennyiségek értéke a vákuum esetében zérus, ezért $F_0 = 0$ és az egyrészecske-operátort (6.37) alakjában írjuk fel.

A következő operátortípus, mellyel foglalkoznunk kell, az ún. kétrészecske-operátor. Ennek kifejezése koordinátareprezentációban

$$G = \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{N} G(x_k, x_l). \tag{29.6.40}$$

Az összeg egyes $G(x_k, x_l)$ tagjainak hatására legfeljebb egy részecskepár állapota változik meg, az eredő G hatása tehát ilyen részecskepár állapotváltozások szuperpozícióját eredményezi. Ezért írhatjuk, hogy

$$G = \frac{1}{4} \sum_{pqrs} (pq \mid G \mid rs)\, a_p^+ a_q^+ a_s a_r. \tag{29.6.41}$$

Most a kifejtési együtthatók megállapításához az $N = 2$ esetet kell megvizsgálnunk. (6.41) szerint a $(pq \mid G \mid rs)$ együttható nem más, mint a G operátor mátrixeleme akkor, ha a kezdeti állapotban egy r, s állapotú részecskepár, a végállapotban pedig egy p, q állapotú részecskepár van jelen. Azaz:

$$<0, 0, \ldots, N_p = 1, 0, 0, \ldots, N_q = 1, 0, 0, \ldots \mid G \mid 0, 0, \ldots, N_r =$$
$$= 1, 0, 0, \ldots, N_s = 1, 0, 0, \ldots > = (pq \mid G \mid rs).$$

Ugyanezt a mátrixelemet koordinátareprezentációban a következőképpen számíthatjuk ki:

$$(pq \mid G \mid rs) = \int \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_p^*(x_1) & \phi_q^*(x_1) \\ \phi_p^*(x_2) & \phi_q^*(x_2) \end{vmatrix} G(x_1, x_2) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_r(x_1) & \phi_s(x_1) \\ \phi_r(x_2) & \phi_s(x_2) \end{vmatrix} dx_1 dx_2 =$$

$$= \frac{1}{2} \int (\phi_p^*(x_1)\phi_q^*(x_2) - \phi_q^*(x_1)\phi_p^*(x_2)) G(x_1, x_2)(\phi_r(x_1)\phi_s(x_2) - \phi_s(x_1)\phi_r(x_2)) dx_1 dx_2 .$$

Vagy felhasználva, hogy azonos részecskék esetén $G(x_1, x_2) = G(x_2, x_1)$ kell hogy legyen, a fenti integrált a következő alakra hozhatjuk:

$$(pq \mid G \mid rs) = \int \phi_p^*(x_1)\phi_q^*(x_2) G(x_1, x_2)\phi_r(x_1)\phi_s(x_2) dx_1 dx_2 -$$
$$- \int \phi_p^*(x_1)\phi_q^*(x_2) G(x_1, x_2)\phi_s(x_1)\phi_r(x_2) dx_1 dx_2 . \tag{29.6.42}$$

Az első tagot a mátrixelem direkt, a másodikat a kicserélődési tagjának nevezzük.

Az egy- és kétrészecske-operátorok képezik gyakorlatilag a legfontosabb típusú fizikai mennyiségeket. De az itt felhasznált módszer segítségével nyilván bármely D operátort elő lehet állítani

$$D = \sum (pqr \ldots \mid D \mid tuv \ldots) a_p^+ a_q^+ a_r^+ \ldots a_t a_u a_v \ldots$$

alakban, feltéve, hogy koordinátareprezentációban $D(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ szimmetrikusan tartalmazza a részecskék koordinátáit. Ez viszont azonos részecskék esetén minden fizikai mennyiség esetén fennáll.

7. §. A kölcsönhatás figyelembevétele perturbációszámítással, azonos Fermi-részecskék esetén

Az előzőekben áttekintettük a többtestprobléma elméletének jelentősebb elvi kérdéseit. A továbbiakban a többtestprobléma *Schrödinger*-egyenletének megoldásakor alkalmazott legfontosabb közelítő módszereket fogjuk megbeszélni, éspedig elsősorban a *Fermi*-részecskékből álló rendszerek esetében.

A legegyszerűbb eset az, amikor a részecskék közötti kölcsönhatás olyan gyenge, hogy perturbációként kezelhetjük. Írjuk fel az N-részecskerendszer *Hamilton*-operátorát a következő alakban:

$$H = H_0 + V, \tag{29.7.1}$$

ahol H_0 az egyes részecskék kinetikus energiáját és a külső erőtérben felvett potenciális energiáját tartalmazza, V pedig a részecskék kölcsönhatási energiája:

$$H_0 = \sum_{k=1}^{N} \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta_k + U(x_k) \right) = \sum_{k=1}^{N} \mathcal{H}(x_k), \tag{29.7.2}$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{N} V(x_k, x_l). \tag{29.7.3}$$

Itt $\mathcal{H}(x_k)$-val jelöltük a k-adik részecskére vonatkozó (6.3) egyrészecske energiaoperátort, $V(x_k,x_l)$ pedig a k-adik és az l-edik részecskék kölcsönhatásának energiája. Feltételezésünk szerint a kölcsönhatás olyan gyenge, hogy V perturbációnak tekinthető H_0 mellett.

A perturbációszámítás alkalmazásához mindenekelőtt meg kell oldanunk a perturbálatlan H_0 operátor sajátértékproblémáját:

$$H_0 \Psi_0(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \left(\mathcal{H}(x_1) + \mathcal{H}(x_2) + \ldots + \mathcal{H}(x_N)\right) \Psi_0(x_1, x_2, \ldots, x_N) =$$
$$= E_0 \Psi_0(x_1, x_2, \ldots, x_N). \tag{29.7.4}$$

Ennek az egyenletnek megoldását könnyen visszavezethetjük a $\mathcal{H}$ egyrészecske energiaoperátor sajátértékproblémájára. $\mathcal{H}$ sajátértékegyenlete:

$$\mathcal{H} \phi_p(x) = \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + U(x) \right) \phi_p(x) = \varepsilon_p \phi(x). \tag{29.7.5}$$

A (7.4) egyenletet ki lehet elégíteni egy olyan Ψ_0 függvénnyel, mely a (7.5) *Schrödinger*-egyenlet megoldásainak szorzatából épül fel és az E_0 sajátérték a (7.5) megfelelő sajátértékeinek összege lesz:

$$\Psi_0(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \phi_{p_1}(x_1) \phi_{p_2}(x_2) \ldots \phi_{p_N}(x_N), \tag{29.7.6}$$

$$E_0 = \varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} + \ldots + \varepsilon_{p_N}. \tag{29.7.7}$$

Ha ugyanis a (7.6) sajátfüggvényt behelyettesítjük a (7.4) egyenletbe és figyelembe vesszük, hogy H_0 k-adik tagja, vagyis a $\mathcal{H}(x_k)$ operátor csak ϕ_{p_k}-ra hat, akkor

kapjuk, hogy

$$H_0\Psi_0 = [\mathcal{H}(x_1)\phi_{p_1}(x_1)]\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_N) +$$
$$+ \phi_{p_1}(x_1)[\mathcal{H}(x_2)\phi_{p_2}(x_2)]\phi_{p_3}(x_3)\ldots\phi_{p_N}(x_N) + \ldots$$
$$+ \phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_{N-1}}(x_{N-1})[\mathcal{H}(x_N)\phi_{p_N}(x_N)]\,.$$

Felhasználva (7.5)-öt, írhatjuk, hogy

$$H_0\Psi_0 = (\varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} + \ldots\ \varepsilon_{pN})\phi_{p_1}(x_1)\phi_{p_2}(x_2)\ldots\phi_{p_N}(x_N) = E_0\Psi_0\,, \qquad (29.7.8)$$

amiből következik, hogy a (7.6) függvény tényleg a (7.7) sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye a H_0 operátornak.

Mivel a részecskék azonosak, ezért a (7.7) sajátértékhez nemcsak a (7.6) sajátfüggvény tartozik, hanem összesen $N!$ számú függvény, melyeket úgy kapunk, hogy az első, második, ..., N-edik részecskékhez nem rendre a $\phi_{p_1}, \phi_{p_2}, \ldots, \phi_{p_N}$ függvényeket rendeljük, hanem pl. az elsőhöz a $\phi_{p_{\alpha_1}}$, a másodikhoz a $\phi_{p_{\alpha_2}}$, ..., az N-edikhez a $\phi_{p_{\alpha_N}}$ függvényt, ahol $(\alpha) = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)$ az $(1, 2, \ldots, N)$ számoknak egy permutációja. Az így kapott sajátfüggvény

$$\Psi_0^{(\alpha)} = \phi_{p_{\alpha_1}}(x_1)\phi_{p_{\alpha_2}}(x_2)\ldots\phi_{p_{\alpha_N}}(x_N) \qquad (29.7.9)$$

lesz és a hozzá tartozó sajátérték (7.7) alapján

$$\varepsilon_{p_{\alpha_1}} + \varepsilon_{p_{\alpha_2}} + \ldots + \varepsilon_{p_{\alpha_N}} = \varepsilon_{p_1} + \varepsilon_{p_2} + \ldots + \varepsilon_{p_N} = E_0$$

megegyezik E_0-lal, hiszen az összeg egyes tagjainak permutálása nem változtatja meg az összeg értékét. Az elfajult sajátértékekre vonatkozó perturbációszámításnál nyert eredményünk szerint az E_0 sajátértékhez tartozó sajátfüggvény a (7.9) függvények egy lineáris kombinációja lesz:

$$\Psi_0(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \sum_\alpha c_\alpha \Psi_0^{(\alpha)}(x_1, x_2, \ldots, x_N)\,.$$

A c_α kombinálási együtthatókat egyértelműen megszabja az a körülmény, hogy *Fermi*-részecskék esetén Ψ_0-nak *antiszimmetrikus*nak kell lennie. Ebből ugyanis következik, hogy $c_\alpha = c(-1)^\alpha$, ahol c egy normálási állandó, melynek értéke $1/\sqrt{N!}$. Végeredményben tehát Ψ_0-ra visszakapjuk a (6.11) *Slater*-determinánst azzal a lényeges különbséggel, hogy most a $\phi_{p_1}, \ldots, \phi_{p_N}$ függvények nem egy önkényesen választott bázisrendszer elemei, hanem a (7.5) *Schrödinger*-egyenlet megoldásai. Ψ_0-ra tehát kapjuk, hogy

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{p_1}(x_1) & \phi_{p_2}(x_1) \ldots \phi_{p_N}(x_1) \\ \phi_{p_1}(x_2) & \phi_{p_2}(x_2) \ldots \phi_{p_N}(x_2) \\ \vdots & \vdots \quad\ \vdots \\ \phi_{p_1}(x_N) & \phi_{p_2}(x_N) \ldots \phi_{p_N}(x_N) \end{vmatrix}, \qquad (29.7.10)$$

illetve kifejtve:

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\alpha (-1)^\alpha \phi_{p_{\alpha_1}}(x_1)\phi_{p_{\alpha_2}}(x_2)\ldots\phi_{p_{\alpha_N}}(x_N)\,. \qquad (29.7.11)$$

A perturbálatlan operátor sajátértékének és sajátfüggvényének megállapítása után határozzuk meg az energiaperturbációt. Első közelítésben az energiakorrekció a V kölcsönhatási energia középértéke lesz, azaz

$$E = E_0 + < \Psi_0 \mid V \mid \Psi_0 >. \tag{29.7.12}$$

Számítsuk ki az energiakorrekciót. (7.3) és (7.11) behelyettesítésével kapjuk:

$$< \Psi_0 \mid V \mid \Psi_0 > = \frac{1}{2N!} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{k,l} (-1)^{\alpha}(-1)^{\beta} \int \phi^*_{p_{\alpha_1}}(x_1) \ldots \phi^*_{p_{\alpha_N}}(x_N) V(x_k, x_l) \times$$

$$\times \phi_{p_{\beta_1}}(x_1) \ldots \phi_{p_{\beta_N}}(x_N) dx_1 \ldots dx_N . \tag{29.7.13}$$

Ezen kifejezés kiértékelése céljából vegyük szemügyre pl. az első és a második részecske kölcsönhatását, legyen tehát $k = 1$ és $l = 2$. Mivel $V(x_1, x_2)$ csak azokra a ϕ_p tényezőkre hat, melyek argumentumában x_1 vagy x_2 szerepel, ezért

$$< \Psi_0 \mid V(x_1, x_2) \mid \Psi_0 > = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha,\beta} (-1)^{\alpha}(-1)^{\beta} \int \phi^*_{p_{\alpha_1}}(x_1) \phi^*_{p_{\alpha_2}}(x_2) V(x_1, x_2) \times$$

$$\times \phi_{p_{\beta_1}}(x_1) \phi_{p_{\beta_2}}(x_2) dx_1 dx_2 \int \phi^*_{p_{\alpha_3}}(x_3) \phi^*_{p_{\beta_3}}(x_3) dx_3 \ldots \int \phi^*_{p_{\alpha_N}}(x_N) \phi_{p_{\beta_N}}(x_N) dx_N . \tag{29.7.14}$$

Az $x_3, x_4, \ldots, x_N$ koordináták szerinti integrálok, a ϕ_p függvények ortonormáltsága miatt, csupa *Kronecker*-deltát szolgáltatnak:

$$\int \phi^*_{p_{\alpha_3}}(x_3) \phi_{p_{\beta_3}}(x_3) dx_3 = \delta_{p_{\alpha_3}, p_{\beta_3}}, \ldots, \int \phi^*_{p_{\alpha_N}}(x_N) \phi_{p_{\beta_N}}(x_N) dx_N = \delta_{p_{\alpha_N} p_{\beta_N}} .$$

Ez azt jelenti, hogy (7.14)-ben csak azok a (β) permutációk szolgáltatnak zérustól különböző járulékot, melyekre

$$\beta_3 = \alpha_3, \quad \beta_4 = \alpha_4, \ldots, \quad \beta_N = \alpha_N,$$

azaz (β) az első két elemétől eltekintve ugyanaz, mint (α). Ez kétféleképpen teljesülhet: vagy (β) teljesen ugyanaz, mint (α), ekkor természetesen

$$\beta_1 = \alpha_1 \quad \text{és} \quad \beta_2 = \alpha_2 \tag{29.7.15}$$

is fennáll, vagy pedig (β) első két eleme (α) első két elemének inverziójaként adódik, vagyis

$$\beta_1 = \alpha_2 \quad \text{és} \quad \beta_2 = \alpha_1 . \tag{29.7.16}$$

(7.14)-ben a (β) permutációkra való összegezés tehát csak ezt a két tagot fogja tartalmazni. Megjegyezzük, hogy (7.15) esetén $(-1)^{\beta} = (-1)^{\alpha}$, hiszen a két permutáció azonos, és (7.16) esetén $(-1)^{\beta} = -(-1)^{\alpha}$, hiszen β egy inverzióban különbözik α-tól. Mindezek alapján (7.14) a következőképpen írható:

$$< \Psi_0 \mid V(x_1, x_2) \mid \Psi_0 > = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \int \phi^*_{p_{\alpha_1}}(x_1) \phi^*_{p_{\alpha_2}}(x_2) V(x_1, x_2) (\phi_{p_{\alpha_1}}(x_1) \phi_{p_{\alpha_2}}(x_2) -$$

$$- \phi_{p_{\alpha_2}}(x_1) \phi_{p_{\alpha_1}}(x_2)) dx_1 dx_2 .$$

Itt az x_1 és x_2 szerinti integrál a (6.42) kifejezés egy speciális esetével, a kölcsönhatási energia diagonális mátrixelemével egyezik meg. Bevezetve ezt a jelölést kapjuk:

$$< \Psi_0 \mid V(x_1, x_2) \mid \Psi_0 > = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} (p_{\alpha_1} p_{\alpha_2} \mid V \mid p_{\alpha_1} p_{\alpha_2}) . \qquad (29.7.17)$$

A jobboldalon minden (α) permutációra összegeznünk kell, de az összegzendő mennyiség csak α_1 és α_2-től, a permutáció első két elemétől függ. Ezért minden $(p_i p_j \mid V \mid p_i p_j)$ mátrixelem $(N-2)!$-szor fog előfordulni az összegezés során, nevezetesen mindazon permutációknál, amikor $\alpha_1 = i$ és $\alpha_2 = j$. Mivel i és j függetlenül egymástól 1-től N-ig változhatnak, így

$$< \Psi_0 \mid V(x_1, x_2) \mid \Psi_0 > = \frac{(N-2)!}{N!} \sum_{i,j=1}^{N} (p_i p_j \mid V \mid p_i p_j) . \qquad (29.7.18)$$

Kiszámítottuk tehát az energiakorrekciónak $V(x_1, x_2)$-től származó tagját. Az eredmény látható módon nem függ attól, hogy a számítást éppen az első és a második részecske kölcsönhatására végeztük el, ami természetes is, hiszen a részecskék megkülönböztethetetlenek. (7.13)-ban minden $V(x_k, x_l)$ kölcsönhatás egyaránt a (7.18) járulékot szolgáltatja. Mivel (7.13)-ban a k és l szerinti összegezésnél összesen $N(N-1)$ tag lép fel, ezért a teljes energiakorrekció (figyelembe véve a (7.13)-ban szereplő $\frac{1}{2}$-es tényezőt is):

$$< \Psi_0 \mid V \mid \Psi_0 > = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} (p_i p_j \mid V \mid p_i p_j) . \qquad (29.7.19)$$

Ezt beírva a kölcsönható rendszer (7.12) energiakifejezésébe és tekintetbe véve E_0-nak (7.7) kifejezését, a következő végeredményt kapjuk:

$$E = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{p_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} (p_i p_j \mid V \mid p_i p_j) . \qquad (29.7.20)$$

Az előző §-ban láttuk, hogy a $(p_i p_j \mid V \mid p_i p_j)$ mátrixelem két tagból, a direkt és a kicserélődési tagból épül fel. Ennek megfelelően a kölcsönhatási energiát is felbonthatjuk direkt és kicserélődési részre:

$$< \Psi_0 \mid V \mid \Psi_0 >_{\text{direkt}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} \int \phi^*_{p_i}(x_1) \phi^*_{p_j}(x_2) V(x_1, x_2) \phi_{p_i}(x_1) \phi_{p_j}(x_2) dx_1 dx_2 ,$$

$$< \Psi_0 \mid V \mid \Psi_0 >_{\text{kicserélődési}} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} \int \phi^*_{p_i}(x_1) \phi^*_{p_j}(x_2) V(x_1, x_2) \phi_{p_j}(x_1) \phi_{p_i}(x_2) dx_1 dx_2 . \qquad (29.7.21)$$

E kettő összege a (7.20) kölcsönhatási energiával egyenlő.

*

Megmutatjuk, hogy a (7.20) energiakifejezés igen egyszerűen levezethető a betöltési szám-reprezentáció alkalmazása esetén is. Legyen a reprezentáció bázisa azonos a (7.5) egyrészecske *Schrödinger*-egyenlet sajátfüggvényrendszerével. Ekkor

$$(p \mid \mathcal{H} \mid q) = \int \phi_p^* \mathcal{H} \phi_q dx = \varepsilon_p \delta_{p,q}$$

és a H_0 egyrészecske-operátor a következő lesz

$$H_0 = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p . \tag{29.7.22}$$

A V kölcsönhatási energia pedig a kétrészecske-operátorok (6.41) kifejezése szerint így írható fel:

$$V = \frac{1}{4} \sum_{p,q,r,s} (pq \mid V \mid rs) a_p^+ a_q^+ a_s a_r . \tag{29.7.23}$$

(7.22) és (7.23) összege adja a teljes energiaoperátort:

$$H = H_0 + V = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p + \frac{1}{4} \sum_{p,q,r,s} (pq \mid V \mid rs) a_p^+ a_q^+ a_s a_r . \tag{29.7.24}$$

(7.24) sajátértékproblémáját ismét perturbációszámítással határozzuk meg. H_0 sajátfüggvénye (7.10) lesz, melyet – betöltési szám-reprezentáció esetén – az $a_{p_1}^+, a_{p_2}^+, \ldots, a_{p_N}^+$ keltő operátorokkal generálhatunk a $\mid 0 >$ vákuumállapotból:

$$\mid \Psi_0 > = a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ \ldots a_{p_N}^+ \mid 0 > . \tag{29.7.25}$$

A kölcsönhatás okozta energiaperturbáció:

$$< \Psi_0 \mid V \mid \Psi_0 > = \frac{1}{4} \sum_{p,q,r,s} (pq \mid V \mid rs) < \Psi_0 \mid a_p^+ a_q^+ a_s a_r \mid \Psi_0 > . \tag{29.7.26}$$

Az $a_s a_r$ szorzat hatására két részecske eltűnik a $\mid \Psi_0 >$ állapotból, $a_p^+ a_q^+$ hatására pedig két új részecske keletkezik. $< \Psi_0 \mid a_p^+ a_q^+ a_s a_r \mid \Psi_0 >$ csak akkor lesz zérustól különböző, ha $a_p^+ a_q^+$ ugyanazt a részecskepárt kelti, amit $a_s a_r$ eltüntet. Ez kétféleképpen teljesülhet: vagy $p = r$ és $q = s$, vagy pedig $p = s$ és $q = r$. Figyelembe véve ezt a két lehetőséget, (7.26)-ban az r és s indexekre való összegezés explicite elvégezhető:

$$< \Psi_0 \mid V \mid \Psi_0 > = \frac{1}{4} \sum_{p,q} \{ (pq \mid V \mid pq) < \Psi_0 \mid a_p^+ a_q^+ a_q a_p \mid \Psi_0 > +$$
$$+ (pq \mid V \mid qp) < \Psi_0 \mid a_p^+ a_q^+ a_p a_q \mid \Psi_0 > \} .$$

Mivel a (6.42) definíció szerint

$$(pq \mid V \mid qp) = -(pq \mid V \mid pq) \tag{29.7.27}$$

és mivel a (6.23) felcserélési törvény szerint $a_p a_q = -a_q a_p$, ezért a fenti kifejezés

két tagja egyenlő lesz egymással. Azaz

$$<\Psi_0 \mid V \mid \Psi_0> = \frac{1}{2} \sum_{p,q} (pq \mid V \mid pq) <\Psi_0 \mid a_p^+ a_q^+ a_q a_p \mid \Psi_0> \qquad (29.7.28)$$

$q = p$ esetén a $(pq \mid V \mid pq)$ mátrixelem zérus. (Ez következik a (6.42) definícióból, de kiolvashatjuk a mátrixelem antiszimmetriáját megadó (7.27) egyenletből is.) $p \neq q$ esetén viszont a_p-nek a_q-val és a a_q^+-tel való felcserélése egy-egy előjelváltást okoz, végeredményben tehát

$$<\Psi_0 \mid V \mid \Psi_0> = \frac{1}{2} \sum_{q,p} (pq \mid V \mid pq) <\Psi_0 \mid a_p^+ a_p a_q^+ a_q \mid \Psi_0>$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{p,q} (pq \mid V \mid pq) <\Psi_0 \mid n_p n_q \mid \Psi_0> ,$$

ahol bevezettük a (6.29)-cel definiált betöltési szám-operátorokat. Mivel pedig $\mid \Psi_0>$ sajátfüggvénye a betöltési szám-operátoroknak,

$$n_p n_q \mid \Psi_0> = N_p N_q \mid \Psi_0>,$$

így a kölcsönhatási energia kifejezése:

$$<\Psi_0 \mid V \mid \Psi_0> = \frac{1}{2} \sum_{p,q} (pq \mid V \mid pq) N_p N_q . \qquad (29.7.29)$$

Ez a kifejezés természetesen azonos (7.19)-cel. Ez következik abból, hogy az N_p és N_q betöltési számok értéke $+1$, ha p és q a Ψ_0 állapotban szereplő egyrészecske állapotok $p_1, p_2, \ldots, p_N$ sorszámai közül valók, egyébként a betöltési szám zérus. Tehát (7.29)-ben a p és q szerinti összegezést elég a $p_1, p_2, \ldots, p_N$ indexekre elvégezni, és ebben az esetben (7.29) átmegy (7.19)-be.

A (7.20) energiakifejezés elvben a kölcsönható rendszer tetszőleges energianívójára alkalmazható. Az alapállapot energiáját úgy kapjuk meg, ha Ψ_0-nak a kölcsönhatás mentes H_0 operátor alapállapotának sajátfüggvényét tekintjük. E_0 (7.7) kifejezése nyilván akkor lesz minimális, ha $\varepsilon_{p_1}, \varepsilon_{p_2}, \ldots, \varepsilon_{p_N}$ rendre a (7.5) *Schrödinger*-egyenlet első N sajátértékeivel egyeznek meg. Ha megállapodunk abban, hogy a $p = 0, 1, 2, \ldots$ indexek növekvő sorrendben jelzik az egyes energiasajátértékeket, azaz $\varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \ldots$, akkor a Ψ_0 függvényt a $\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_{N-1}$ egyrészecske állapotokból kell felépíteni. Ezeket az állapotokat „Fermi-tengernek" szokás nevezni. Az alapállapot E_0 energiája tehát

$$E_0 = \sum_{p \in F} \varepsilon_p , \qquad (29.7.30)$$

ahol $p \in F$ azt jelzi, hogy a p index a *Fermi*-tenger állapotain futhat végig.

A kölcsönhatási energiát alapállapotban (7.19) alapján a

$$<\Psi_0 \mid V \mid \Psi_0> = \frac{1}{2} \sum_{p,q \in F} (pq \mid V \mid pq) \qquad (29.7.31)$$

alakban írhatjuk fel, ahol p és q ismét a *Fermi*-tenger állapotait jelentik.

8. §. A Hartree—Fock-módszer

A *Hartree—Fock*-módszer a lehető legjobb közelítő módszer, melyet azon az alapon nyerhetünk, hogy az N részecske rendszer Ψ sajátfüggvényét az egyes részecskék $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_N$ sajátfüggvényeiből építjük fel. A módszer első változatát D. R. HARTREE alkalmazta a két és többelektromos atomok szerkezetének vizsgálatára, de ő még nem vette tekintetbe az elektronok megkülönböztethetetlenségéből adódó antiszimmetria-követelményt. Ezen a hiányon segített V. FOCK, aki a módszert oly módon tökéletesítette, hogy a Ψ sajátfüggvényt az egyes ψ_i-kből úgy építette fel, hogy az antiszimmetrikus függvénye legyen az elektronok koordinátáinak. A *Hartree—Fock*-módszert az atomok és ionok elektronszerkezetének vizsgálatán kívül igen sikeresen alkalmazták a molekulák, a fémek és az atommagok elméletében is.

A *Hartree—Fock*-módszer lényegében véve egy variációs módszer. A rendszer Ψ sajátfüggvényét a kölcsönhatásmentes rendszer (6.10) sajátfüggvényéhez hasonló alakban vesszük fel,

$$\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N) = C \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_2(x_1) \ldots \psi_N(x_1) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) \ldots \psi_N(x_2) \\ \vdots & \vdots \quad \vdots \\ \psi_1(x_N) & \psi_2(x_N) \ldots \psi_N(x_N) \end{vmatrix}, \tag{29.8.1}$$

de most $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_N$ *nem* a $\mathcal{H}$ egyrészecske energiaoperátor sajátfüggvényei, hanem az

$$E = <\Psi \mid H \mid \Psi> \tag{29.8.2}$$

energia variációs elvéből határozzuk meg őket.

Az E energiakifejezés képzéséhez egy áttekinthető és hatékony algebrát kell találnunk. Ugyanis a (8.1) determinánst kifejtve $N!$ számú tagot kapunk, tehát pl. a Cu-atom esetén a tagok száma $28! \approx 10^{30}$ lesz. $E = <\Psi \mid H \mid \Psi>$-ben pedig ennek a négyzete, azaz 10^{60} számú tag lép fel. Ilyen sok tagot tartalmazó kifejezésekkel csak megfelelő algebra birtokában lehet dolgozni.

Az általánosság sérelme nélkül feltételezhetjük, hogy a determinánst alkotó ψ_k függvények normáltak és egymásra ortogonálisak:

$$\int \psi_i^*(x)\psi_j(x)dx = \delta_{i,j}. \tag{29.8.3}$$

Mert ha pl. ψ_2 nem ortogonális ψ_1-re, akkor alkalmasan választott A-val képezhetjük a ψ_1-re ortogonális $\psi_2' = \psi_2 + A\psi_1$ függvényt. Ha a determinánsban ψ_2 helyébe ψ_2'-t írunk, úgy Ψ nem változik meg, hiszen egy determináns egyik oszlopához mindig hozzáadhatjuk egy másik oszlop egy konstansszorosát. Általában tetszés szerinti ψ_i-kből mindig képezhetjük az ortonormált

$$\psi_i' = \sum_{j=1}^{N} A_{ij}\psi_j$$

függvényeket, és ezen vesszős függvényekből alkotott (8.1) típusú determináns,

$$\Psi' = \begin{vmatrix} \psi'_1(x_1) & \psi'_2(x_1) \dots \psi'_N(x_1) \\ \psi'_1(x_2) & \psi'_2(x_2) \dots \psi'_N(x_2) \\ \vdots & \vdots \quad \vdots \\ \psi'_1(x_N) & \psi'_2(x_N) \dots \psi'_N(x_N) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \dots A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} \dots A_{2N} \\ \vdots & \vdots \quad \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} \dots A_{NN} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_2(x_1) \dots \psi_N(x_1) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) \dots \psi_N(x_2) \\ \vdots & \vdots \quad \vdots \\ \psi_1(x_N) & \psi_2(x_N) \dots \psi_N(x_N) \end{vmatrix}$$

csak egy konstans faktorban különbözik a vesszőtlen Ψ-től. Ez a konstans faktor természetesen beleolvad a C normálási állandóba és így Ψ' nem fog különbözni Ψ-től. A (8.3) ortonormáltsági relációk tehát nem jelentenek korlátozást, viszont igen leegyszerűsítik a további számításokat.

A C normálási állandót lényegében véve a 6. §-ban követett eljárással állapíthatjuk meg. (8.1)-et kifejtve kapjuk, hogy

$$\Psi = C \sum (-1)^{\alpha} \psi_{\alpha_1}(x_1) \psi_{\alpha_2}(x_2) \dots \psi_{\alpha_N}(x_N), \tag{29.8.4}$$

tehát

$$\Psi^* \Psi = C^2 \sum_{\alpha,\beta} (-1)^{\alpha}(-1)^{\beta} \left(\psi^*_{\alpha_1}(x_1) \psi_{\beta_1}(x_1)\right) \left(\psi^*_{\alpha_2}(x_2) \psi_{\beta_2}(x_2)\right) \dots \left(\psi^*_{\alpha_N}(x_N) \psi_{\beta_N}(x_N)\right).$$

Integráljunk $x_1, x_2, \dots, x_N$ szerint. Felhasználva a (8.3) ortonormáltsági relációkat, az eredmény:

$$1 = \int \Psi^* \Psi = C^2 \sum_{\alpha,\beta} (-1)^{\alpha}(-1)^{\beta} \delta_{\alpha_1\beta_1}, \delta_{\alpha_2\beta_2} \dots \delta_{\alpha_N\beta_N}.$$

A *Kronecker*-delták miatt csak $(\beta) = (\alpha)$ esetén lesz a szumma jel mögött álló kifejezés zérustól különböző:

$$C^2 \sum_{\alpha} 1 = C^2 N! = 1,$$

amiből:

$$C = \frac{1}{\sqrt{N!}}. \tag{29.8.5}$$

Ezek után képezzük az E energiakifejezést:

$$E = \langle \Psi \mid H \mid \Psi \rangle = \langle \Psi \mid H_0 \mid \Psi \rangle + \langle \Psi \mid V \mid \Psi \rangle. \tag{29.8.6}$$

Először foglalkozzunk a $H_0 = \mathcal{H}(x_1) + \mathcal{H}(x_2) + \dots + \mathcal{H}(x_N)$ energiaoperátortól származó járulékkal. Elegendő lesz ennek egy tagjával, pl. $\mathcal{H}(x_1)$-gyel foglalkozni. Ennek középértéke (8.4) felhasználásával:

$$\langle \Psi \mid \mathcal{H}(x_1) \mid \Psi \rangle = C^2 \sum_{\alpha,\beta} (-1)^{\alpha}(-1)^{\beta} \int \psi^*_{\alpha_1}(x_1) \mathcal{H}(x_1) \psi_{\beta_1}(x_1) dx_1 \int \psi^*_{\alpha_2}(x_2) \psi_{\beta_2}(x_2) dx_2 \dots$$
$$\dots \int \psi^*_{\alpha_N}(x_N) \psi_{\beta_N}(x_N) dx_N. \tag{29.8.7}$$

Az $x_2, x_3, \dots, x_N$ koordináták szerinti integrálok csupa *Kronecker*-deltákat eredményeznek, úgyhogy (8.7)-ben szereplő összegnek csak azon tagjai lesznek zérustól különbözőek, melyeknél $\beta_2 = \alpha_2$, $\beta_3 = \alpha_3, \dots, \beta_N = \alpha_N$. De mivel (β) és (α) egyaránt az $(1, 2, \dots, N)$ számoknak egy-egy permutációját jelenti, ezért, ha (β)

és (α) elemei a másodiktól az N-edik tagig megegyeznek egymással, úgy szükségképpen $\beta_1 = \alpha_1$ is fennáll, vagyis $(\beta) = (\alpha)$ lesz. Ezért (8.7) a következőképpen alakul:

$$<\Psi \mid \mathcal{H}(x_1) \mid \Psi> = C^2 \sum_{\alpha} \int \psi^*_{\alpha_1}(x_1) \mathcal{H}(x_1) \psi_{\alpha_1}(x_1) dx_1.$$

A jobboldalon minden (α) permutációra összegeznünk kell, de az összegzendő mennyiség csak α_1-től, a permutáció első elemétől függ. Ez az első elem az $\alpha_1 = 1, 2, \ldots, i, \ldots, N$ értékek mindegyikét felveheti és adott első elem esetén még $(N-1)!$ számú permutáció lehetséges. Tehát:

$$<\Psi \mid \mathcal{H}(x_1) \mid \Psi> = C^2 (N-1)! \sum_{i=1}^{N} \int \psi^*_i(x_1) \mathcal{H}(x_1) \psi_i(x_1) dx_1.$$

Ha beírjuk a C normálási állandó értékét és az x_1 integrációs változót index nélküli x-el jelöljük, úgy az eredmény

$$<\Psi \mid \mathcal{H}(x_1) \mid \Psi> = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \int \psi^*_i(x) \mathcal{H}(x) \psi_i(x) dx \qquad (29.8.8)$$

lesz. Mivel a részecskék azonosak, ezért ez az eredmény nem függ attól, hogy a számítást épp a $\mathcal{H}(x_1)$ operátorra végeztük; ugyanezt az eredményt adja $\mathcal{H}(x_2)$, $\ldots$, $\mathcal{H}(x_N)$ is. A H_0 operátor középértéke (8.8) N-szerese lesz, vagyis:

$$<\Psi \mid H_0 \mid \Psi> = \sum_{i=1}^{N} \int \psi^*_i(x) \mathcal{H}(x) \psi_i(x) dx. \qquad (29.8.9)$$

Analóg módon határozhatjuk meg a V kölcsönhatási energia középértékét is. A számítás teljesen megegyezik az előző §-ban a kölcsönhatás okozta energiaperturbáció meghatározásánál követett eljárással, csak most a ϕ_i egyrészecskesajátfüggvények helyébe a (8.1) determinánst felépítő ψ_i függvények lépnek. Mivel a (7.19) formula levezetésénél a ϕ_i függvényekről csak azt tételeztük fel, hogy ortonormáltak, és mivel a ψ_i függvények szintén rendelkeznek ezzel a tulajdonsággal, ezért (7.19) mintájára írhatjuk, hogy

$$<\Psi \mid V \mid \Psi> = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int \psi^*_i(x) \psi^*_j(x') V(x, x') \psi_i(x) \psi_j(x') dx dx' -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int \psi^*_i(x) \psi^*_j(x') V(x, x') \psi_j(x) \psi_i(x') dx dx' . \qquad (29.8.10)$$

Az első tag a kölcsönhatási energia direkt, a második pedig a kicserélődési részének felel meg.

(8.9)-et és (8.10)-et (8.6)-ba téve, megkapjuk az E energiát, mint a $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_N$ variálandó függvények kifejezését. A következő feladatunk azon ψ_i függvények meghatározása, melyek az E energiát minimummá teszik. A minimum-keresésnél természetesen nem szabad megfeledkeznünk arról, hogy a ψ_i függvényeknek orto-

normáltaknak kell lenniük. A (8.3) ortonormáltsági relációkat a *Lagrange*-féle multiplikátoros eljárással vesszük tekintetbe, ekkor a következő variációs elvet kapjuk:

$$<\Psi \mid H \mid \Psi> - \sum_{i,j=1}^{N} E_{ij} \int \psi_i^* \psi_j dx = \text{minimum.} \qquad (29.8.11)$$

Variáljunk $\psi_i^*(x)$ szerint. (8.9) és (8.10) variálása a következő kifejezésekre vezet:

$$\frac{\delta}{\delta \psi_i^*} <\Psi \mid H_0 \mid \Psi> = \mathcal{H}(x)\, \psi_i(x)\,,$$

$$\frac{\delta}{\delta \psi_i^*} <\Psi \mid V \mid \Psi> = \left\{ \int \sum_{j=1}^{N} \psi_j^*(x')\, V(x, x')\, \psi_j(x')\, dx' \right\} \psi_i(x) -$$

$$- \left\{ \sum_{j=1}^{N} \int \psi_j^*(x')\, V(x, x')\, \psi_i(x') dx' \right\} \psi_j(x)\,.$$

Továbbá

$$\frac{\delta}{\delta \psi_i^*} \int \psi_i^* \psi_j dx = \psi_j(x)\,.$$

A (8.11) minimum feltétele tehát:

$$\left\{ \mathcal{H}(x) + \sum_{j=1}^{N} \int \psi_j^*(x')\, V(x,x')\, \psi_j(x') dx' \right\} \psi_i(x) -$$

$$- \int \left\{ \sum_{j=1}^{N} \psi_j^*(x')\, V(x, x')\, \psi_j(x) \right\} \psi_i(x') dx' = \sum_{j=1}^{N} E_{ij} \psi_j(x)\,. \qquad (29.8.12)$$

$$(i = 1, 2 \ldots N)$$

Ezek az ún. *Hartree–Fock*-egyenletek. A *Hartree–Fock*-egyenletek egy nemlineáris egyenletrendszert képeznek, melynek megoldásával a ψ_i függvények meghatározhatók. Az E_{ij} *Lagrange*-multiplikátorok értékeit a (8.3) mellékfeltételek szabják meg.

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$G(x) = \int \sum_{j=1}^{N} \psi_j^*(x')\, V(x, x') \psi_j(x') dx'\,, \qquad (29.8.13)$$

$$F(x, x') = \sum_{j=1}^{N} \psi_j^*(x')\, V(x, x') \psi_j(x). \qquad (29.8.14)$$

Ezek segítségével (8.12) a következő alakot ölti:

$$\big(\mathcal{H}(x) + G(x)\big) \psi_i(x) - \int F(x, x') \psi_i(x') dx' = \sum_{j=1}^{N} E_{ij} \psi_j(x)\,. \qquad (29.8.15)$$

$$(i = 1, 2, \ldots N)$$

(8.15) látszatra egy lineáris egyenletrendszer a ψ_i függvényekre, de természetesen tudnunk kell, hogy a benne szereplő G és F mennyiségek maguk is függnek a ψ_i megoldásoktól.

A *Hartree–Fock*-egyenletek megoldása a következőképpen történik. A számítások kiindulását ún. kezdeti ψ_i függvények alkotják. (Pl. atomok esetén ezek lehetnek hidrogén-sajátfüggvények alkalmasan választott rendszámokkal, melyeket az elektronok árnyékoló hatásának figyelembevételével határozhatunk meg.) Ezeknek a kezdeti függvényeknek a segítségével meghatározzuk a G direkt és az F kicserélődési potenciált, a (8.13) és (8.14) képletek alapján. Ezeket beírva (8.15)-be, újabb ψ_i függvényekhez jutunk, melyeket eredményfüggvényeknek nevezünk. A számítás következő részében az eredményfüggvényeket tekintjük kezdeti függvényeknek és újra meghatározzuk G-t és F-et, majd (8.15) megoldásával újabb eredményfüggvényekhez jutunk. Az eljárást tovább ismételjük mindaddig, míg az eredményfüggvények nem egyeznek meg az illető lépés kezdeti függvényeivel, vagyis az előző lépés eredményfüggvényeivel. Ekkor a ψ_i függvények önmagukat reprodukálják, a rendszer tere tehát mintegy önmagát tartja fenn. Innen kapta a módszer a „self consistent field" elnevezést. Az önmagukat reprodukáló „self consistent" ψ_i függvények lesznek a (8.12) *Hartree–Fock*-egyenletek megoldásai.

A *Hartree–Fock*-egyenletek megoldása után képezhetjük az $E = \langle \Psi \mid H \mid \Psi \rangle$ energiakifejezést. (8.9) és (8.10)-ből az energiára a következő kifejezés adódik:

$$E = \sum_{i=1}^{N} \int \psi_i^*(x) \mathcal{H}(x)\, \psi_i(x) dx + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} \int \psi_i^*(x)\, \psi_j^*(x')\, V(x, x') \left(\psi_i(x)\, \psi_j(x') - \right.$$
$$\left. - \psi_j(x)\, \psi_i(x')\right) dx dx' . \qquad (29.8.16)$$

Ezt az energiakifejezést átalakíthatjuk olymódon, hogy a gyakorlati kiértékelésre alkalmasabb alakot öltsön. E célból szorozzuk meg a (8.12) egyenletet $\psi_i^*(x)$-el, integráljunk x szerint, majd pedig összegezzünk i szerint . A következő eredményt kapjuk:

$$\sum_{i=1}^{N} \int \psi_i^*(x)\, \mathcal{H}(x)\, \psi_i(x) dx + \sum_{i,j=1}^{N} \int \psi_i^*(x)\, \psi_j^*(x')\, V(x, x') \left(\psi_i(x)\, \psi_j(x') - \right.$$
$$\left. - \psi_j(x)\, \psi_i(x')\right) dx dx' = \sum_{i=1}^{N} E_{ii} . \qquad (29.8.17)$$

(A jobboldalon felhasználtuk a ψ_i függvények ortonormált voltát.) Vessük ezt össze a (8.16) energiakifejezéssel. Ha (8.16)-ból levonjuk (8.17) $\frac{1}{2}$-szeresét, úgy kapjuk, hogy

$$E = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} \left[E_{ii} + \int \psi_i^*(x)\, \mathcal{H}(x)\, \psi_i(x) dx \right] . \qquad (29.8.18)$$

Az energiának ez az alakja csak az E_{ij} mátrix diagonális elemeit és a $\mathcal{H}$ egyrészecske-operátornak a ψ_i függvényekkel képezett középértékét tartalmazza és mindössze egy egyszeres szummációt $i = 1$-től N-ig.

A gyakorlati esetek legtöbbjében a ψ_i függvényeket csak numerikusan lehet meghatározni. Ilyenkor a

$$\mathcal{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + U$$

operátor középértékének képzése a Δ *Laplace*-operátor fellépte miatt csak elég pontatlanul hajtható végre, mert ismeretes, hogy a numerikus differenciálás általában elég nagy numerikus hibára vezet. Ilyenkor célszerű (8.16)-ból (8.17)-et kivonni, mert ezzel az energiakifejezésből kiesik a $\mathcal{H}$ operátor.

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_{ii} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} \int \psi_i^*(x)\, \psi_j^*(x')\, V(x, x') \left(\psi_i(x)\, \psi_j(x') - \psi_j(x)\, \psi_i(x')\right) dx dx' . \tag{29.8.19}$$

* * *

Megmutatjuk, hogy a *Hartree–Fock*-egyenletek megoldása egy unitér transzformáció erejéig határozatlan. Legyen

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{NN} \end{pmatrix} \tag{29.8.20}$$

egy $N \times N$ méretű unitér mátrix, azaz

$$\sum_{k=1}^{N} A_{ik}^* A_{jk} = \sum_{k=1}^{N} A_{ki}^* A_{kj} = \delta_{ij} . \tag{29.8.21}$$

Azt állítjuk, hogy ha $\psi_i(x)$ és E_{ij} megoldásai a *Hartree–Fock*-egyenleteknek, akkor

$$\psi_i'(x) = \sum_{k=1}^{N} A_{ik} \psi_k(x) \quad \text{és} \quad E_{ij}' = \sum_{k,l=1}^{N} A_{ik} A_{jl}^* E_{kl} \tag{29.8.22}$$

is megoldás. A bizonyítás első lépéseként igazoljuk, hogy a $\psi_i'(x)$ függvények is ortonormáltak:

$$\int \psi_i'^*(x)\, \psi_j'(x)\, dx = \sum_{k,l=1}^{N} A_{ik}^* A_{jl} \int \psi_k^*(x)\, \psi_l(x)\, dx =$$

$$= \sum_{k,l=1}^{N} A_{ik}^* A_{jl} \delta_{kl} = \sum_{k=1}^{N} A_{ik}^* A_{jk} = \delta_{ij} .$$

A következő lépésben megmutatjuk, hogy a G és F potenciálok invariánsak a (8.22) transzformációval szemben. Képezzük a vesszős függvényekből G'-t a

(8.13) képlet szerint:

$$G'(x) = \int \sum_{j=1}^{N} \psi_j'^*(x')\, V(x, x')\, \psi_i'(x')\, dx' = \sum_{j,k,l=1}^{N} A_{jk}^* A_{jl} \int \psi_k^*(x')\, V(x, x')\, \psi_l(x') dx'$$

$$= \sum_{k,l=1}^{N} \delta_{kl} \int \psi_k^*(x') V(x, x') \psi_l(x') dx' = \sum_{k=1}^{N} \int \psi_k^*(x')\, V(x.\, x')\, \psi_k(x') dx' = G(x),$$

vagyis az eredmény megegyezik a vesszőtlen ψ_i-kből képzett G potenciállal. Hasonlóképpen

$$F'(x, x') = \sum_{j=1}^{N} \psi_j'^*(x')\, V(x, x')\, \psi_j'(x) = \sum_{j,k,l=1}^{N} A_{jk}^* A_{jl} \psi_k^*(x')\, V(x, x')\, \psi_l(x)$$

$$= \sum_{k,l=1}^{N} \delta_{kl} \psi_k^*(x')\, V(x, x')\, \psi_l(x) = \sum_{k=1}^{N} \psi_k^*(x') V(x, x')\, \psi_k(x) = F(x, x').$$

G és F invarianciájának birtokában könnyen igazolhatjuk, hogy a ψ' függvények is kielégítik a *Hartree–Fock*-egyenleteket. Szorozzuk meg (8.15)-öt A_{ki}-vel és összegezzünk i szerint 1-től N-ig. Ekkor a baloldalon $\psi_k'(x)$ fog megjelenni:

$$\left(\mathcal{H}(x) + G'(x)\right) \psi_k'(x) - \int F'(x, x')\, \psi_k'(x')\, dx' = \sum_{i,j=1}^{N} A_{ki} E_{ij} \psi_j(x)\,.$$

Itt felhasználtuk a potenciálok invariáns voltát és G helyébe G'-t, F helyébe pedig F'-t írtunk. A jobboldalon szereplő $\psi_j(x)$-et fejezzük ki a vesszős függvényekkel. (8.22)-ból kapjuk, hogy

$$\psi_j(x) = \sum_{l=1}^{N} A_{ij}^* \psi_l'(x)$$

és ezt behelyettesítve az előző formulánkba, az egyenlet a következőképpen alakul:

$$\left(\mathcal{H}(x) + G'(x)\right) \psi_k'(x) - \int F'(x, x') \psi_k'(x') dx' = \sum_{i,j,l=1}^{N} A_{ki} A_{ij}^* E_{ij} \psi_l'(x).$$

Végül vegyük tekintetbe az E_{ij} mátrix (8.22) transzformációs szabályát:

$$\left(\mathcal{H}(x) + G'(x)\right) \psi_k'(x) - \int F'(x, x') \psi_k'(x') dx' = \sum_{l=1}^{N} E_{kl}' \psi_l'(x)\,. \qquad (29.8.23)$$

Ez az egyenlet pontos mása a (8.15) egyenletnek, de most már a vesszős mennyiségek szerepelnek benne. Ezzel igazoltuk, hogy (8.22) valóban kielégíti a *Hartree–Fock*-egyenleteket.

Így tehát (látszólag) minden $\psi_i(x)$, E_{ij} megoldásrendszerből végtelen sok újabb $\psi_i'(x)$, E_{ij}' megoldásrendszert képezhetünk különböző A_{ij} unitér mátrixok segítségével. De beláthatjuk, hogy ezek az új megoldások fizikailag nem különböznek az eredeti megoldástól. Ugyanis sem az E energia, sem a Ψ sajátfüggvény nem függ az alkalmazott A_{ij} unitér transzformációtól. Az energia invariáns voltát a (8.18)

energiakifejezés alapján láthatjuk be. Írjuk ebbe a vesszős megoldásrendszert és használjuk fel (8.22)-t:

$$E' = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2}\left[E'_{ii} + \int \psi_i'^*(x)\mathcal{H}(x)\psi_i'(x)dx\right]$$

$$= \sum_{i,k,l=1}^{N} \frac{1}{2} A_{ik}A_{il}^*\left[E_{kl} + \int \psi_l^*(x)\mathcal{H}(x)\psi_k(x)dx\right]$$

$$= \sum_{k,l}^{N} \frac{1}{2}\delta_{kl}\left[E_{kl} + \int \psi_l^*(x)\mathcal{H}(x)\psi_k(x)dx\right]$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{2}\left[E_{kk} + \int \psi_k^*(x)\mathcal{H}(x)\psi_k(x)dx\right] = E.$$

Az E energia tehát invariáns az unitér transzformációval szemben. Most képezzük a vesszős függvényekből a Ψ' sajátfüggvényt és fejezzük ki ezt a vesszőtlen ψ_i függvényekkel:

$$\Psi' = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \psi_1'(x_1) & \psi_2'(x_1) & \dots & \psi_N'(x_1) \\ \psi_1'(x_2) & \psi_2'(x_2) & \dots & \psi_N'(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_1'(x_N) & \psi_2'(x_N) & \dots & \psi_N'(x_N) \end{vmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{NN} \end{vmatrix}\begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_2(x_1) & \dots & \psi_N(x_1) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) & \dots & \psi_N(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_1(x_N) & \psi_2(x_N) & \dots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix}.$$

Ψ' tehát két determináns szorzatára bomlik fel. Az első az A_{ij} együtthatók determinánsa, melynek értéke – mivel A_{ij} unitér mátrix – $+1$-gyel egyenlő. A másik determináns, a vesszőtlen ψ_i függvényekből felépített, Ψ-vel egyenlő, amiből következik, hogy:

$$\Psi' = \Psi,$$

vagyis a Ψ sajátfüggvény sem változik meg az unitér transzformáció hatására.

A *Hartree–Fock*-egyenletek megoldása tehát egy unitér transzformáció erejéig határozatlan lesz. Ezt a tulajdonságot kihasználva, a *Hartree–Fock*-egyenletek egy tetszőleges $\psi_i(x)$, E_{ij} megoldásrendszeréből – alkalmas A_{ij} választással – mindig áttérhetünk a *standard megoldásra*, melynél az E_{ij} mátrix diagonális

$$E_{ij} = E_i\delta_{ij}. \tag{29.8.24}$$

A standard *Hartree–Fock*-egyenletek abban különböznek (8.15)-től, hogy a jobboldalon $\sum_{j=1}^{N} E_{ij}\psi_j(x)$ helyett egyszerűen $E_i\psi_i(x)$ áll. Ha bevezetjük a *Hartree–Fock*-operátort a

$$\mathcal{H}_{HF} = \mathcal{H} + G - F \tag{29.8.25}$$

definícióval, akkor a *Hartree–Fock*-egyenletek a következő alakot öltik:

$$\left.\begin{aligned} &\mathcal{H}_{HF}\psi_i(x) \equiv (\mathcal{H} + G - F)\psi_i(x) = E_i\psi_i(x), \\ &G(x) = \sum_{j=1}^{N} \int \psi_j^*(x')V(x, x')\psi_j(x')dx', \\ &F\psi_i(x) \equiv \int F(x, x')\psi_i(x')dx, \text{ ahol } F(x, x') = \sum_{j=1}^{N} \psi_j^*(x')V(x,x')\psi_j(x). \end{aligned}\right\} \quad (29.8.26)$$

Az első egyenlet szemmel láthatólag a $\mathcal{H}_{HF}$ operátor sajátértékegyenlete, a másik két egyenlet a $\mathcal{H}_{HF}$ operátorban előforduló G direkt és F kicserélődési potenciált definiálja.

A rendszer összenergiája standard megoldás esetén (8.18) helyett

$$E = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2}\left[E_i + \int \psi_i^*(x)\mathcal{H}(x)\psi_i(x)dx\right] \quad (29.8.27)$$

lesz.

A (8.26) egyenleteket megoldották valamennyi atomra és valamennyi kétatomos molekulára. Az eredmények táblázatokban hozzáférhetők. A *Hartree–Fock*-egyenletek ugyancsak sikerrel alkalmazhatók az atommagok és a szilárd testek elméletében, bár itt a *Hartree–Fock*-egyenletek megoldása igen nagy számolási munkával jár.

9. §. A Hartree—Fock-módszer alkalmazása a kételektron-problémára

Mozogjon két részecske egy $U(\mathbf{r})$ potenciállal leírt külső erőtérben; e külső erőtérről feltesszük, hogy csak az $\mathbf{r}$ helytől függ, de független a részecske s spinkoordinátájától. A két részecske kölcsönhatásáról ugyancsak feltesszük, hogy spinfüggetlen és csak a két részecske kölcsönös távolságától függ, azaz

$$V(x, x') = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (29.9.1)$$

Mivel esetünkben $N = 2$, ezért a (8.26) *Hartree–Fock*-egyenletekben két egyrészecske-függvény, ψ_1 és ψ_2 fog szerepelni és két energiaparaméter, E_1 és E_2. Keressük (8.26) megoldását a következő alakban:

$$\psi_1(x) = f(\mathbf{r})\chi_{+\frac{1}{2}}(s) \quad \text{és} \quad \psi_2(x) = f(\mathbf{r})\chi_{-\frac{1}{2}}(s). \quad (29.9.2)$$

A két energiaparamétert is egyenlőnek tételezzük fel. Ha közös értéküket ε-nal jelöljük, úgy

$$E_1 = E_2 = \varepsilon. \quad (29.9.3)$$

Helyettesítsünk be (8.26)-ba. (9.2)-t G és F kifejezéseibe téve, kapjuk, hogy

$$G(x) = \int f(\mathbf{r}')V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')f(\mathbf{r}')dv' \cdot \sum_{s'} \left(\chi^*_{+\frac{1}{2}}(s')\chi_{+\frac{1}{2}}(s') + \chi^*_{-\frac{1}{2}}(s')\chi_{-\frac{1}{2}}(s')\right),$$

$$F(x, x') = f(\mathbf{r}')V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')f(\mathbf{r}) \cdot \left(\chi^*_{+\frac{1}{2}}(s')\chi_{+\frac{1}{2}}(s) + \chi^*_{-\frac{1}{2}}(s')\chi_{-\frac{1}{2}}(s)\right).$$

Mivel a spinfüggvények ortonormált teljes rendszert alkotnak a spinkoordináták terében, ezért az eredmény:

$$G(x) = 2 \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f^2(\mathbf{r}') dv' , \tag{29.9.4}$$

$$F(x, x') = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}') \delta_{ss'} . \tag{29.9.5}$$

Az F kicserélődési potenciál hatása a (9.2) alatti ψ_i ($i = 1, 2$) függvényekre:

$$F\psi_i(x) = \int F(x, x')\psi_i(x')dx' = \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f(\mathbf{r}) f^2(\mathbf{r}') dv' \sum_{s'} \delta_{ss'} \chi_i(s') =$$

$$= \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f^2(\mathbf{r}') dv' f(\mathbf{r}) \chi_i(s) = \frac{1}{2} G(x)\psi_i(x) .$$

Az F kicserélődési potenciál tehát $\frac{1}{2}$-szerese a G direkt-potenciálnak és ezért $G - F = \frac{1}{2} G$ lesz. Mivel (9.4) szerint G csak az $\mathbf{r}$ változótól függ, ezért a (8.26) *Hartree—Fock*-egyenletek esetünkben a következő alakot öltik:

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \Delta + U(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} G(\mathbf{r}) \right) f(\mathbf{r}) = \varepsilon f(\mathbf{r})$$

$$G(\mathbf{r}) = 2 \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f^2(\mathbf{r}') dv' . \tag{29.9.6}$$

Az első egyenlet alakilag egy *Schrödinger*-egyenlettel azonos, melyben a potenciál szerepét az $U + \frac{1}{2} G$ mennyiség, az ún. *effektív potenciál* játsza. G-t viszont második egyenlete határozza meg az f sajátfüggvény felhasználásával.

A rendszer E energiáját (8.19) alapján számítjuk. Beírva ide (9.2)-t, E-re nyerjük, hogy

$$E = 2\varepsilon - \frac{1}{2} \int G(\mathbf{r}) f^2(\mathbf{r}) dv . \tag{29.9.7}$$

* * *

Héliumatom esetében a (9.6) egyenletekbe U helyébe az atom magjától származó potenciális energia kifejezése kerül, V pedig a két elektron *Coulomb*-kölcsönhatása lesz:

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{2e^2}{r}$$

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} .$$

Ezeket (9.6)-ba téve, a héliumatom *Hartree—Fock*-egyenleteit kapjuk. A probléma csak numerikus úton oldható meg, a fontosabb eredményeket az alábbiakban kö-

zöljük:

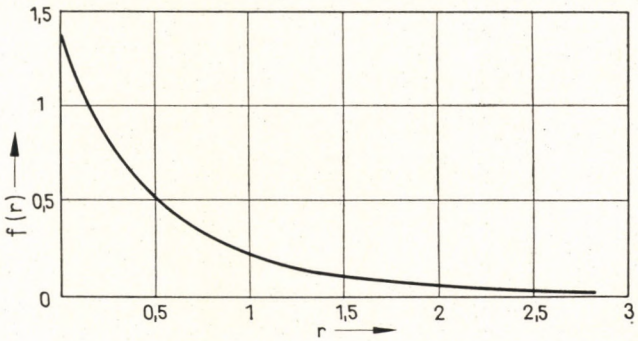
Energiaparaméter $\varepsilon = -0{,}918 \dfrac{e^2}{a_H}$

G értéke az origóban $G(0) = 3{,}374 \dfrac{e^2}{a_H}$

f értéke az origóban $f(0) = 1{,}341 a_H^{-3/2}$

G középértéke $\bar{G} = \int G(\mathbf{r}) f^2(\mathbf{r}) dv = 2{,}054 \dfrac{e^2}{a_H}$.

Az $f(r)$ sajátfüggvényt a 99. ábra szemlélteti.



99. A He-atom *Hartree—Fock* sajátfüggvénye. r-t a_H, f-et pedig $a_H^{-3/2}$ egységekben mértük fel

A héliumatom energiájára (9.7)-ből az

$$E = 2\varepsilon - \frac{1}{2}\bar{G} = -2{,}863 \frac{e^2}{a_H} \tag{29.9.8}$$

értéket kapjuk, míg a tapasztalati érték $E = -2{,}9035 \dfrac{e^2}{a_H}$.

* * *

A *Hartree—Fock*-módszer teljesítőképességének diszkuttálása céljából vizsgáljunk meg egy egyszerű modellt, melyet egzaktul is meg tudunk oldani. Mozogjon két részecske egy háromdimenziós oszcillátorpotenciálban

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} k r^2 \tag{29.9.9}$$

és a kölcsönhatásukat is egy harmonikus erő adja meg,

$$V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2} K(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2. \tag{29.9.10}$$

A kölcsönhatás erőssége alatt a $\lambda = K/k$-t, azaz a két erőállandó viszonyát fogjuk érteni. Ha $\lambda \ll 1$, úgy gyenge, $\lambda \gg 1$ esetén erős kölcsönhatásról beszélünk.

Írjuk fel a rendszer *Hamilton*-operátorát:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1) + U(\mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

tehát

$$H = \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}k(r_1^2 + r_2^2) + \frac{1}{2}K(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2. \tag{29.9.11}$$

Ezen H operátor sajátértékproblémájának megoldása céljából vezessünk be súlyponti és relatív koordinátákat. A súlypont helye és impulzusa

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2,$$

a kétrészecske relatív távolsága és relatív mozgásuk impulzusa pedig

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2).$$

Bevezetve ezen új változókat (9.11)-be, H-ra a következő kifejezést kapjuk:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\frac{1}{2}P^2 + 2p^2\right) + \frac{1}{2}k\left(2R^2 + \frac{1}{2}r^2\right) + \frac{1}{2}Kr^2.$$

Ezt a következőképpen rendezhetjük át:

$$H = \left(\frac{P^2}{4m} + kR^2\right) + \left(\frac{p^2}{m} + \frac{1}{4}k(1 + 2\lambda)r^2\right). \tag{29.9.12}$$

A *Hamilton*-operátor két tagra bomlott fel: az első gömbölyű zárójelben csak a súlyponti, a másodikban csak a relatív mozgás változói szerepelnek:

$$H = H_c + H_r,$$

$$H_c = \frac{P^2}{4m} + kR^2, \tag{29.9.13}$$

$$H_r = \frac{p^2}{m} + \frac{1}{4}k(1 + 2\lambda)r^2.$$

Ezért a H operátor ψ sajátfüggvényét felbonthatjuk két tényezőre, melyek közül az egyik csak a súlypont $\mathbf{R}$ koordinátájától, a másik pedig csak az $\mathbf{r}$ relatív koordinátától függ

$$\psi = \psi_c(\mathbf{R})\psi_r(\mathbf{r}). \tag{29.9.14}$$

A ψ_c függvény H_c-nek, ψ_r pedig H_r-nek kell, hogy sajátfüggvénye legyen,

$$\left(\frac{P^2}{4m} + kR^2\right)\psi_c = E_c\psi_c\,, \tag{29.9.15}$$

$$\left(\frac{p^2}{m} + \frac{1}{4}k(1+2\lambda)r^2\right)\psi_r = E_r\psi_r\,. \tag{29.9.16}$$

A (9.14) sajátfüggvényhez tartozó E sajátérték pedig E_c és E_r összege lesz:

$$E = E_c + E_r\,. \tag{29.9.17}$$

A (9.15) és (9.16) sajátértékproblémák alakilag megegyeznek a háromdimenziós oszcillátor

$$\left(\frac{p^2}{2m_0} + \frac{1}{2}k_0r^2\right)\psi = E\psi \tag{29.9.18}$$

sajátértékproblémájával, csak (9.15) esetén az oszcillátortömeg $m_0 = 2m$ és az erőállandó $k_0 = 2k$ lesz, míg (9.16) esetében $m_0 = \frac{m}{2}$ és $k_0 = \frac{1}{2}k(1+2\lambda)$.

A (9.18) oszcillátorprobléma megoldását (23.13.17) és (23.13.18) adják meg. Alapállapot esetén $n_1 = n_2 = n_3 = 0$ és az energiasajátérték és sajátfüggvény kifejezése a következő:

$$E = \frac{3}{2}h\nu_0 \quad \text{és} \quad \psi(r) = \left(\frac{\alpha_0}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\frac{1}{2}\alpha_0 r^2}\,, \tag{29.9.19}$$

ahol

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k_0}{m_0}} \quad \text{és} \quad \alpha_0 = \frac{2\pi}{h}\sqrt{k_0m_0}. \tag{29.9.20}$$

Ennek alapján közvetlenül felírhatjuk a (9.15) és (9.16) sajátérték-problémák megoldásait:

$$E_c = \frac{3}{2}h\nu \quad \text{és} \quad \psi_c(\mathbf{R}) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\alpha R^2}\,,$$

$$E_r = \frac{3}{2}h\nu\sqrt{1+2\lambda} \quad \text{és} \quad \psi_r(\mathbf{r}) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{3/4}(1+2\lambda)^{3/8}\, e^{-\frac{1}{4}\alpha\sqrt{1+2\lambda}\,r^2}\,, \tag{29.9.21}$$

ahol

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{és} \quad \alpha = \frac{2\pi}{h}\sqrt{km}\,. \tag{29.9.22}$$

Behelyettesítve (9.17)-be és (9.14)-be, megkapjuk a vizsgált kétrészecske-probléma egzakt alapállapotát:

$$E = 3h\nu\,\frac{1+\sqrt{1+2\lambda}}{2}$$

$$\psi = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2}(1+2\lambda)^{3/8} e^{-\alpha R^2} e^{-\frac{1}{4}\alpha\sqrt{1+2\lambda}\,r^2}\,. \tag{29.9.23}$$

Ezek után oldjuk meg ugyanezt a problémát a *Hartree–Fock*-egyenletek segítségével. Alapállapot esetén f és G gömbszimmetrikus függvények lesznek, tehát csak r abszolút értékétől függenek. (9.10) alapján $G(r)$-re nyerjük, hogy:

$$G(r) = K[r^2 \int f^2(r')dv' - 2\mathbf{r} \int \mathbf{r}' f^2(r')dv' + \int r'^2 f^2(r')dv'] . \qquad (29.9.24)$$

Mivel f normált függvény kell, hogy legyen, ezért

$$\int f^2(r')dv' = 1,$$

f gömbszimmetriája miatt pedig

$$\int \mathbf{r}' f^2(r')dv' = 0.$$

Bevezetve még az

$$a^2 = \int r'^2 f^2(r')dv'$$

jelölést, G kifejezése a következőképpen alakul:

$$G(r) = K(r^2 + a^2). \qquad (29.9.25)$$

Írjuk be (9.9)-et és (9.25)-öt (9.6) első egyenletébe. Ekkor a következő sajátértékegyenletet kapjuk:

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k(1+\lambda)r^2 + \varepsilon_0\right) f(r) = \varepsilon f(r), \qquad (29.9.26)$$

ahol

$$\varepsilon_0 = k\lambda a^2/2.$$

(9.26) alakilag ismét a (9.18) oszcillátorproblémával azonos, most az oszcillátor tömeg $m_0 = m$ és az erőállandó $k_0 = k(1+\lambda)$. Az ε_0 konstans tag az f sajátfüggvényt nem befolyásolja, csak az ε sajátértékhez adódik hozzá. (9.26) megoldása (9.19) alapján tehát:

$$\varepsilon = \frac{3}{2} h\nu\sqrt{1+\lambda} + \varepsilon_0, \qquad (29.9.27)$$

$$f(r) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/4} (1+\lambda)^{3/8} e^{-\frac{1}{2}\alpha\sqrt{1+\lambda}r^2} . \qquad (29.9.28)$$

A (9.2) egyrészecske-függvényekből felépített determináns-sajátfüggvény,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} f(r_1)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_1) & f(r_1)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_1) \\ f(r_2)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2) & f(r_2)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2) \end{vmatrix} =$$

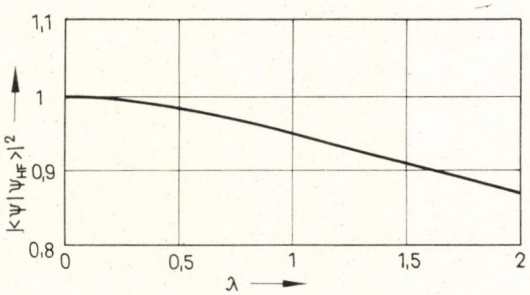
$$= f(r_1)f(r_2)\frac{\chi_{+\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_2) - \chi_{-\frac{1}{2}}(s_1)\chi_{+\frac{1}{2}}(s_2)}{\sqrt{2}} = f(r_1)f(r_2)\chi_{00}(s_1, s_2),$$

térkoordinátáktól függő része:

$$\psi_{HF} = f(r_1)f(r_2) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2}(1+\lambda)^{3/4}e^{-\frac{1}{2}\alpha\sqrt{1+\lambda}(r_1^2+r_2^2)}$$

$$= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2}(1+\lambda)^{3/4}e^{-\frac{1}{2}\alpha\sqrt{1+\lambda}(2R^2+\frac{1}{2}r^2)}. \qquad (29.9.29)$$

Vessük ezt össze a (9.23) egzakt eredménnyel. $\lambda = 0$ esetén, vagyis ha a részecskék között nincs kölcsönhatás, a két kifejezés azonossá válik, ahogy annak lennie is kell, mert kölcsönhatásmentes esetben a *Hartree–Fock*-módszer egzakt eredményt ad. A fizikailag érdekes esetek legtöbbjében a kölcsönhatási energia ugyanolyan nagyságrendű, mint az U potenciál; ezért érdekes megvizsgálni modellünket $\lambda \approx 1$ esetén. A 100. ábrán az egzakt és a *Hartree–Fock*-sajátfüggvények átfedési integrálját:



100. ábra. Az egzakt és a *Hartree—Fock*-sajátfüggvények átfedési integrálja a kölcsönhatás λ erősségének függvényében

$$|\langle\psi|\psi_{HF}\rangle|^2 = \frac{64(1+\lambda)^{3/2}(1+2\lambda)^{3/4}}{[1+\sqrt{1+\lambda}]^3[\sqrt{1+\lambda}+\sqrt{1+2\lambda}]^3}$$

láthatjuk, mint λ függvényét. $\lambda = 1$ esetén az átfedés értéke 95%.

Határozzuk meg a rendszer energiáját *Hartree–Fock*-közelítésben. G (9.25) kifejezése alapján kapjuk, hogy

$$\frac{1}{2}\int G(r)f^2(r)dv = \frac{1}{2}K\left[\int r^2 f^2(r)dv + a^2\int f^2(r)dv\right].$$

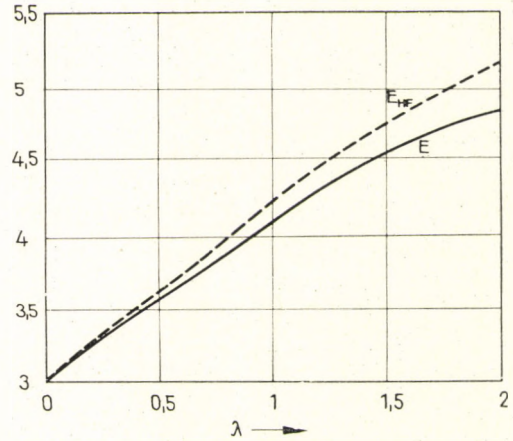
Ha tekintetbe vesszük f normált voltát és a^2 definícióját, úgy

$$\frac{1}{2}\int G(r)f^2(r)dv = Ka^2 = k\lambda a^2 = 2\varepsilon_0 \qquad (29.9.30)$$

lesz. Ezt, valamint (9.27)-et (9.7)-be helyettesítve, az energiára a következő kifejezést nyerjük:

$$E_{HF} = 3h\nu\sqrt{1+\lambda}, \qquad (29.9.31)$$

A 101. ábrán az egzakt és a *Hartree–Fock*-energiát mutatjuk be a λ paraméter függvényeként. Láthatjuk, hogy $E < E_{HF}$ minden λ-ra, ahogy annak lennie is kell, mert a *Hartree–Fock*-módszer, mint egy speciális típusú variációs módszer, mindig felülről közelíti az egzakt értéket. $\lambda = 0$ esetén a *Hartree–Fock*-energia



101. ábra. Az egzakt és a *Hartree–Fock* energia a kölcsönhatás λ erősségének függvényében

egyenlő az egzakttal, $\lambda = 1$ esetén az egzakttól való eltérés mindössze 3,5%. Megállapíthatjuk tehát, hogy ezen egyszerű modell esetén a *Hartree–Fock*-módszer igen jó eredményt ad mind az energiára, mind pedig a hullámfüggvényre.

10. §. A Hartree–Fock-módszer alkalmazása nemesgáz konfigurációjú atomokra

A 8. §-ban ismertetett *Hartree–Fock*-módszer alkalmazható minden olyan rendszerre, mely egymástól megkülönböztethetetlen *Fermi*-részecskékből épül fel. Ebben a §-ban az atomok, méghozzá a lezárt héjakból felépülő, nemesgáz konfigurációjú atomok speciális esetével fogunk foglalkozni. Ebben az esetben a $\psi_i(x)$ elektronpályák alakját a centrális erőtérben való mozgás (23.8.4) sajátfüggvénye adja meg; a *Hartree–Fock*-egyenletekből ez esetben az $R_{nl}(r)$ radiális hullámfüggvényeket határozzuk meg.

Mindenekelőtt a (8.26) *Hartree–Fock*-egyenletek módosított alakját fogjuk felírni, ami a konkrét számolásokra sokszor alkalmasabb, mint az eredeti (8.26) egyenletrendszer. Az $F(x, x')$ kicserélődési potenciál helyett bevezetjük az $F_{ij}(x)$ kicserélődési mátrixot a következő definícióval:

$$F_{ij}(x) = \int \psi_j^*(x') V(x, x') \psi_i(x') dx' . \qquad (29.10.1)$$

Ezzel az F operátor hatása a $\psi_i(x)$ függvényre a következőképpen fejezhető ki:

$$F\psi_i = \int F(x, x')\,\psi_i(x')dx' = \int \left(\sum_{j=1}^{N} \psi_j^*(x')\,V(x, x')\,\psi_j(x) \right) \psi_i(x')dx'$$

$$= \sum_{j=1}^{N} \left(\int \psi_j^*(x')\,V(x, x')\,\psi_i(x')\,dx' \right) \psi_j(x) = \sum_{j=1}^{N} F_{ij}(x)\,\psi_j(x)\,. \quad (29.10.2)$$

(8.26)-ból következik, hogy a G direkt potenciál az F_{ij} mátrix diagonális elemeinek összegével egyenlő

$$G(x) = \sum_{i=1}^{N} \int \psi_i^*(x')\,V(x, x')\,\psi_i(x')dx' = \sum_{i=1}^{N} F_{ii}(x)\,. \quad (29.10.3)$$

(10.2) alapján a (8.26) standard *Hartree–Fock*-egyenletet a következőképpen írhatjuk fel:

$$(\mathcal{H} + G(x) - E_i)\,\psi_i(x) = \sum_{j=1}^{N} F_{ij}(x)\,\psi_j(x). \quad (29.10.4)$$

A (10.1), (10.3) és (10.4) egyenletek ekvivalensek a *Hartree–Fock*-egyenletekkel és a további számításainkban ezekből a formulákból fogunk kiindulni.

Tekintsünk most egy Z rendszámú atomot. Az atom lehet ionizálva is, tehát az N elektronszámról nem tételezzük fel, hogy szükségképpen megegyezik a Z rendszámmal. A mag terében mozgó elektron potenciális energiája $U = -\dfrac{Ze^2}{r}$, tehát

$$\mathcal{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\Delta - \frac{Ze^2}{r}. \quad (29.10.5)$$

Két elektron kölcsönhatási energiáját a *Coulomb*-féle törvény adja meg

$$V(x, x') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (29.10.6)$$

Behelyettesítve (10.5)-öt, ill. (10.6)-ot (10.4), (10.1) és (10.3)-ba, megkapjuk az atomokra vonatkozó *Hartree–Fock*-egyenleteket. Ezen egyenletek lényeges mértékben leegyszerűsödnek, ha figyelembe vesszük az atom gömbszimmetrikus voltát és az egyes ψ_i elektronállapotokat és az E_i energiákat a centrális erőtérnek megfelelő

$$\psi_i(x) = \frac{1}{r} R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\vartheta, \phi)\,\chi_{m_s}(s), \qquad E_i = E_{nl} \quad (29.10.7)$$

alakban vesszük fel. Az x koordináta most az (r, ϑ, ϕ, s) változók, az i index pedig az (n, l, m, m_s) kvantumszámok összességét jelenti. Fel fogjuk tételezni, hogy az atom elektronkonfigurációja nemesgázszerű, tehát minden pálya teljesen lezárt. Ez azt jelenti, hogy adott n-nel és l-lel jellemzett pálya esetén minden m mágne-

ses és minden m_s spinkvantumszámú elektronállapot betöltött, azaz az (n, l) pályán levő elektronok száma $2(2l + 1)$.

Mindenekelőtt írjuk fel a kicserélődési mátrix kifejezését. Legyen

$$i = (n, l, m, m_s) \text{ és } j = (n', l', m', m_s'). \tag{29.10.8}$$

(10.7)-et és (10.6)-ot (10.1)-be írva kapjuk, hogy

$$F_{ij}(x) = e^2 \delta_{m_s m_s'} \int \frac{1}{r'^2} R_{n'l'}(r')\, Y^*_{l'm'}(\vartheta', \phi') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} R_{nl}(r') Y_{lm}(\vartheta', \phi') r'^2 dr' d\Omega' .$$

A spinkvantumszámokra vonatkozó *Kronecker*-delta a spinfüggvények ortonormáltságát kifejező $\sum_{s'} \chi^*_{m_s}(s')\, \chi_{m_s'}(s') = \delta_{m_s m_s'}$ relációból ered.

Ismeretes, hogy $\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ a következő végtelen sorral állítható elő:

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{\lambda=0}^{\infty} Q_\lambda(r, r')\, P_\lambda(\cos \Theta), \tag{29.10.9}$$

ahol Θ az $\mathbf{r}$ és az $\mathbf{r}'$ vektorok által bezárt szög, P_λ a λ-adik *Legendre*-polinom, Q_λ pedig a következő képlettel adható meg:

$$Q_\lambda(r, r') = \begin{cases} r'^\lambda / r^{\lambda+1}, & \text{ha } r' \leq r, \\ r^\lambda / r'^{\lambda+1}, & \text{ha } r' \geq r. \end{cases} \tag{29.10.10}$$

Írjuk be (10.9)-et F_{ij} kifejezésébe. Az eredményt a következő alakra hozhatjuk:

$$F_{ij}(x) = e^2 \delta_{m_s m_s'} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \Phi_\lambda(nl, n'l'; r)\, A_\lambda(lm, l'm'; \vartheta, \phi), \tag{29.10.11}$$

ahol

$$\Phi_\lambda(nl, n'l'; r) = \int_0^\infty Q_\lambda(r, r') R_{nl}(r') R_{n'l'}(r') dr', \tag{29.10.12}$$

$$A_\lambda(lm, l'm'; \vartheta, \phi) = \int Y_{lm}(\vartheta' \phi') P_\lambda(\cos \Theta) Y^*_{l'm'}(\vartheta' \phi') d\Omega' . \tag{29.10.13}$$

Itt csak Φ_λ tartalmazza az egyelőre ismeretlen radiális hullámfüggvényeket, A_λ a gömbfüggvényeknek egy meghatározott integrálja, mely a matematikai analízis szokásos módszereivel meghatározható.

(10.11)-ből a $G(x)$ direkt potenciálra következő kifejezés adódik:

$$G(x) = \sum_i F_{ii}(x) = 2e^2 \sum_{nl} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \Phi_\lambda(nl, nl; r) \sum_{m=-l}^{l} A_\lambda(lm, lm; \vartheta, \phi) . \tag{29.10.14}$$

Az n és l szerinti összegezés az atomban betöltött pályákra terjed ki; m és m_s szerinti összegezésnél tekintetbe vettük, hogy a pályák lezártak, tehát m szerint $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$-re és m_s szerint $m_s = \pm \frac{1}{2}$-re kell összegezni.

(10.14)-ben az m szerinti összeget explicite kiszámíthatjuk. (10.13) alapján ugyanis

$$\sum_{m=-l}^{l} A_\lambda(lm, lm; \vartheta, \phi) = \int P_\lambda(\cos\Theta) \sum_{m=-l}^{l} |Y_{lm}(\vartheta', \phi')|^2 \, d\Omega' . \quad (29.10.15)$$

A gömbfüggvények addíciós tétele szerint

$$\sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\vartheta' \phi') Y_{lm}(\vartheta, \phi) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\Theta) , \quad (29.10.16)$$

ahol Θ a (ϑ, ϕ) és a (ϑ', ϕ') irányok által bezárt szög. Speciálisan, ha $\vartheta' = \vartheta$ és $\phi' = \phi$, akkor $\Theta = 0$ és

$$\sum_{m=-l}^{l} |Y_{lm}(\vartheta' \phi')|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} .$$

Ezt (10.15)-be téve a

$$\sum_{m=-l}^{l} A_\lambda(lm, lm; \vartheta, \phi) = \frac{2l+1}{4\pi} \int P_\lambda(\cos\Theta) \, d\Omega' = (2l+1) \, \delta_{\lambda,0}$$

eredményt kapjuk. Ha ezt behelyettesítjük (10.14)-be, úgy a λ szerinti összegezésből csak a $\lambda = 0$-nak megfelelő tag marad meg és G-re nyerjük, hogy

$$G(x) = e^2 \sum_{nl} 2(2l+1) \Phi_0(nl, nl; r) . \quad (29.10.17)$$

Tehát G csak az r radiális koordinátától függ. Kifejezése a $\lambda = 0$ indexű (10.12) típusú radiális integrálokat tartalmazza.

Ezek után térjünk rá a (10.4) jobb oldalán álló $\sum_{j=1}^{N} F_{ij} \psi_j$ kifejezés kiszámítására. (10.11) és (10.7) felhasználásával kapjuk:

$$\sum_{j=1}^{N} F_{ij}(x) \psi_j(x) = e^2 \sum_{n'l'} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \Phi_\lambda(nl, n'l'; r) \frac{1}{r} R_{n'l'}(r) \times$$

$$\times \sum_{m'=-l'}^{l'} A_\lambda(lm, l'm'; \vartheta\phi) \, Y_{l'm'}(\vartheta, \phi) \, \chi_{m_s}(s) . \quad (29.10.18)$$

Foglalkozzunk először az m' szerinti összegezéssel. A_λ-t definiáló (10.13) alapján írhatjuk, hogy

$$\sum_{m'=-l'}^{l'} A_\lambda(lm, l'm'; \vartheta, \phi) Y_{l'm'}(\vartheta\phi) = \int Y_{lm}(\vartheta'\phi') P_\lambda(\cos\Theta) \times$$

$$\times \left(\sum_{m'=-l'}^{l'} Y^*_{l'm'}(\vartheta'\phi') \, Y_{l'm'}(\vartheta \, \phi) \right) d\Omega' .$$

Felhasználva a (10.16) addíciós tételt, kapjuk, hogy

$$\sum_{m'=-l'}^{l'} A_\lambda(lm,l'm';\vartheta,\phi)\,Y_{l'm'}(\vartheta\phi) = \frac{2l'+1}{4\pi}\int P_\lambda(\cos\Theta)\,P_{l'}(\cos\Theta)\,Y_{lm}(\vartheta'\phi')d\Omega' . \tag{29.10.19}$$

A P_λ és $P_{l'}$ *Legendre*-polinomok szorzatát sorbafejtjük a *Legendre*-polinomok szerint:

$$P_\lambda(\cos\Theta)P_{l'}(\cos\Theta) = \sum_{L=0}^{\infty} \alpha_{\lambda l',L}P_L(\cos\Theta) . \tag{29.10.20}$$

Az itt fellépő $\alpha_{\lambda l',L}$ sorfejtési együtthatók a *Legendre*-polinomok elmélete alapján kiszámíthatók. Zérustól különböző csak akkor lesz $\alpha_{\lambda l',L}$, ha $|\lambda - l'| \leq L \leq (\lambda + l')$. Ezért (10.20)-ban az L szerinti összeg tulajdonképpen csak $|\lambda - l'|$-től $|\lambda + l'|$-ig terjed. Írjuk be (10.20)-at (10.19)-be:

$$\sum_{m'=-l'}^{l'} A_\lambda(lm,l'm';\vartheta,\phi)\,Y_{l'm'}(\vartheta,\phi) = \frac{2l'+1}{4\pi}\sum_{L=0}^{\infty}\alpha_{\lambda l',L}\int P_L(\cos\Theta)\,Y_{lm}(\vartheta'\phi')\,d\Omega' . \tag{29.10.21}$$

Az itt fellépő integrál kiszámításához használjuk fel fordított irányban a (10.16) addíciós tételt:

$$\int P_L(\cos\Theta)\,Y_{lm}(\vartheta'\phi')d\Omega' = \frac{4\pi}{2L+1}\sum_{M=-L}^{L} Y_{LM}(\vartheta\phi)\int Y^*_{LM}(\vartheta'\phi')\,Y_{lm}(\vartheta'\phi')d\Omega'$$

$$= \frac{4\pi}{2L+1}\sum_{M=-L}^{L} Y_{LM}(\vartheta\phi)\delta_{Ll}\delta_{Mm} = \frac{4\pi}{2l+1}\delta_{Ll}Y_{lm}(\vartheta\phi) .$$

Beírva (10.21)-be kapjuk:

$$\sum_{m'=-l'}^{l'} A_\lambda(lm,l'm';\vartheta,\phi)Y_{l'm'}(\vartheta\phi) = \frac{2l'+1}{2l+1}\alpha_{\lambda l',l}Y_{lm}(\vartheta\phi) . \tag{29.10.22}$$

Vezessük be a következő jelölést:

$$\beta_\lambda(l,l') = \frac{2l'+1}{2l+1}\alpha_{\lambda l',l} , \tag{29.10.23}$$

ezzel (20.22) a következő alakban írható fel:

$$\sum_{m'=-l'}^{l'} A_\lambda(lm,l'm';\vartheta,\phi)Y_{l'm'}(\vartheta\phi) = \beta_\lambda(l,l')Y_{lm}(\vartheta\phi). \tag{29.10.24}$$

Eredményünk szerint tehát a baloldalon álló összeg arányos magával az $Y_{lm}(\vartheta\phi)$ gömbfüggvénnyel. A $\beta_\lambda(l,l')$ arányossági tényezőt (10.23) definiálja. A benne szereplő $\alpha_{\lambda l';l}$ koefficienst, amint említettük, a (10.20) sorfejtés együtthatóinak meg-

állapításával határozhatjuk meg. Az ilymódon kapott $\beta_\lambda(l, l')$ tényezőket az alábbi táblázatban állítottuk össze:

l	l'	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4
s	s	1	0	0	0	0
s	p	0	1	0	0	0
s	d	0	0	1	0	0
p	s	0	1/3	0	0	0
p	p	1	0	2/5	0	0
p	d	0	2/3	0	3/7	0
d	s	0	0	1/5	0	0
d	p	0	2/5	0	9/35	0
d	d	1	0	2/7	0	2/7

Írjuk be (10.24)-et (10.18)-ba:

$$\sum_{j=1}^{N} F_{ij}(x)\,\psi_j(x) = e^2 \frac{1}{r}\left[\sum_{n'l'}\sum_{\lambda=0}^{\infty} \beta_\lambda(l, l')\,\Phi_\lambda(nl, n'l'; r)\,R_{n'l'}(r)\right] Y_{lm}(\vartheta\,\phi)\chi_{m_s}(s)\,. \tag{29.10.25}$$

Eszerint tehát a (10.4) *Hartree–Fock*-egyenlet jobboldalán álló kifejezés éppen olyan formában tartalmazza az Y_{lm} gömbfüggvényt és a $\chi_{m_s}(s)$ spinfüggvényt, mint a baloldalon álló $\psi_i(x)$ függvény. Természetesen ugyanez áll (10.4) baloldalára is, hiszen tekintetbe véve (10.5)-öt, valamint azt a tényt, hogy G csak r-től függ, (10.4) baloldala a következőképpen alakul:

$$(\mathcal{H} + G - E_i)\psi_i = \frac{1}{r}\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} + G(r) - E_{nl}\right]\times$$

$$\times\, R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \phi)\chi_{ms}(s)\,. \tag{29.10.26}$$

Ha ezt egyenlővé tesszük (10.25)-tel és az így kapott egyenlet mindkét oldalát elosztjuk $\frac{1}{r}\,Y_{lm}(\vartheta, \phi)\chi_{m_s}(s)$-sel, úgy megkapjuk az $R_{nl}(r)$ radiális hullámfüggvényre vonatkozó *Hartree–Fock*-egyenletet:

$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} + G(r) - E_{nl}\right] R_{nl}(r)$$

$$= e^2 \sum_{n'l'}\sum_{\lambda=0}^{\infty} \beta_\lambda(l, l')\Phi_\lambda(nl, n'l'; r)R_{n'l'}(r)\,, \tag{29.10.27}$$

ahol, mint már megbeszéltük, a λ szerinti összegezésből véges számú tag lesz zérustól különböző, nevezetesen azok, amelyekre $|\,l' - \lambda\,| \leq l \leq (l' + \lambda)$, vagyis olyan λ-kra, melyekre

$$|\,l - l'\,| \leq \lambda \leq (l + l') \tag{29.10.28}$$

teljesül.

Írjuk fel összefoglalva a radiális *Hartree–Fock*-egyenleteket. A $G(r)$ direkt potenciál helyett vezessük be a $Z^*(r)$ *effektív rendszám*ot a

$$-\frac{Ze^2}{r}+G(r)=-\frac{Z^*(r)e^2}{r}$$

definícióval. Ezzel a (10.27), (10.12) és (10.17) a következőképpen alakul:

$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{Z^*(r)e^2}{r}-E_{nl}\right]R_{nl}(r)$$

$$=e^2\sum_{n'l'}\sum_{\lambda=|l-l'|}^{l+l'}\beta_\lambda(l,l')\Phi_\lambda(nl,n'l';r)R_{n'l'}(r)\,,$$

$$\Phi_\lambda(nl,n'l';r)=\int_0^\infty Q_\lambda(r,r')R_{nl}(r')dr'\,, \tag{29.10.29}$$

$$Z^*(r)=Z-r\sum_{nl}2(2l+1)\Phi_0(nl,nl;r)\,.$$

Ezen egyenletek (numerikus úton való) megoldásával határozhatjuk meg az atom elektronszerkezetét. (10.29) megoldása két szempontból is lényegesen egyszerűbb, mint az eredeti (10.4) egyenleteké. Egyrészt a meghatározandó $R_{nl}(r)$ függvények csak egy változótól, az r radiális koordinátától függenek, míg $\psi_i(x)$ argumentumában x négy koordináta, r,ϑ,ϕ és s összefoglaló jele. Másrészt a meghatározandó R_{nl} függvények száma nem az elektronok számával, hanem a betöltött (n,l) pályák számával egyezik meg. Pl. a $Z=N=36$ elektronnal rendelkező Kr-atomban a betöltött pályák száma mindössze 8, a $Z=N=103$ elektronos Lw-atomban pedig csak 18.

A *Hartree–Fock*-egyenletek megbeszélése után írjuk fel az atom energiakifejezését. (8.19)-et, az F_{ij} kicserélődési mátrix segítségével a következőképpen írhatjuk fel:

$$E=\sum_{i=1}^N E_i-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^N\int\psi_i^*(x)[F_{jj}(x)\psi_i(x)-F_{ij}(x)\psi_j(x)]dx$$

$$=\sum_{i=1}^N E_i-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N\int\psi_i^*(x)G(x)\psi_i(x)dx+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^N\int\psi_i^*(x)F_{ij}(x)\psi_j(x)dx\,. \tag{29.10.30}$$

Írjuk most be ide $\psi_i(x)$-nek és E_i-nek (10.7) kifejezését, továbbá $G(x)$-et (10.17)-ből és $\sum_{j=1}^N F_{ij}\psi_j$-t (10.25)-ből. Az Y_{lm} és a χ_{m_s} függvények normáltságát figyelembe véve, az energiakifejezésben csak a következő integrálok fognak előfordulni:

$$\mathcal{J}_\lambda(nl,n'l')=e^2\int\Phi_\lambda(n'l',n'l';r)\,R_{nl}^2(r)dr\,,$$
$$\mathcal{F}_\lambda(nl,n'l')=e^2\int\Phi_\lambda(nl,n'l';r)\,R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)dr\,. \tag{29.10.31}$$

Ezekkel az energia kifejezése a következő lesz:

$$E = \sum_{nl} 2(2l+1)E_{nl} - \frac{1}{2}\sum_{n,l,n'l'} 2(2l+1)\,2(2l'+1)\,\mathcal{G}_{J0}(nl, n'l') +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{nl,n'l'}\sum_{\lambda=|l-l'|}^{l+l'} 2(2l+1)\,\beta_\lambda(l,l')\,\mathcal{F}_\lambda(nl, n'l')\,. \qquad (29.10.32)$$

A Φ_λ integrált definiáló (10.12) képlet felhasználásával $\mathcal{G}_{J\lambda}$-át és $\mathcal{F}_\lambda$-át kifejezhetjük közvetlenül az R_{nl} radiális sajátfüggvényekkel:

$$\mathcal{G}_{J\lambda}(nl, n'l') = e^2 \int_0^\infty\!\!\int Q_\lambda(r, r')\,R^2_{nl}(r)\,R^2_{n'l'}(r')dr dr'\,,$$

$$\mathcal{F}_\lambda(nl, n'l') = e^2 \int_0^\infty\!\!\int Q_\lambda(r, r')\,R_{nl}(r)\,R_{n'l'}(r)R_{nl}(r')\,R_{n'l'}(r')dr dr'\,. \qquad (29.10.33)$$

E képletekből azonnal látszik, hogy

$$\mathcal{G}_{J\lambda}(nl, n'l') = \mathcal{G}_{J\lambda}(n'l', nl) \quad \text{és} \quad \mathcal{F}_\lambda(nl, n'l') = \mathcal{F}_\lambda(n'l', nl)\,, \qquad (29.10.34)$$

továbbá, hogy

$$\mathcal{G}_{J\lambda}(nl, nl) = \mathcal{F}_\lambda(nl, nl)\,. \qquad (29.10.35)$$

A (10.29) és (10.32) alapegyenletek felírásának illusztrálására tekintsük a semleges neon atom esetét: $Z = N = 10$. Ennek 3 lezárt héja van: az $(1s)^2$, a $(2s)^2$ és a $(2p)^6$ héjak. Neonra a (10.29) *Hartree–Fock*-egyenletrendszer a következőképpen alakul (atomi egységeket használunk, tehát $h = 2\pi$ és $e = m = 1$):

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{Z^*(r)}{r} - E_{1s}\right]R_{1s}(r) =$$

$$= \Phi_0(1s, 1s; r)\,R_{1s}(r) + \Phi_0(1s, 2s; r)\,R_{2s}(r) + \Phi_1(1s, 2p; r)\,R_{2p}(r),$$

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{Z^*(r)}{r} - E_{2s}\right]R_{2s}(r) =$$

$$= \Phi_0(2s, 1s; r)\,R_{1s}(r) + \Phi_0(2s, 2s; r)\,R_{2s}(r) + \Phi_1(2s, 2p; r)\,R_{2p}(r),$$

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r^2} - \frac{Z^*(r)}{r} - E_{2p}\right]R_{2p}(r) = \frac{1}{3}\Phi_1(2p, 1s; r)\,R_{1s}(r) +$$

$$+\frac{1}{3}\Phi_1(2p, 2s; r)\,R_{2s}(r) + \Phi_0(2p, 2p; r)\,R_{2p}(r) + \frac{2}{5}\Phi_2(2p, 2p; r)R_{2p}(r)$$

és

$$Z^*(r) = Z - r[2\Phi_0(1s, 1s; r) + 2\Phi_0(2s, 2s; r) + 6\Phi_0(2p, 2p; r)].$$

(10.32)-ből, figyelembe véve a (10.34) szimmetriatulajdonságot, a neonatom

energiájára a következő kifejezést kapjuk:

$$E = 2E_{1s} + 2E_{2s} + 6E_{2p} - [2\mathcal{C}_{j0}(1s, 1s) + 4\mathcal{C}_{j0}(1s, 2s) +$$
$$+ 12\mathcal{C}_{j0}(1s, 2p) + 2\mathcal{C}_{j0}(2s, 2s) + 12\mathcal{C}_{j0}(2s, 2p) + 18\mathcal{C}_{j0}(2s, 2p)] +$$
$$+ [\mathcal{F}_0(1s, 1s) + 2\mathcal{F}_0(1s, 2s) + 2\mathcal{F}_1(1s, 2p) + \mathcal{F}_0(2s, 2s) +$$
$$+ 2\mathcal{F}_1(2s, 2p) + 3\mathcal{F}_0(2p, 2p) + \frac{6}{5}\mathcal{F}_2(2p, 2p)].$$

Felhasználva (10.35)-öt, az energiakifejezés a következőképpen egyszerűsödik:

$$E = 2E_{1s} + 2E_{2s} + 6E_{2p} - [\mathcal{C}_{j0}(1s, 1s) + \mathcal{C}_{j0}(2s, 2s) +$$
$$+ 15\mathcal{C}_{j0}(2p, 2p) - \frac{6}{5}\mathcal{C}_{j2}(2p, 2p) + 4\mathcal{C}_{j0}(1s, 2s) + 12\mathcal{C}_{j0}(1s, 2p) +$$
$$+ 12\mathcal{C}_{j0}(2s, 2p)] + [2\mathcal{F}_0(1s, 2s) + 2\mathcal{F}_1(1s, 2p) + 2\mathcal{F}_1(2s, 2p)].$$

11. §. Az atomok statisztikus elmélete

Nehéz atomok, vagyis sok elektront tartalmazó atomok esetére THOMAS és FERMI egymástól függetlenül egy jól bevált közelítő módszert dolgoztak ki az atom elektron- és potenciáleloszlásának meghatározására. A módszer igen szemléletes és egyszerű: azon alapszik, hogy az atomok elektronjait statisztikusan kezeljük. Ha N-nel jelöljük az atom elektronjainak számát, akkor a $3N$-dimenziós probléma ily módon egy 3-dimenziós problémává redukálódik, mely igen szemléletes és alkalmazásaiban is igen egyszerű. Meglepő, hogy ez a statisztikus atommodell még könnyű atomok ($N \cong 10$) esetén is elég jó közelítést ad, sőt ha bizonyos korrekciókat figyelembe veszünk, akkor még kisebb elektronszámok esetében is meglepően jó eredményeket szolgáltat.

Az atom statisztikus modelljében az elektronokat mint egy folytonos sűrűségeloszlású negatív töltésű elektronfelhőt tekintjük, melyet első közelítésben a mag vonzása és a felhő negatív töltésű részecskéi közti taszítás tart egyensúlyban. Ezt az eredeti ún. *Thomas–Fermi*-modellt az idők folyamán több irányban módosították, ill. korrigálták.

A *Thomas–Fermi*-modell alapegyenletéhez igen egyszerűen úgy juthatunk el, hogy meghatározzuk egy statisztikus atom energiakifejezését. Az atom rendszáma legyen Z, elektronszáma N; mindkettőről feltételezzük, hogy 1-hez képest nagy számok. Az energiakifejezés kiszámítása céljából bontsuk fel az atom térfogatát dv nagyságú térfogatelemekre, melyekben még sok elektron van és amelyekben a potenciál még praktice konstansnak tekinthető. E két feltétel közül az első a magtól nagy távolságban, ahol az elektronok száma kicsi, a második pedig a mag közvetlen közelében, ahol a magpotenciál a magtól való távolsággal, r-rel igen gyorsan változik, nem teljesíthető. Ha ezektől a nehézségektől egyelőre eltekintünk, akkor az egyes dv térfogatelemekben levő elektronokat egy elfajult elektrongáznak te-

kinthetjük a hőmérséklet abszolút nulla pontján, melyre alkalmazhatjuk a huszadik fejezet 19. §-ának eredményeit. Az energiakifejezésből az elektronsűrűség szerinti variáció által igen egyszerűen nyerhető a statisztikus modell alapegyenlete. Mi ezt a következőkben csak az eredeti *Thomas–Fermi*-modellen mutatjuk be, a bővített, ill. korrigált modellek esetében az eljárás teljesen hasonló.

Az eredeti *Thomas–Fermi*-atommodell energiája három tagból tevődik össze, a kinetikus energiából, E_k-ból, az elektronoknak a maggal való kölcsönhatási energiájából, E_p^k-ból, és az elektronoknak egymással való kölcsönhatási energiájából, E_p^e-ből.

(20.19.8) szerint az elektrongáz kinetikus energiájának sűrűsége $\kappa_F \rho^{5/3}$, ahol ρ az elektronsűrűség és κ_F a következő univerzális állandó

$$\kappa_F = \frac{1}{2}(3\pi^2)^{2/3} e^2 a_H. \tag{29.11.1}$$

A kinetikus energia sűrűségének kifejezésével E_k számára a következő kifejezést nyerjük

$$E_k = \kappa_F \int \rho^{5/3} dv. \tag{29.11.2}$$

A potenciális energia kifejezése szintén egyszerűen nyerhető. A mag potenciálja a magtól r távolságban

$$V_k(r) = \frac{Ze}{r}, \tag{29.11.3}$$

tehát

$$E_p^k = -\int V_k \rho e dv. \tag{29.11.4}$$

Az elektronok kölcsönhatási energiájának meghatározásához szükségünk van az elektronfelhő potenciáljára az $\mathbf{r}$ helyen. Ez a következő

$$V_e(\mathbf{r}) = -e \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} dv'. \tag{29.11.5}$$

Ezzel a kifejezéssel E_p^e számára a következő kifejezés,

$$E_p^e = -\frac{1}{2} e \int V_e \rho dv, \tag{29.11.6}$$

adódik; itt az 1/2 faktor azért szerepel, hogy az elektronok kölcsönhatását ne számítsuk duplán.

A *Thomas–Fermi*-atom összenergiája tehát a következőképpen alakul

$$E = E_k + E_p^k + E_p^e = \int \left[\kappa_F \rho^{5/3} - \left(V_k + \frac{1}{2} V_e \right) \rho e \right] dv. \tag{29.11.7}$$

Az elektronsűrűségnek, ρ-nak a következő mellékfeltételt kell teljesítenie

$$\int \rho e dv = Ne. \tag{29.11.8}$$

Az elektronsűrűséget E-nek ρ szerinti variációjából kell meghatározni a (11.8) mellékfeltétel figyelembevételével. Az elektronsűrűség meghatározására szolgáló variációs elv tehát a következőképpen alakul

$$\delta(E + V_0 Ne) = 0, \tag{29.11.9}$$

ahol V_0 a *Lagrange*-féle multiplikátor és a variáció ρ-ra vonatkozik. Figyelembe véve a következő relációt:

$$\delta \frac{1}{2} \int V e \rho dv = \int V e \delta \rho dv, \tag{29.11.10}$$

a variációs elvből a következő összefüggést nyerjük

$$\rho = \sigma_0 (V - V_0)^{3/2}, \tag{29.11.11}$$

ahol

$$V = V_k + V_e \tag{29.11.12}$$

az atom teljes elektrosztatikus potenciálja és σ_0 a következő univerzális állandó

$$\sigma_0 = \left(\frac{3e}{5\kappa_F} \right)^{3/2}. \tag{29.11.13}$$

Ha figyelembe vesszük, hogy V-re, ill. $V - V_0$-ra fennáll a *Poisson*-féle egyenlet

$$\Delta(V - V_0) = 4\pi e \rho, \tag{29.11.14}$$

akkor (11.11) segítségével a következő egyenletet nyerjük V számára

$$\Delta(V - V_0) = 4\pi \sigma_0 e (V - V_0)^{3/2}. \tag{29.11.15}$$

Ez az egyenlet a *Thomas–Fermi*-modell alapegyenlete vagy röviden a *Thomas–Fermi*-egyenlet.

Ki lehet mutatni, hogy a *Thomas–Fermi*-atom szélén $r = r_0$-nál a sűrűség, ρ, eltűnik. Innen (11.11)-ből adódik, hogy

$$V_0 = \frac{(Z - N)e}{r_0}. \tag{29.11.16}$$

Az atom statisztikus elméletében gömbszimmetrikus elektroneloszlást tételezünk fel, vagyis feltételezzük, hogy ρ csak a magtól való távolságtól, r-től függ. Ebben az esetben a következő változók bevezetésével

$$x = \frac{r}{\mu}, \tag{29.11.17}$$

$$\mu = \frac{1}{(4\pi\sigma_0)^{2/3} e Z^{1/3}} = \frac{1}{4} \left(\frac{9\pi^2}{2Z} \right)^{1/3} a_H = \frac{0{,}8853\, a_H}{Z^{1/3}} \tag{29.11.18}$$

és

$$\phi(x) = \frac{r}{Ze}(V - V_0), \tag{29.11.19}$$

a *Thomas–Fermi*-egyenlet a következő univerzális alakra hozható

$$\phi'' = \frac{\phi^{3/2}}{x^{1/2}}, \tag{29.11.20}$$

ahol ϕ'' a ϕ függvénynek x szerinti második deriváltját jelenti.

ϕ-re a következő határfeltételek állnak fenn. Mivel a potenciál a mag helyén átmegy a mag potenciáljába, Ze/r-be, (11.19)-ből következik, hogy

$$\phi(0) = 1. \tag{29.11.21}$$

Mivel az atom szélén a potenciálnak és az elektromos térerősségnek folytonosan kell átmennie, a következő két feltételnek kell teljesülnie

$$\phi(x_0) = 0 \quad \text{és} \quad x_0\phi'(x_0) = -\frac{Z-N}{Z}, \tag{29.11.22}$$

ahol

$$x_0 = \frac{r_0}{\mu}. \tag{29.11.23}$$

Ezekkel a határfeltételekkel a *Thomas–Fermi*-egyenletet analitikusan nem lehet megoldani; a megoldás csak numerikusan állítható elő.* Semleges atom, $N = Z$ esetén $x_0 = \infty$, tehát az elektronsűrűség csak a magtól végtelen távol tűnik el.

A *Thomas–Fermi*-modell keretében csak semleges atomok és pozitív ionok stabilisak, negatív ionok nem.

Az elektronsűrűség, ρ és a radiális elektronsűrűség, $D = 4\pi r^2\rho$ a következőképpen állíthatók elő

$$\rho = \frac{Z}{4\pi\mu^3}\left(\frac{\phi}{x}\right)^{3/2}, \tag{29.11.24}$$

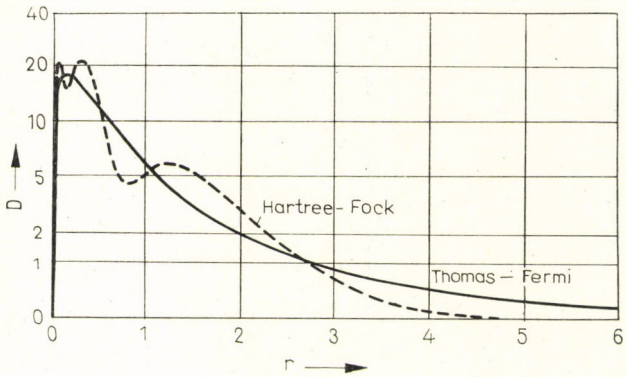
$$D = 4\pi r^2\rho = \frac{Z}{\mu}\phi^{3/2}x^{1/2}. \tag{29.11.25}$$

D mint r függvénye az Ar-atom esetére, összehasonlítva a *Hartree–Fock*-féle self-consistent field sűrűségeloszlásával, a 102. ábrán látható.

A THOMAS–FERMI által kidolgozott eredeti statisztikus atommodell több szempontból hiányos, ill. nem kielégítő. Így pl. az elektronsűrűség a mag helyén mint $1/r^{3/2}$ szinguláris, a magtól nagy távolságban pedig mint $1/r^6$ tűnik el. Mindez ellentétben van a hullámmechanikával, mely szerint az elektronsűrűség a mag helyén konstans és a magtól nagy távolságban exponenciálisan tűnik el. A mag helyén levő szingularitás annak a következménye, hogy a modell levezetésénél feltételeztük, hogy a dv térfogatelemekben a potenciál konstans. A magtól nagy távolságban való túl lassú eltűnés onnan adódik, hogy egyrészt az atom szélén

* A megoldásokra vonatkozóan utalunk a következő művekre GOMBÁS P.: Bevezetés az atom statisztikus elméletébe, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1955, továbbá GOMBÁS P.: Handbuch der Physik 36/2, 108 o. Springer Verlag, Berlin—Göttingen—Heidelberg, 1956.

egy térfogatelemben nincsen elég elektron ahhoz, hogy azokat statisztikusan tárgyaljuk, másrészt főképpen onnan, hogy a mag körüli elektronfelhőben az elektronok „elkent" állapotban vannak jelen, tehát az elektronfelhő potenciáljának számításánál az elektronoknak önmagukkal való elektrosztatikus kölcsönhatását, az ún. elektrosztatikus önkölcsönhatást is beleszámítottuk, ami jelentékeny hibát jelent az atom szélén.



102. ábra. A *Thomas—Fermi*-és a *Hartree—Fock*-sűrűségeloszlás Ar atom esetében

Ez utóbbi hibát FERMInek és AMALDInak sikerült közelítően korrigálnia. Sokkal komplikáltabb a korrekció a mag közvetlen közelében, amit a kinetikus energia ún. inhomogenitási korrekciója révén sikerült elérni, anélkül azonban, hogy ez a kérdés teljesen kielégítően le lenne zárva.

A korrekciók mellett az atom statisztikus elméletébe sikerült még az elektronok között további, az eredetiben elhanyagolt kölcsönhatásokat beépíteni, így az elektronok kicserélődési kölcsönhatását (DIRAC) és az elektronok korrelációs kölcsönhatását (GOMBÁS). Sikerült továbbá az atomoknak az elektronhéjstruktúráját is beépíteni a statisztikus atommodellbe (GOMBÁS—LADÁNYI); az ily módon bővített statisztikus atommodell jól megalapozható és a modellel nyert eredmények a *Hartree—Fock*-módszerrel nyert eredményekkel is nagyon jó egyezést adnak. A statisztikus modellt többen még igen magas hőmérsékletekre és nyomásokra és a relativisztikus esetre is kiterjesztették.

A statisztikus módszer egyszerűségénél és szemléletességénél fogva igen széles területen egyszerűen alkalmazható, atomokon kívül molekulákra, továbbá különösen szilárd testekre és magas nyomás alatt levő anyagra.

12. §. A pszeudopotenciálok módszere

Pszeudopotenciálok alatt potenciálszerű kifejezéseket értünk, melyek segítségével a részecskék kicserélődési kölcsönhatását, korrelációs kölcsönhatását, továbbá teljesen betöltött elektronállapotoknak a *Pauli*-elvből származó betöl-

tési tilalmát közelítően igen egyszerűen tudjuk helyettesíteni ill. leírni. Jóllehet a korrelációs potenciál kivételével ezek már régóta ismertek, csak az utolsó másfél két évtized alatt kezdték a pszeudopotenciálokat általánosabban használni, mégpedig főképpen a szilárd testek elméletében, úgyhogy ma már beszélhetünk a „pszeudopotenciálok módszeréről", amely eredményeit tekintve joggal sorakozik fel a többi ismert közelítő módszer mellé.

A kicserélődési potenciál. Többelektron-problémák esetében az elektronok kicserélődési kölcsönhatásának egzakt figyelembevétele, mint láttuk, igen komoly matematikai probléma. E tekintetben nyújt nagyfokú egyszerűsítést a kicserélődési potenciál, amelyet első ízben 1942-ben alkalmaztak atomok esetében a valenciaelektronok energianívóinak meghatározásánál (GOMBÁS).

A kicserélődési potenciált az atom statisztikus elméletéből lehet levezetni és az atom valenciaelektronjaira vonatkozóan, vagyis az atomban levő legmagasabb energiájú elektronokra vonatkozóan a következő alakú

$$V_{\mu} = \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} e\rho^{1/3}, \tag{29.12.1}$$

ahol ρ az ion elektronsűrűsége, amely a valenciaelektronok leválasztása után visszamarad.

A kicserélődési potenciálnak létezik ezenkívül egy másik alakja, amely az atomban az elektronok átlagos kicserélődési kölcsönhatását írja le és amely a fentitől csak egy numerikus faktorban különbözik. Hullámmechanikai elgondolásokból kiindulva szintén a statisztikus atommodell segítségével lehet megalapozni (SLATER); alakja a következő

$$V_{m} = \frac{3}{2}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/2} e\rho^{1/3}. \tag{29.12.2}$$

E potenciálok egyik legfontosabb szerepe abban áll, hogy segítségükkel a self-consistent field *Hartree–Fock*-féle egyenleteit lehet rendkívül leegyszerűsíteni (SLATER és munkatársai; GÁSPÁR és munkatársai).

A korrelációs potenciál. Korrelációnak nevezzük, mint már említettük azt, hogy az elektronok elektrosztatikus kölcsönhatásuk következtében nem mozognak egymástól függetlenül, hanem igyekeznek egymástól lehetőleg távol tartózkodni. Minthogy az elektronok kicserélődési kölcsönhatása révén ez a tendencia paralel spinű elektronok között amúgy is fennáll, a korreláció elsősorban az antiparalel spinű elektronok között válik nyilvánvalóvá. A korrelációs potenciál levezetése szintén az elektrongáz statisztikus elméletén alapszik. Az alapot a szabad elektrongáz korrelációs energiájának a statisztikus elmélet alapján levezetett kifejezése alkotja. Minthogy a korreláció matematikailag igen komplikált, érthető, hogy ennek helyettesítése egy ilyen egyszerű módon levezetett kifejezéssel csak igen durva közelítést adhat.

Amint a részletesebb eredmények mutatják a tapasztalattal való egyezés csak oly módon érhető el, hogy ha a korrelációs potenciál kifejezését a tapasztalati értékekhez illesztjük oly módon, hogy a korrelációs potenciálban szereplő állan-

dók közül egyet nem az elméletből, hanem egy atom empirikus értékéből határozunk meg. Az ily módon nyert kifejezés a periodikus rendszer többi atomjaira, melyekre vonatkozóan a korrelációs energia ismert, jó eredményeket szolgáltat.

A Pauli-féle betöltési tilalmat helyettesítő potenciál. A *Pauli*-féle betöltési tilalom elektronok esetében azt mondja ki, hogy egy teljesen betöltött elektronállapotba nem lehet még egy elektront elhelyezni. Érdekes módon ezt a betöltési tilalmat igen szemléletesen közelítőleg egy nem-klasszikus taszító erővel lehet helyettesíteni, mely egy potenciálból – melyet P-vel jelölünk – származtatható. Ez is egy pszeudopotenciál, melyet 1935-ben HELLMANN és GOMBÁS egymástól függetlenül vezettek le.

Hogy egy ilyen P nem klasszikus taszítópotenciál létezik, azt azonnal láthatjuk az atom statisztikus elméletének (11.2) alatti kifejezéséből. Ha egy atomban, melyben az összes elektronnívók teljesen be vannak töltve, az elektronok számát megváltoztatjuk pl. azáltal, hogy még egy elektront beviszünk az atom elektronjainak kötelékébe, akkor az elektronsűrűség, ρ is megváltozik és ρ helyett $\rho + \delta\rho$ lesz. A megváltozott kinetikus energia tehát elsőrendű tagokig bezárólag a következő alakú

$$E_k(\rho + \delta\rho) = \kappa_F \int \rho^{5/3} dv + \frac{5}{3} \kappa_F \int \rho^{2/3} \delta\rho dv \,. \qquad (29.12.3)$$

A jobboldalon álló első tag az eredeti kinetikus energia, a második pedig a kinetikus energia elsőrendű variációja. Amint látható, ebben a tagban a $-\frac{5}{3}\frac{\kappa_F}{e}\rho^{2/3}$ helytől függő kifejezés egy potenciál szerepét tölti be, mert a ρ elektronsűrűséggel szorozva és integrálva szolgáltatja a kinetikus energia megváltozását, amely az atom kötelékébe bevitt elektront, az atom többi elektronjai által betöltött energianívók fölé eső legmélyebb szabad energianívóba emeli. Ez szemléletesen azt jelenti, hogy a bevitt elektron, hasonlóan mint egy valenciaelektron, az atom külső perifériájában fog elhelyezkedni. Tehát erre a bevitt elektronra a többi atomelektron egy nem klasszikus taszítóerőt gyakorol, amely megakadályozza azt, hogy az az atom többi elektronja által teljesen betöltött elektronnívóiban foglaljon helyet.

A P pszeudopotenciál pl. valenciaelektronra alkalmazva megakadályozza azt, hogy a valenciaelektron az atom belső elektronjainak teljesen betöltött kvantumállapotaiba essen. Ez a hullámmechanikában azzal ekvivalens, hogy a valenciaelektron sajátfüggvényének az atom belső elektronjainak sajátfüggvényeire ortogonálisnak kell lennie.

Ha tehát pl. egy alapállapotban levő K-atom valenciaelektronjának, a 4*s*-elektronnak, energianívóját akarjuk a pszeudopotenciálok módszerével meghatározni, akkor a K^+-ion elektrosztatikus potenciáljához hozzávesszük a P pszeudopotenciált és meghatározzuk a $\Phi = V + P$ modifikált potenciáltérben a valenciaelektron legmélyebb állapotát anélkül, hogy e számításnál a K_+-ion elektronjaira tekintettel kellene lennünk, vagyis úgy járhatunk el, mintha ezek nem is volnának jelen.

Az atom statisztikus elmélete alapján több ilyen pszeudopotenciált sikerült levezetni (HELLMANN, GOMBÁS, SZONDY), melyek alakja különböző. Ez nincs ellentmondásban semmilyen fizikai tétellel vagy elvvel, mert hiszen ugyanazon energiasajátérték különböző potenciáltereknek lehet a sajátértéke.

A pszeudosajátfüggvényeknek az egzakt sajátfüggvényekkel való összehasonlítása helyett célszerűbb az elektronok tartózkodási valószínűségét, vagyis a sajátfüggvények négyzeteinek abszolút értékeit összehasonlítani. A radiális pszeudosajátfüggvények négyzeteinek abszolút értéke a megfelelő egzakt radiális sajátfüggvények abszolút értéke négyzetének legkülső maximumával általában jól egyezik. Az atom belsejében azonban az egzakt tartózkodási valószínűséget a radiális pszeudosajátfüggvény nem tudja követni, mert míg az egzakt radiális sajátfüggvénynek az ortogonalizálás miatt gyökei vannak, a radiális pszeudosajátfüggvény nem rendelkezik gyökökkel. A radiális pszeudosajátfüggvény abszolút értéke az atom belső részeiben tehát az egzaktnak csak a középértékét tudja adni. A pszeudosajátfüggvények tehát elsősorban olyan problémákra alkalmazhatók, melyekben az atom külső részei játszanak szerepet, ilyenek pl. a kémiai problémák.

A statisztikus pszeudopotenciálok mellett a hullámmechanika alapján is le lehetett vezetni pszeudopotenciálokat. Az első hullámmechanikai pszeudopotenciált is hazai szerzők vezették le először, mégpedig FÉNYES és SZÉPFALUSY: FÉNYESnek (1942) egy e tekintetben alapvető munkájából kiindulva, az első hullámmechanikai pszeudopotenciált SZÉPFALUSY (1955) állította elő.

A pszeudopotenciálokkal később 1959 után még sok más kutató is foglalkozott. Ki lehetett mutatni, hogy végtelen sok pszeudopotenciál létezik, ami már onnan is látható, hogy – amint fentebb is említettük – egy bizonyos sajátértéket végtelen sok potenciállal lehet előállítani.

A pszeudopotenciálokat igen széles körben alkalmazták világszerte, különösen szilárd testek esetében. Sajnos, hogy ezekben a munkákban a hazai szerzők és HELLMANN, akik e pszeudopotenciálok felismerése és levezetése terén úttörő munkát végeztek, csak igen elvétve lettek megemlítve.

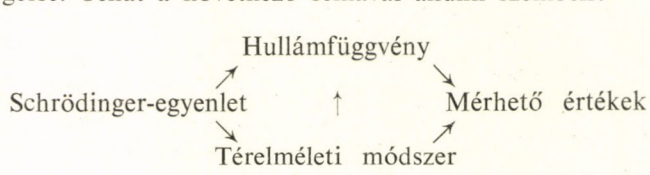
HARMINCADIK FEJEZET

TÉRELMÉLETI MÓDSZEREK ALKALMAZÁSA A KVANTUM-MECHANIKAI TÖBBTESTPROBLÉMÁBAN

1. §. Bevezetés

Az előző fejezetben ismertetett *Hartree–Fock*-módszert az atom és molekulafizika, a magfizika és a szilárdtestfizika számos problémájára sikerrel alkalmazták. A *Hartree–Fock*-módszeren túlmenő pontosságú variációs közelítéseket csak néhány viszonylag egyszerű rendszer, mint pl. a He atom, H_2 molekula, Li és Be atom, T^3, He^3 és He^4 magok esetében sikerült kidolgozni. Nagyobb részecskeszám esetén a $\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ sajátfüggvény meghatározásánál súlyos számítási nehézségek lépnek fel, melyek lassan elvi problémává válhatnak. Tekintsük pl. az U^{238} atommagot. Ha a nukleonok spinváltozójától egy pillanatra el is tekintünk, akkor is a független belső koordináták száma $3 \cdot 238 - 6 = 708$. Ha minden változónak csak 10 helyettesítési értéket adunk, akkor is a ψ hullámfüggvény megadásához 10^{708} adat kell. 1 g-nyi papirosra legfeljebb 10^4 adat nyomtatható ki, így tehát az U^{238} sajátfüggvénye egy 10^{701} kg-nyi könyvet tesz ki (A Naprendszer tömege 10^{30} kg, a Galaxisé 10^{41} kg). Az $N = 238$ db részecske még nem is olyan sok, ha tekintetbe vesszük, hogy a szilárdtestfizikában olyan rendszerekkel dolgozunk, ahol a részecskeszám a *Loschmid*-szám nagyságrendjébe esik! Nyilvánvaló, hogy a sok részecskét tartalmazó rendszerek leírására a $\psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ hullámfüggvény gyakorlatilag alkalmatlan.

A nagy szabadsági fokú rendszerek elméletében az első sikert a kvantumelektrodinamika kiépítése jelentette (1948–51). Az analóg módszer a többtestproblémában kb. tíz évvel később, 1955–59 közt született meg (BRUECKNER–BETHE–BLOCH–HUGENHOLTZ). E módszer nem tartalmaz sem többet, sem kevesebbet, mint a többtestproblémának az elemekből jól ismert *Schrödinger*-egyenlete. Tehát a térelméleti módszer nem jelenti a kvantummechanikának olyan értelmű továbbfejlesztését, mint pl. a relativitáselmélet a newtoni mechanikának, de ugyanakkor a térelméleti módszer nem jelent valamilyen közelítő eljárást sem. Maradéktalan végrehajtása esetén a térelméleti módszer a *Schrödinger*-egyenlet egzakt megoldásait szolgáltatja. A módszer lényege, hogy a hullámfüggvény megkerülésével közvetlenül az egyszerűen mérhető fizikai mennyiségek meghatározását teszi lehetővé. Lényeges a *megkerülés* szó: a hullámfüggvény nem vált értelmetlenné, csak feleslegessé. Tehát a következő sémával állunk szemben:



A térelméleti módszerrel még akár a hullámfüggvény is meghatározható, de a tapasztalattal összevethető adatok kiszámításához nincs reá szükség.

Szólnunk kell a térelméleti módszer alkalmazhatóságának feltételeiről is. A módszer levezetése során két hipotézissel fogunk élni. Az első a perturbációs sorfejtés konvergenciája, mely alatt a következőt kell értenünk: legyen $f(x)$ egy analitikus függvény, melyet *Taylor*-sora előállít:

$$f(x + \lambda y) = a_0 + a_1\lambda + a_2\lambda^2 + \ldots, \quad \text{ahol} \quad a_n = a_n(x, y). \tag{30.1.1}$$

Fel fogjuk tételezni, hogy a következő operátor-egyenlőség is fennáll:

$$f(H_0 + \lambda V) = A_0 + A_1\lambda + A_2\lambda^2 + \ldots, \quad \text{ahol} \quad A_n = A_n(H_0, V). \tag{30.1.2}$$

E sor konvergenciája problematikussá akkor válhat, ha a $V(x_1, x_2)$ két részecske kölcsönhatásának szingularitásai vannak. Sajnos a legérdekesebb esetekben, nevezetesen a *Coulomb*-kölcsönhatás, a magerők és a molekuláris erők esetében mindig szinguláris kölcsönhatással van dolgunk. Ez természetesen nem jelenti feltétlenül azt, hogy ezeknél a térelméleti módszer nem alkalmazható, csak arról van szó, hogy az eljárás nem biztos, hogy konvergál. Kívánatos lenne, hogy szükséges és elegendő kritériumokat találjunk arra vonatkozólag, hogy $V(x_1, x_2)$ milyen szingularitásai mellett szabad még a térelméleti módszert alkalmazni. Az erre vonatkozó eredmények rendkívül szegényesek. Valószínűnek látszik, hogy a taszító jellegű szingularitás (és az érdekes esetekben mindig ezekkel találkozunk) nem jelent olyan nagy bajt, mint a vonzó szingularitás.

A másik hipotézis, mellyel élni fogunk, az, hogy az ideális rendszer H_0 és a reális rendszer $H = H_0 + V$ energiaoperátorának alapállapota egymásra nem ortogonális: $\langle\phi_0 | \psi_0\rangle \neq 0$. Az ilyen rendszereket normál rendszereknek nevezzük. Nem normál rendszerek a szupravezető és a ferromágneses anyagok. A térelméleti módszert Bogoljubov és Gorkov kiterjesztették ilyen nem normál rendszerekre is, de ennek ismertetése már nem fér bele könyvünk keretébe. Több évvel ezelőtt felmerült annak lehetősége, hogy az atommagok egy része szintén szupravezető rendszernek tekinthető (A. Bohr). Egyes vizsgálatok (Emery és Sessler) pedig azt mutatták, hogy ugyanez áll a végtelen maganyagra is. A legutóbbi években azonban több érv merült fel e magmodell ellen, és lehetséges, hogy az atommagokat is a normál rendszerek közé kell sorolnunk.

A térelméleti módszer keretein belül több közelítő eljárást is kidolgoztak, sőt – ezt meg kell jegyezni – konkrét számításokat csak ilyen közelítő eljárások felhasználásával végeztek. Néhány ilyen eljárást, pl. a *Bethe–Goldstone*, a *Brueckner*- és a *Hugenholtz*-módszert, ismertetni fogunk. Ezek a modern közelítő eljárások, az aktuális problémák vizsgálata szempontjából messze felette állnak a kvantummechanika elemi közelítő módszereinek (perturbációs-, variációs- és *Hartree–Fock*-módszer), mégis, ezek a közelítő eljárások képezik az elmélet kevésbé időtálló részét. Például Bethe egy 1965-ben megjelent munkájában olyan, a háromrészecske korrelációkat is magába foglaló módszert közölt, mely

a *Brueckner*-módszert, mely csak a kétrészecske korrelációkat veszi számításba, bizonyos mértékben elavulttá teszi. Talán felesleges hangsúlyozni, hogy az ilyen fejlődés a térelméleti módszer hatékonyságát bizonyítja.

2. §. A Green-függvényes eljárás

Írjuk fel a többtestprobléma *Schrödinger*-egyenletét:

$$H\,|\psi_\alpha> = (H_0 + V)\,|\psi_\alpha> = W_\alpha\,|\psi_\alpha>,$$

ahol H_0 az „ideális" (vagyis kölcsönhatás nélküli) rendszer *Hamilton*-operátora, V pedig a rendszer teljes kölcsönhatási energiája. Célunk a W_α energiasajátértékek meghatározása a $|\psi_\alpha>$ sajátfüggvények explicit felírása nélkül. Az ideális rendszer *Schrödinger*-egyenletének,

$$H_0\,|\alpha> = E_\alpha\,|\alpha>$$

-nak E_α sajátértékeit és $|\alpha>$ sajátfüggvényeit természetesen ismertnek tételezzük fel. (l. huszonkilencedik fejezet 7.§).

A kitűzött célt szolgálja a *Green*-függvényes eljárás. Az eljárás azon a *Landau*-féle hipotézisen alapszik, mely szerint a V kölcsönhatás fokozatos kikapcsolása esetén a rendszer átmegy az ideális rendszerbe, vagyis $V \to 0$ esetén $W_\alpha \to E_\alpha$ és $|\psi_\alpha> \to |\alpha>$.

Két, egymással könnyen kapcsolatba hozható *Green*-függvényt vezetünk be: az időtől és az energiától függőt. Az $U(t)$ *időtől függő Green-függvény*, (más néven a *dinamikai operátor*) definíciója:

$$U(t) = e^{iH_0t}e^{-iHt}, \tag{30.2.1}$$

ha a 2π-vel osztott *Planck*-állandót egységnek választjuk. t lehet komplex is. A kitevők a H_0 és H felnemcserélhetősége miatt természetesen nem vonhatók össze.

Képezzük $U(t)$ mátrixelemét az ideális rendszer két sajátállapota között:

$$<\alpha\,|\,U(t)\,|\,\beta> = <\alpha\,|\,e^{iH_0t}e^{-iHt}\,|\,\beta> = e^{iE_\alpha t}<\alpha\,|\,e^{-iHt}\,|\,\beta>,$$

minthogy $<\alpha|$ sajátállapota H_0-nak. Ha felhasználjuk a H sajátállapotrendszerének teljességét kifejező

$$\sum_\gamma |\psi_\gamma><\psi_\gamma| = 1 \tag{30.2.2}$$

összefüggést s tekintetbe vesszük, hogy $|\psi_\gamma>$ a H sajátállapota, a

$$<\alpha\,|\,U(t)\,|\,\beta> = e^{iE_\alpha t}\sum_\gamma <\alpha\,|\,\psi_\gamma><\psi_\gamma\,|\,\beta>\,e^{-iW_\gamma t} \tag{30.2.3}$$

formulára jutunk. (2.3) szerint az $U(t)$ mátrixelemének *Fourier*-frekvenciáiból azonnal leolvashatjuk H sajátértékeit azokban az állapotokban, amelyekben az $<\alpha\,|\psi_\gamma><\psi_\gamma\,|\,\beta>$ amplitúdó nem zérus. Az $|\alpha>$ és $|\beta>$ állapotok jó megválasztásával kell arról gondoskodni, hogy a bennünket érdeklő tartományban minden sajátértéket megkapjunk.

A $G(z)$ *energiától függő Green-függvény* (*Green-operátor*) definíció szerint

$$G(z) = (z - H)^{-1}, \tag{30.2.4}$$

ahol z lehet komplex. Ennek az ideáilis rendszer állapotaival az előbbiekhez hasonlóan képzett mátrixeleme

$$< \alpha \mid G(z) \mid \beta > = \sum_{\gamma} < \alpha \mid \psi_\gamma > < \psi_\gamma \mid \beta > (z - W_\gamma)^{-1}. \tag{30.2.5}$$

Tehát a *Green*-operátor mátrixelemének pólushelyei megadják H sajátértékeit azokban az állapotokban, amelyek sem $\mid \alpha >$-ra, sem $\mid \beta >$-ra nem ortogonálisak.

A *dinamikai és Green-operátor kapcsolata* egyszerűen megadható:

$$U(t) = (2\pi i)^{-1} \oint e^{i(H_0 - z)t} G(z) dz, \tag{30.2.6}$$

az integrálás a valós tengelyt az óramutató járásával ellenkező irányban körüljáró, minden pólust tartalmazó görbére terjesztendő ki. A (2.6) reláció megfordítása:

$$G(z) = -i \int_0^{\pm\infty} e^{i(z - H_0)t} U(t) dt \tag{30.2.7}$$

(+ jel használandó, ha $Im(z) > 0$, − jel, ha $Im(z) < 0$).

Az operátoregyenlőségek igazolása H bármelyik sajátfüggvényére (s ezért bármelyik *Hilbert*-térbeli függvényre) igaz

$$(2\pi i)^{-1} \oint e^{-izt} (z - W_\gamma)^{-1} dz = e^{-iW_\gamma t}$$

és

$$-i \int_0^{\infty\pm} e^{izt} e^{-iW_\gamma t} dt = (z - W_\gamma)^{-1}$$

integrálformulák helyességének belátására redukálódik.

$U(t)$ és $G(z)$ perturbációs sora. Az operátorok sorrendjére ügyelve, differenciáljuk formálisan $U(t)$-t az idő szerint és vezessük be a

$$V(t) = e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t} \tag{30.2.8}$$

jelölést:

$$U'(t) = iH_0 U - iUH = -ie^{iH_0 t}(-H_0 + H)e^{-iHt} = -ie^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t} e^{iH_0 t} e^{iHt} =$$

$$= -iV(t)U(t). \tag{30.2.9}$$

(2.9)-t idő szerint integrálva, tekintetbe véve, hogy $U(0) = 1$, $U(t)$-re az

$$U(t) = 1 - i \int_0^t V(t_1) U(t_1) dt_1 \tag{30.2.10}$$

integrálegyenlet adódik. Ezt a perturbáció számításból ismert iterációs eljárással megoldva, $U(t)$ következő sorfejtett alakjára jutunk:

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty} U_n(t),$$

$$U_n(t) = (-i)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \ldots \int_0^{t_{n-1}} dt_n V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n). \tag{30.2.11}$$

Alapfeltevésünk szerint a sor konvergens.

Alakítsuk át $G(z)$ definiáló kifejezését a következőképpen:

$$G(z) = \frac{1}{z-H} = \frac{1}{z-H_0}(z-H_0)\frac{1}{z-H} = \frac{1}{z-H_0}(z-H+V)\frac{1}{z-H} =$$

$$= \frac{1}{z-H_0} + \frac{1}{z-H_0} VG(z). \tag{30.2.12}$$

(2.12) algebrai egyenletet a $G_0(z) = z - H_0$ nulladik közelítésből kiindulva iterációval megoldhatjuk és $G(z)$-re a következő, feltételezésünk szerint konvergens sort nyerjük

$$G(z) = \sum_{n=0}^{\infty} G_n(z),$$

ahol

$$G_n(z) = \frac{1}{z-H_0} V \frac{1}{z-H_0} \ldots V \frac{1}{z-H_0}. \tag{30.2.13}$$

$G_n(z)$-ben V n-szer fordul elő. Bizonyítható a következő érdekes és a továbbiak szempontjából fontos tétel: $U_n(t)$ és $G_n(z)$ között is fennállnak a (2.6) és (2.7) kapcsolatok.

További célunk $U(t)$ és $G(z)$ mátrixelemeinek meghatározása a (2.11) és (2.13) sorok kiszámítása útján. Eléréséhez a második kvantálási formalizmust és a térelméletben kifejlesztett gráftechnikát fogjuk alkalmazni.

3. §. Gráftechnika

Jelölje az ideális rendszer H_0 energiájának valamilyen függvényeit

$$D_0(H_0), \quad D_1(H_0), \ldots, \quad D_n(H_0),$$

melyeket a továbbiakban propagátoroknak fogunk nevezni. Vizsgálni fogjuk a következő operátort

$$J_n = D_0 V D_1 \ldots D_{n-1} V D_n. \tag{30.3.1}$$

E kifejezést n-edrendű kifejezésnek nevezzük, mert a kölcsönhatási operátor n-szer szerepel benne. Speciális propagátor választás esetén az előző fejezetben már megismert kifejezésekhez juthatunk. Például az $U(t)$ *Green*-függvény sorfejtésében

szereplő n-edik integrandus a következő alakban írható fel:

$$V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n) = e^{iH_0t_1}Ve^{-iH_0(t_1-t_2)}Ve^{-iH_0(t_2-t_3)}\ldots Ve^{-iH_0t_n}, \quad (30.3.2)$$

itt tehát a D_r propagátor

$$D_r = e^{-iH_0(t_r-t_{r+1})}. \quad (30.3.3)$$

Ugyanilyen alakú a G *Green*-függvény sorfejtésében is az n-edik tag,

$$G_n(z) = (z - H_0)^{-1}V(z - H_0)^{-1}\ldots V(z - H_0)^{-1}. \quad (30.3.4)$$

Most valamennyi propagátor egyaránt

$$D_r = (z - H_0)^{-1}. \quad (30.3.5)$$

Vagyis mind az U, mind a G sorfejtésben szereplő tagok speciális formái a (3.1)-ben definiált kifejezéseknek. A gráf-módszerrel tetszés szerinti propagátorok esetén ki tudjuk számítani J mátrixelemeit. A következő kifejezések érdekelnek bennünket: az ideális rendszer valamilyen $|\alpha>$ vég- és $|\beta>$ kezdő-állapota között akarjuk kiszámítani a J operátor mátrixelemeit. Ilyen típusú mátrixelemek kiszámításából sokat nyerhetünk, mert ebből a kölcsönható rendszer energiasajátértékeit tudjuk leolvasni, mint ahogy azt az U és G operátorok esetében már korábban megbeszéltük. Például ha J helyébe a G *Green*-függvényt írjuk, akkor annak pólusai éppen a $H = H_0 + V$, tehát a kölcsönhatást is tartalmazó *Hamilton*-operátor sajátértékeit fogják szolgáltatni, ha azt a z változó függvényében ábrázoljuk.

A továbbiakban a betöltési szám-reprezentációt fogjuk használni: Ekkor a H_0 operátort (29.7.22), a V kölcsönhatást pedig (29.7.23) adja meg. Bevezetjük a részecske és a lyuk fogalmát a következő definícióval: Részecske alatt egy olyan betöltött $\phi_k(x)$ egyrészecske állapotot értünk, mely a *Fermi*-tenger felett van, azaz $\varepsilon_k > \varepsilon_F$, ahol ε_F a *Fermi*-tenger felszínéhez tartozó energia. Lyuk alatt pedig egy olyan be nem töltött $\phi_m(x)$ egyrészecske állapotot értünk, mely a *Fermi*-tengerben van, azaz $\varepsilon_m < \varepsilon_F$. Részecskét az a_k^+ operátor kelt és az a_k operátor tüntet el, míg lyukat az a_m operátor kelt és az a_m^+ operátor tüntet el. A k index a továbbiakban mindig részecskét, az m mindig lyukat jelöl. Ha nem teszünk különbséget köztük, akkor más indexet (pl. p) használunk. Pl. az

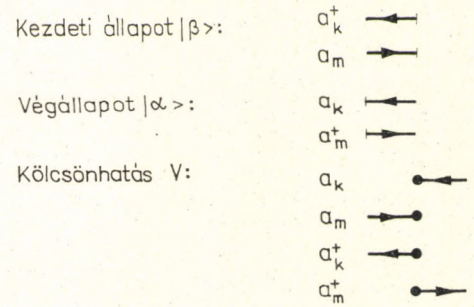
$$\frac{1}{4}(pq \mid V \mid rs)a_p^+a_q^+a_sa_r$$

operátor $p = k_1$, $q = k_2$, $r = k_3$ és $s = k_4$ esetén részecske-részecske kölcsönhatást ír le, $p = m_1$, $q = m_2$, $r = m_3$ és $s = m_4$ esetben lyuk-lyuk kölcsönhatás, $p = k_1$, $q = k_2$, $r = k_3$, $s = m_4$ esetén részecske-lyuk párkeltés történik, stb.

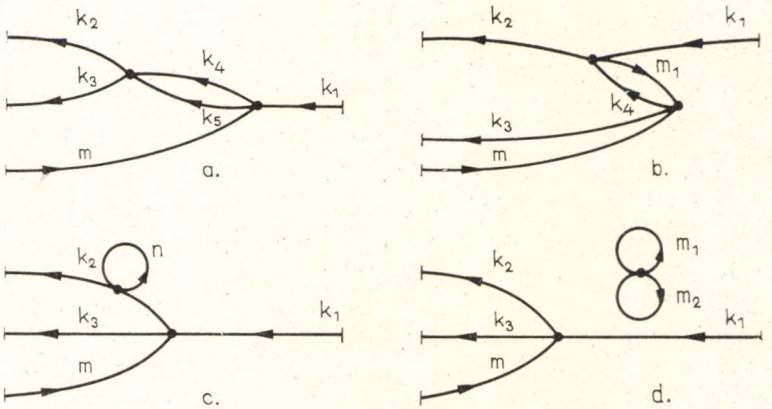
Tekintsünk egy egyszerű példát. Legyen a $|\beta>$ kezdeti állapotban mindössze egyetlen részecske a k_1 kvantumállapotban. A megfelelő állapotfüggvény $a_{k_1}^+|\Phi_0>$, mert az ideális rendszer $|\Phi_0>$ alapállapotához képest egyetlen k_1 állapotú részecskét gerjesztettünk az $a_{k_1}^+$ operátor segítségével. A végállapot

tartalmazzon két részecskét a k_2 és k_3 kvantumállapotban és még egy lyukat is az m állapotban. A végállapot állapotfüggvényének mindjárt az adjungáltját írjuk fel, ez $< \Phi_0 \mid a_m^+ a_{k_3} a_{k_2}$. Végül a számpéldánkban az n legyen 2, azaz másodrendű gráfon akarjuk módszerünket bemutatni. Így tehát a J alakja most

$$J_2 = D_0(H_0) V D_1(H_0) V D_2(H_0). \tag{30.3.6}$$



103. ábra. A keltő és eltüntető operátorokat reprezentáló gráfelemek



104. ábra. Példák a másodrendű gráfokra

Írjuk fel az $< \alpha \mid J_2 \mid \beta >$ mátrixelem konkrét kifejezését:

$$< \alpha \mid J_2 \mid \beta > = \frac{1}{16} \sum_{\substack{p_1 p_2 \\ p_3 p_4}} \sum_{\substack{q_1 q_2 \\ q_3 q_4}} (p_1 p_2 \mid V \mid p_3 p_4)(q_1 q_2 \mid V \mid q_3 q_4) \times$$

$$\times < \Phi_0 \mid a_m^+ a_{k_3} a_{k_2} D_0 a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p_4} a_{p_3} D_1 a_{q_1}^+ a_{q_2}^+ a_{q_4} a_{q_3} D_2 a_{k_1}^+ \mid \Phi_0 > . \tag{30.3.7}$$

E kifejezésben felhasználtuk a V kölcsönhatási operátor (29.7.23) alatt megismert alakját. Az érdekes rész természetesen az a operátorokat tartalmazó. Az egyes a operátorok változtatásokat hajtanak végre az alapállapoton, az $a_{k_1}^+$ pl. egy k_1

állapotú részecskéhez tartozó állapotba, majd az a_{q_3} egy q_3 állapotú részecskét (vagy lyukat) eltüntető állapotba, és így tovább végül is jobbról bal felé haladva eljutunk ismét az alapállapothoz, $|\Phi_0>$-hoz. Nyilvánvaló, hogy a mátrixelem kifejezése zérus lesz, ha végül is az a operátorok alkalmazása után nem az alapállapothoz jutottunk vissza, hiszen a kölcsönhatás nélküli állapotok egymásra ortogonálisak. Alapállapothoz azonban csak úgy juthatunk, hogyha közben minden részecske- vagy lyuk-*keltő* operátornak megfelelő (ugyanazon állapothoz tartozó) *eltüntető* operátor is fellépett az a operátorok sorában, mégpedig balról jobbra haladva eltüntető-keltő sorrendben. A (3.7) összegnek nyilván csak azon tagjai maradnak meg, amelyekben csupa olyan a operátorok találhatók, melyek egymás hatását kölcsönösen lerontják, tehát ha az a operátornak egy olyan párosítása áll elő, melynél minden p (vagy q) állapothoz tartozó keltő operátornak megfelel egy eltüntető operátor is. A lehetséges kombinációk száma természetesen igen nagy. Egy-egy lehetséges (zérustól különböző járulékú) kombinációt egy ún. gráffal tudunk szemléltetni. Segítségükkel a (3.7) összegnek zérustól különböző tagjait bizonyos rajzolási szabályok mechanikus alkalmazásával könnyen fel tudjuk írni.

A gráfok rajzolásának szabályai a következők. Egy kezdeti $|\beta>$ állapotban a részecske-keltő a_k^+ operátornak egy $\leftarrow\!\!\!|$ irányítású, egy lyuk-keltő a_m operátornak $\rightarrow\!\!\!|$ irányítású vonal felel meg. Egy $<\alpha|$ végállapotban az a_k eltüntető operátort $|\!\leftarrow$, az a_m^+ operátort a $|\!\rightarrow$ vonalszakasz fogja jellemezni. Minden V kölcsönhatást egy ponttal ábrázolunk (•), az időbeli egymásutániságot jobbról balfelé való haladási iránnyal szemléltetjük. A kölcsönhatást jelentő pontba jobbról befutó irányok (•←) részecske eltüntető (a_k), balról befutóak (→•) lyuk-keltő (a_m), balra kifutóak (←•) részecske keltő (a_k^+), jobbra kifutóak (•→) lyuk eltüntető (a_m^+) operátorokat szemléltetnek. Összefoglalva, az egyes operátoroknak a 103. ábra szerinti rajzbeli elemek felelnek meg.

Lényeges szerkesztési szabály még, hogy az összepárosított a^+, a operátoroknak megfelelő vonalak össze vannak kötve. A 104. ábrán néhány példát mutatunk másodrendű gráfokra. A kezdeti állapot mindegyik esetben egy egyrészecske állapot, míg a végállapot két részecskét és egy lyukat tartalmaz.

Mielőtt tovább mennénk, bevezetünk néhány fontos definíciót:

1. Belső vonalnak nevezzük azt a vonalat, mely két pontot köt össze.

2. Ekvivalens vonalpárnak nevezünk két olyan vonalat, amelyek ugyanazon két pontot kötik össze és egyforma irányításúak. (Pl. a 104.a ábrán a k_4, k_5 vonalak.)

3. Külső vonalnak nevezzük azt, amely kezdeti vagy végállapothoz csatlakozik.

4. Passzív kölcsönhatást jelent egy vonalra rárajzolt hurok:  A (29.7.23) kölcsönhatás természete folytán a hurok csak lyukvonal lehet.

5. Összefüggő gráf, mely „egy darabból" van (104.a, b és c ábrák) Jele: C.

6. Szétesö gráf, mely két vagy több összefüggő gráfból tevődik össze (104.d ábra).

7. Alapállapot gráf az a gráf, ill. komponens, melynek nincs külső vonala. (Pl. 104.d egyik komponense.) Jele: G.

8. Kapocs-gráf, melynek nincsen alapállapot komponense. (Pl. 104.a, b, c.) Jele: L.

Gráfok járulékainak kiszámítását először a 104.a ábrához tartozó példán szemléltetjük. Másodrendű gráfról lévén szó, a J_n operátor alakja a következő

$$J_2 = D_0(H_0)VD_1(H_0)D_2(H_0). \tag{30.3.8}$$

Feladatunk felírni a J_2 operátor $< \alpha \mid J_2 \mid \beta >$ mátrixelemének a 104.a gráftól származó járulékát.

Mint már megbeszéltük, a kezdeti állapot egy k_1 állapotbeli részecskét, a végállapot k_2, k_3 állapotbeli részecskéket és egy m állapotbeli lyukat tartalmaz. A (3.7) képletben jobbról balra haladva, a $\mid \Phi_0 >$ alapállapotból az $a^+_{k_1}$ operátorral képezhetünk olyan állapotot, mely a felvett, k_1 részecskét tartalmazó kezdeti állapotnak megfelel. Nyilvánvaló azonban, hogy továbbhaladva jobbról balfelé az a_q, ill. a_p operátorok között kell lenni olyannak, amely ezt a k_1 részecskés állapotot „visszacsinálja" alapállapottá, ellenkező esetben a baloldali $< \Phi_0 \mid$ állapotfüggvényhez érkezve a skaláris szorzat eltűnne. Más szóval az a_p ill. a_q operátorok között kell lenni egy olyannak, amely a k részecskét eltünteti. Tegyük fel, hogy ez az a_{q_4} operátor lesz, így akkor ez azt jelenti, hogy a q_4 összegző indexnek csupán a $q_4 = k_1$ értékéhez tartozik az összegnek el nem tűnő tagja. Teljesen hasonlóan a végállapotbeli k_3, k_4 részecske állapotokat létrehozó (balra ható) a_{k_3}, a_{k_2} operátorokhoz is kell, hogy tartozzék egy-egy a^+_p vagy a^+_q (balra ható) eltüntető operátor. Ugyanez vonatkozik a végállapotbeli m lyukra, és természetesen minden közbülső keltő operátorhoz kell, hogy tartozzék egy megfelelő, azaz ugyanolyan állapotból eltüntető operátor és viszont. Válasszuk most példánkban a következő „szereposztást"

$$\begin{aligned} p_1 &= k_2, \\ p_2 &= k_3, \\ p_3 &= q_1 = k_4, \\ p_4 &= q_2 = k_2, \\ q_3 &= m, \\ q_4 &= k_1. \end{aligned} \tag{30.3.9}$$

Ez a szereposztás éppen a 104.a ábra gráfjának felel meg. Ettől eltérő másik szereposztás tartozik a 104.b, c és d gráfokhoz is. Úgy tekinthetjük, hogy egy-egy szereposztást vagy más szóval az a operátorok egy-egy lehetséges párosítását szemléltetik gráfjaink. Meg kell jegyeznünk, hogy a $D(H_0)$ operátorok minden nehézség nélkül alkalmazhatók a $\mid \Phi_0 >$ alapállapotra, ill. az ebből egy vagy több részecskét- vagy lyukat tartalmazó gerjesztett állapotra, hiszen ezen állapotok is sajátállapotai még a kölcsönhatást nem tartalmazó H_0 operátornak, méghozzá egy k részecske (ill. m lyuk) esetén $E_0 + \varepsilon(k)$ (ill. $E_0 - \varepsilon(m)$) sajátenergiával. A (3.7)-beli 8-szoros összegzés is egyszerűsödik, hiszen pl. a q_4 index esetében mindössze

egy esetben, a $q_4 = k_1$ esetben van zérustól különböző tagja az összegnek. Világos, hogy a (3.9) váiasztás esetén csupán kettős szumma fog végül is megmaradni. Ezek után már felírható a 104.a gráf járuléka az $< \alpha \mid J_2 \mid \beta >$ mátrixelem értékéhez:

$$< \alpha \mid J_2 \mid \beta >_a = \frac{1}{16} \sum_{k_4 k_5} (k_2 k_3 \mid V \mid k_4 k_5)\,(k_4 k_5 \mid V \mid m k_1) < \Phi_0 \mid a_m^+ a_{k_3} a_{k_2} \times$$

$$\times D_0(H_0) a_{k_2}^+ a_{k_3}^+ a_{k_5} a_{k_4} D_1(H_0) a_{k_4}^+ a_{k_5}^+ a_{k_1} a_m D_2(H_0) a_{k_1}^+ \mid \Phi_0 > =$$

$$= \frac{1}{16} \sum_{k_4 k_5} (k_2 k_3 \mid V \mid k_4 k_5)\,(k_4 k_5 \mid V \mid m k_1) D_0[E_0 + \varepsilon(k_2) + \varepsilon(k_3) -$$

$$- \varepsilon(m)] D_1[E_0 + \varepsilon(k_4) + \varepsilon(k_5) - \varepsilon(m)] D_2[E_0 + \varepsilon(k_1)] < \Phi_0 \mid a_m^+ \times$$

$$\times a_{k_3} a_{k_2} a_{k_2}^+ a_{k_3}^+ a_{k_5} a_{k_4} a_{k_4}^+ a_{k_5}^+ a_{k_1} a_m a_{k_1}^+ \mid \Phi_0 > . \qquad (30.3.10)$$

$< \Phi_0 \mid \ldots \mid \Phi_0 >$ értéke nyilvánvalóan $+1$ vagy -1 annak megfelelően, hogy az egymásnak megfelelő keltő és eltüntető operátorok egymás mellé hozatalakor hányszor kellett ezen operátorokra vonatkozó (29.6.28) felcserélési törvényt alkalmazni. Példánkban ez az érték -1.

Abban az esetben, ha egy V kölcsönhatáshoz tartozó a^+ vagy a operátorok szerepét felcseréljük, nyilvánvalóan az eredetivel teljesen azonos gráfot kapunk, mely ugyanazt a járulékot szolgáltatja a J operátor mátrixeleméhez. A továbbiakban egy gráffal együtt az összes vele ekvivalens gráf járulékát is figyelembe akarjuk venni, ami azt jelenti, hogy kölcsönhatásonként még fel fog lépni egy 4-es faktor. Ha a gráfunk n-edrendű, ez 4^n faktort jelent, amely éppen kiejti a kölcsönhatásonként (29.7.23) miatt adódó 4^{-n} faktort, példánkban az 1/16-ot. Ha azonban gráfunk ekvivalens belső vonalpárokat is tartalmaz, mint példánkban k_4 és k_5, akkor az ezek által összekötött szomszédos kölcsönhatásokban ugyanazon állapotokhoz tartozó a^+ (ill. a) operátorok is fellépnek, ezért előző 4^{-n}-es szabályunkkal ezeket kétszeresen vettük számításba. E hiba kiküszöbölendő, be kell írnunk még egy 2^{-p} faktort, ahol p a gráfban levő ekvivalens vonalpárok száma. Példánkban így az 1/2 tényező fog fellépni. A 104.a gráf teljes járuléka ezekután, beleszámítva az ekvivalensek járulékait is,

$$< m k_3 k_2 \mid J_2 \mid k_1 >_a = \frac{1}{2} \sum_{k_4 k_5} D_0[E_0 + \varepsilon(k_2) + \varepsilon(k_3) - \varepsilon(m)]\,(k_2 k_3 \mid V \mid k_4 k_5) \times$$

$$\times D_1[E_0 + \varepsilon(k_4) + \varepsilon(k_5) - \varepsilon(m)]\,(k_4 k_5 \mid V \mid k_1 m)\, D_2[E_0 + \varepsilon(k_1)]. \qquad (30.3.11)$$

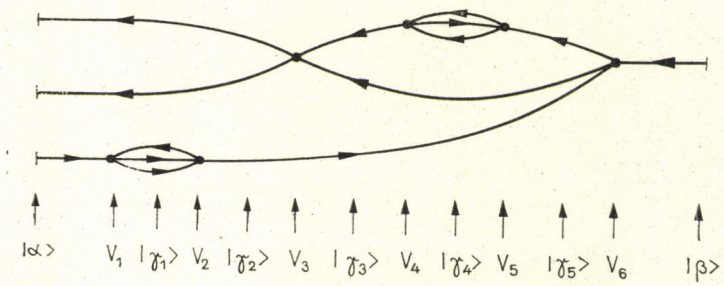
A gráfjárulékok kiszámításának általános szabálya e példából levonható és a 105. ábrán szemléltetjük.

Jelölje a felrajzolt gráfot Γ és a valamennyi vele ekvivalens gráf eredő járulékát $< \alpha \mid J_n \mid \beta >_\Gamma$. E járulék értéke

$$< \alpha \mid J_n \mid \beta >_\Gamma = (\pm) 2^{-p} \sum_{\substack{\text{belső} \\ \text{vonalak}}} D_0(E_\alpha)(p_1 q_1 \mid V \mid r_1 s_1)\, D_1(E_{\gamma_1})(p_2 q_2 \mid V \mid r_2 s_2)\, D_2(E_{\gamma_2}) \ldots$$

$$\ldots (p_{n-1} q_{n-1} \mid V \mid r_{n-1} s_{n-1})\, D_{n-1}(E_{\gamma_{n-1}})(p_n q_n \mid V \mid r_n s_n)\, D_n(E_\beta). \qquad (30.3.12)$$

Mindenekelőtt a ± 1 tényezőt az előző példában is fellépő $< \Phi_0 | \ldots | \Phi_0 >$ szorzat kiszámításával kell megállapítani. Az előjel értéke az egymásnak megfelelő a, a^+ operátorok egymás mellé hozatalakor szükséges cserék számától, más szóval a részecske-keltések és eltüntetések időbeli sorrendjétől függ. A 2^{-p} tényezővel vettük figyelembe az összes, Γ-val ekvivalens gráf járulékát, így a Σ csak a belső vonalakra veendő. Balról jobbfelé haladva először az $| \alpha >$ végállapottal találkozunk és így először leírjuk a $D_0(H_0)$ propagátornak megfelelő tagot a $D_0(E_\alpha)$-t, ahol E_α az $| \alpha >$ állapothoz tartozó energiát jelenti. Tovább haladva jobbfelé következik a V_1 kölcsönhatás. Legyenek p_1 és q_1 a V_1 kölcsönhatást reprezentáló



105. ábra. A gráfjárulék kiszámításának általános szabálya

pontból kifutó vonalak, r_1, s_1 pedig a pontba befutó vonalak, akkor a kölcsönhatásnak megfelelő $(p_1 q_1 | V | r_1 s_1)$ mátrixelem lesz a Σ következő tényezője. Következik a $| \gamma_1 >$ közbülső állapot, melynek energiája E_{γ_1}. Ábránkon ez az állapot három részecskevonalat és két lyukvonalat tartalmaz, így az E_{γ_1} energiára érvényes: $E_{\gamma_1} = E_0 + \varepsilon(s_1) + \varepsilon(s_2) + \varepsilon(r_2) - \varepsilon(p_1) - \varepsilon(q_1)$. Ezen állapottól származik a $D_1(E_{\gamma_1})$ tényező. Következik a V_2 kölcsönhatás. Ismét megkeresendők a kölcsönhatástól elfutó vonalak, legyenek ezek p_2, q_2 (ábránkon az egyik, mondjuk p_2 ugyanaz, mint az s_1), majd a befutó vonalak legyenek r_2, s_2 (ábránkon ezek egyenlők most p_1, q_1-gyel) és leírjuk az ezen kölcsönhatáshoz tartozó $(p_2 q_2 | V | r_2 s_2)$ mátrixelemet. Következik a $| \gamma_2 >$ közbülső állapothoz tartozó $D_2(E_{\gamma_2})$ tényező, most e $| \gamma_2 >$ állapot két részecskét és egy lyukat tartalmaz. Az eljárást e szabályoknak megfelelően folytatjuk, míg eljutunk a $| \beta >$ kezdeti állapothoz, melynek megfelelő tényező $D_n(E_\beta)$.

Jelen gráftechnika sajnos csak komplikált eljárást tudna nyújtani a járulék előjelének megállapítására. Ugyancsak nehézkes áttekinteni, hogy adott kölcsönhatások valamint kezdeti és végállapot esetén hogyan lehet felrajzolni az összes elképzelhető gráfot. Más típusú gráfrajzolási szabályokkal e kérdések eldöntése könnyebb lehet, kétségtelen azonban, hogy a jelen technika segítségével legkönnyebb az adott gráf járulékának felírása, továbbá az ekvivalens gráfok járulékainak kiszámítására vonatkozó igen egyszerű szabály miatt ezeket külön felrajzolni nem is szükséges.

A gráftechnika nemcsak eljárást ad mátrixelemek kiszámítására, hanem egyben sematikus képet is nyújt az anyag belsejében lejátszódó folyamatokról.

Mielőtt továbbmennénk a gráfokra vonatkozó további tételek megtárgyalására, néhány fontos megjegyzést teszünk.

a) Nulladrendűnek nevezzük – korábbi definíciónkkal összhangban – a kölcsönhatást nem tartalmazó gráfokat. Ekkor a J_0 operátor csak a $D_0(H_0)$ propagátort tartalmazza

$$J_0 \equiv D_0(H_0)\,. \tag{30.3.13}$$

Nyilvánvaló, hogy nulladrendű gráf járuléka egyszerűen

$$< \alpha \mid J_0 \mid \beta > = D_0(E_\beta) < \alpha \mid \beta > \tag{30.3.14}$$

és az állapotok ortogonalitása miatt ez a járulék csak akkor nem tűnik el, ha a kezdeti és végállapot megegyezik. Világos továbbá, hogy nulladrendű gráf csak szétesők lehet.

b) A mátrixelemek kiszámításának egész általános szabályaiból következik, hogy ha

$$J = \Sigma\, J_n, \tag{30.3.15}$$

akkor bármely Γ gráf járulékára igaz

$$< \alpha \mid J \mid \beta >_\Gamma = \sum_n < \beta \mid J_n \mid \alpha >. \tag{30.3.16}$$

c) Az $U(t)$ dinamikai és a $G(z)$ *Green*-operátorok közötti (1.6) és (1.7) összefüggés ezen operátorok minden Γ gráfra vonatkozó járuléka között is fennáll.

d) A *Pauli*-elv értelmében a közbülső állapotok nem tartalmazhatnak két azonos kvantumállapotú részecskét (ill. lyukat). Így pl. a 104.a ábra gráfja esetén a k_4, k_5 állapotokra való összegezést csak a $k_4 \neq k_5$ esetekre kellene kiterjeszteni. A $k_4 = k_5$ esetben azonban $(k_2 k_3 \mid V \mid k_4 k_5) = (k_4 k_5 \mid V \mid k_1 m) = 0$, egyszerűen a mátrixelemek antiszimmetricitása miatt, így a $k_4 = k_5$ eset megengedése a szumma tagjai között nem okoz hibát. Egészen általánosan WICK bizonyította be, hogy a közbenső állapotokban a *Pauli*-elv semmibevevéséből származó hibák egzaktul kiküszöbölik egymást.

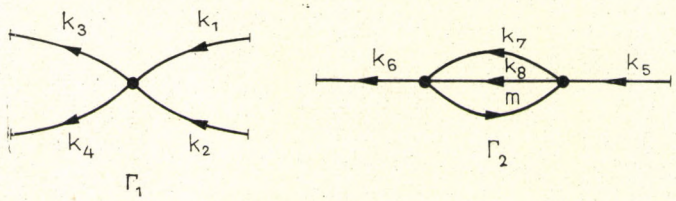
4. §. A szétesők gráfok

Legyen Γ_1 és Γ_2 két tetszés szerinti gráf (akár külső vonalakkal, akár anélkül) és egyesítsük őket egyetlen (szétesők) gráffá. Nyilvánvaló, hogy az egyesítés többféleképpen valósítható meg és az egyes megvalósítások eredőjének járuléka más és más lehet. Jelen fejezetben eljárást adunk arra nézve, hogyan lehet az összes elképzelhető egyesítések eredő járulékát meghatározni abban az esetben, *ha az $U(t)$ dinamikai operátor mátrixelemeit akariuk kiszámítani.* Az eljárást csak egy példán mutatjuk be, a tétel általános bizonyításával nem foglalkozunk.

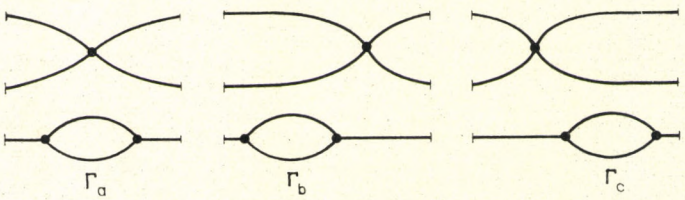
Legyen Γ_1 és Γ_2 a 106. ábrán szemléltetett két gráf.

E két összefüggő gráf háromféle módon egyesíthető széteső gráffá. (107. ábra)

Az egyes Γ_a, Γ_b, Γ_c gráfok csak a kölcsönhatások időbeli sorrendjében különböznek egymástól, de járulékaik az $U(t)$ dinamikai operátor mátrixelemeihez más és más értékek lesznek. Az előző pontban megismert szabályok segítségével az egyes járulékok felírása nem jelent nehézséget. Emlékeztetünk arra, hogy (2.11)



106. ábra. A Γ_1 és a Γ_2 gráf



107. A Γ_1 és Γ_2 gráfokból felépíthető széteső gráfok

szerint az $U(t)$ operátor perturbációs sorfejtés után az $U_n(t)$ operátorok összege képp így írható fel:

$$<\alpha \mid U(t) \mid \beta> = \sum_{n=0}^{\infty} U_n(t),$$

$$U_n(t) = (-i)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \ldots \int_0^{t_{n-1}} dt_n <\alpha \mid J_n \mid \beta> \qquad (30.4.1)$$

és a J_n operátorban szereplő D_r propagátorokra érvényes

$$D_r = e^{-iH_0(t_r - t_{r+1})}. \qquad (30.4.2)$$

Jelen példánkban a Γ_1 gráf első, a Γ_2 másod, az összetett Γ_a, Γ_b, Γ_c gráfok harmadrendű gráfok, így rendre $n = 1, 2, 3$. Nyilvánvaló, hogy a teljes $< \alpha \mid U(t) \mid \beta >$ mátrixelemet valamennyi rendű és azon belül is az összes lehetséges fajtájú gráfra való összegzés révén kapnánk meg. Mi most ennek a teljes összegnek csak a Γ_1, Γ_2 valamint a Γ_a, Γ_b, Γ_c gráfoktól származó járulékát fogjuk felírni.

A Γ_1 esetében

$$J_1 = e^{iH_0 t_1} V e^{-iH_0 t_1}, \qquad (30.4.3)$$

így az $U_{\Gamma_1}(t)$ járulék

$$U_{\Gamma_1}(t) \equiv <k_3k_4 \mid U(t) \mid k_2k_1>_{\Gamma_1} = -i(k_3k_4 \mid V \mid k_2k_1) \int_0^t e^{i(E_{\alpha_1} - E_{\beta_1})t} dt \,. \tag{30.4.4}$$

Itt α_1 és β_1 jelöli röviden a Γ_1 gráfhoz tartozó vég-, ill. kezdeti állapotokat, melyeknek energiája példánkban

$$\begin{aligned} E_{\alpha_1} &= E_0 + \varepsilon(k_3) + \varepsilon(k_4)\,, \\ E_{\beta_1} &= E_0 + \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2). \end{aligned} \tag{30.4.5}$$

Az integrál elemi úton kiszámítható, de a későbbiekre való tekintettel meghagyjuk implicit formában.

A Γ_2 másodrendű gráf járuléka teljesen hasonló okoskodással és jelölésekkel

$$U_{\Gamma_2}(t) \equiv <k_6 \mid U(t) \mid k_5>_{\Gamma_2} = -\frac{1}{2} \sum_{k_7 k_8 m} (k_6 m \mid V \mid k_7 k_8)(k_7 k_8 \mid V \mid k_5 m) \times$$

$$\times \int_0^t dt_1 e^{i(E_{\alpha_2} - E_\gamma)t_1} \int_0^{t_1} dt_2 e^{i(E_\gamma - E_{\beta_2})t_2} \,. \tag{30.4.6}$$

A megfelelő energiák

$$\begin{aligned} E_{\alpha_2} &= E_0 + \varepsilon(k_6), \\ E_{\beta_2} &= E_0 + \varepsilon(k_5), \\ E_\gamma &= E_0 + \varepsilon(k_7) + \varepsilon(k_8) - \varepsilon(m). \end{aligned} \tag{30.4.7}$$

Ezekkel a jelölésekkel már felírható a Γ_a, Γ_b, Γ_c gráfok járuléka is.

$$U_{\Gamma_a}(t) \equiv <k_6k_4k_3 \mid U(t) \mid k_1k_2k_5>_{\Gamma_a} = -\frac{i}{2} \sum_{k_7 k_8 m} (k_6 m \mid V \mid k_7 k_8)\,(k_4 k_3 \mid V \mid k_1 k_2) \times$$

$$\times (k_7 k_8 \mid V \mid k_5 m) \int_0^t dt_1 e^{i(E_{\alpha_2} - E_\gamma)t_1} \int_0^{t_1} dt_2 e^{i(E_{\alpha_1} - E_{\beta_1})t_2} \int_0^{t_2} dt_3 e^{i(E_\gamma - E_{\beta_2})t_3} \,, \tag{30.4.8}$$

$$U_{\Gamma_b}(t) \equiv <k_6k_4k_3 \mid U(t) \mid k_1k_2k_5>_{\Gamma_b} = -\frac{i}{2} \sum_{k_7 k_8 m} (k_6 m \mid V \mid k_7 k_8)(k_7 k_8 \mid V \mid k_5 m) \times$$

$$\times (k_4 k_3 \mid V \mid k_1 k_2) \int_0^t dt_1 e^{i(E_{\alpha_2} - E_\gamma)t_1} \int_0^{t_1} dt_2 e^{i(E_\gamma - E_{\beta_2})t_2} \int_0^{t_2} dt_3 e^{i(E_{\alpha_1} - E_{\beta_1})t_3} \,, \tag{30.4.9}$$

$$U_{\Gamma_c}(t) \equiv <k_6k_4k_3 \mid U(t) \mid k_1k_2k_5>_{\Gamma_c} = -\frac{i}{2} \sum_{k_7 k_8 m} (k_4 k_3 \mid V \mid k_1 k_2)(k_6 m \mid V \mid k_7 k_8) \times$$

$$\times (k_7 k_8 \mid V \mid k_5 m) \int_0^t dt_1 e^{i(E_{\alpha_1} - E_{\beta_1})t_1} \int_0^{t_1} dt_2 e^{i(E_{\alpha_2} - E_\gamma)t_2} \int_0^{t_2} dt_3 e^{i(E_\gamma - E_{\beta_2})t_3} \,. \tag{30.4.10}$$

Egyszerű számolással igazolható, hogy az U_{Γ_a}, U_{Γ_b}, U_{Γ_c} járulékok összege éppen az U_{Γ_1} és U_{Γ_2} járulékok szorzatával egyenlő:

$$U_{\Gamma_a} + U_{\Gamma_b} + U_{\Gamma_c} = U_{\Gamma_1} U_{\Gamma_2}. \tag{30.4.11}$$

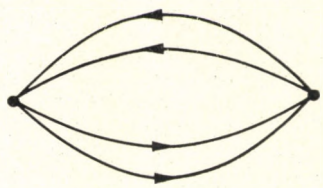
Jelen példa azt az általános szabályt sugallja, hogy ha $\Gamma_1, \Gamma_2, \ldots, \Gamma_A$ összefüggő gráfokból megkonstruáljuk az ezek egyesítéseképp előálló összes lehetséges szétesö gráfokat, akkor ennek eredő járulékát a $\Gamma_1, \Gamma_2, \ldots, \Gamma_A$ gráfok járulékainak szorzata adja. Képletben:

$$<\alpha_A \ldots \alpha_2\alpha_1 \mid U(t) \mid \beta_1\beta_2 \ldots \beta_A>_\Gamma = <\alpha_1 \mid U(t) \mid \beta_1>_{\Gamma_1} <\alpha_2 \mid U(t) \mid \beta_2>_{\Gamma_2} \ldots$$
$$\ldots <\alpha_A \mid U(t) \mid \beta_A>_{\Gamma_A}, \tag{30.4.12}$$

ahol a baloldalon a Γ index most nem egy gráf, hanem a $\Gamma_1, \Gamma_2, \ldots, \Gamma_A$ gráfok valamennyi, egymáshoz képest különféleképpen eltolt egyesítéséből származó eredőjárulék értékét jelöli. Szimbolikusan írhatjuk:

$$\Gamma = \Gamma_1 \otimes \Gamma_2 \otimes \ldots \otimes \Gamma_A. \tag{30.4.13}$$

A képlet nem érvényes azonban, ha Γ-ban egyforma alapállapot komponensek is előfordulnak. Nézzük pl. a $\Gamma = \Gamma_0 \otimes \Gamma_0$ alapállapot-gráfot, ahol Γ_0 másodrendű alapállapot gráf két részecske és két lyukállapottal (108. ábra).



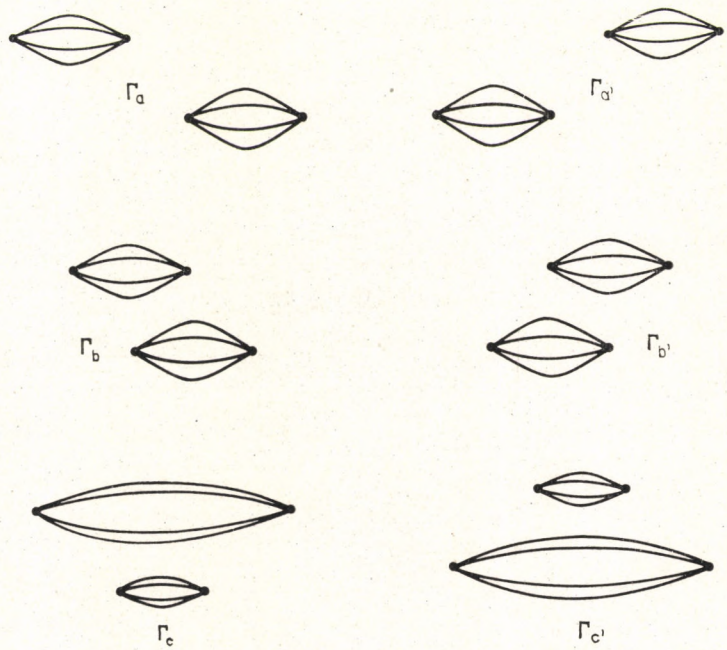
108. ábra. A Γ_0 másodrendű alapállapot-gráf

A két Γ_0 egymáshoz képesti helyzetéből a 109. ábrán bemutatott lehetőségek adódnak.

Ha a $\Gamma = \Gamma_0 \otimes \Gamma_0$ járulékot a (4.12) szabály alapján vennénk számításba, akkor mind a 6 felrajzolt lehetőséget figyelembe vennénk. Nyilvánvaló azonban, hogy a Γ_a és $\Gamma_{a'}$; Γ_b és $\Gamma_{b'}$; valamint a Γ_c és $\Gamma_{c'}$ nem jelentenek külön gráfokat, hiszen rajzolásmódunkban a függőleges eltolásnak semmi szerepe nincs, ezáltal nem kapunk új típusú, eddig még figyelembe nem vett járulékokat. Szabályunk tehát a $\Gamma_a, \Gamma_b, \Gamma_c$ járulékait – fölöslegesen – kétszer veszi számításba. Ugyanígy belátható, hogy a $\Gamma = \Gamma_0 \otimes \Gamma_0 \otimes \Gamma_0$ járulékot a (4.12) képlet $6 = 3!$-szor veszi számításba. Ezért szabályunkat véglegesen a következő formában fogalmazhatjuk meg:

Legyenek $\Gamma_{L_1}, \Gamma_{L_2}, \ldots, \Gamma_{L_A}$ kapocsgráfok, és $\Gamma_{G_1}, \Gamma_{G_2}, \ldots, \Gamma_{G_B}$ egymástól különböző alapállapotgráfok. Legyen továbbá

$$\Gamma = \Gamma_{L_1} \otimes \Gamma_{L_2} \otimes \ldots \otimes \Gamma_{L_A} \otimes (\Gamma_{G_1})^{N_1} \otimes \ldots \otimes (\Gamma_{G_B})^{N_B},$$



109. ábra. Két Γ_0 gráfból felépíthető szétesö gráfok

akkor

$$<\alpha_{L_A}\ldots\alpha_{L_2}\alpha_{L_1}\,|\,U(t)\,|\,\beta_{L_1}\beta_{L_2}\ldots\beta_{L_A}>_{\Gamma} = <\alpha_{L_1}\,|\,U\,|\,\beta_{L_1}>_{\Gamma_{L_1}} <\alpha_{L_2}\,|\,U\,|\,\beta_{L_2}>_{\Gamma_{L_2}}\ldots$$
$$\ldots <\alpha_{L_A}\,|\,U\,|\,\beta_{L_A}> \frac{(<\Phi_0\,|\,U\,|\,\Phi_0>_{\Gamma_{G_1}})^{N_1}}{N_1!}\ldots\frac{(<\Phi_0\,|\,U\,|\,\Phi_0>_{\Gamma_{GB}})^{N_B}}{N_B!}. \tag{30.4.14}$$

Ez a tétel *Bloch*-szabály néven ismeretes.

5. §. Az alapállapot-gráfok és a linked-cluster formula

Nyilvánvaló, hogy minden G alapállapot-gráf felépíthető összefüggő alapállapot komponensekből:

$$G = (C_1)^{N_1}\otimes(C_2)^{N_2}\otimes\ldots\otimes(C_i)^{N_i}, \tag{30.5.1}$$

ahol C_i egy összefüggő alapállapot-gráf. Az összes lehetséges alapállapot-gráf járulékainak eredője a *Bloch*-szabály szerint

$$<\Phi_0\,|\,U(t)\,|\,\Phi_0> = \sum_{N_1=0}^{\infty}\ldots\sum_{N_i=0}^{\infty}\ldots\frac{(<\Phi_0\,|\,U\,|\,\Phi_0>_{C_1})^{N_1}}{N_1!}\ldots$$
$$\ldots\frac{(<\Phi_0\,|\,U\,|\,\Phi_0>_{Ci})^{N_i}}{N_i!}\ldots \tag{30.5.2}$$

Ha a C_i-k az összes lehetséges összefüggő alapállapot-gráfot jelölik, és ezek előfordulásainak száma, az N_i-k az összes lehetséges egész számon végigfutnak, akkor (5.2) nyilván a teljes alapállapot-járulékot szolgáltatja. Az N_i-re való összegzések azonban épp az exponenciális függvényre vezetnek, így

$$<\Phi_0 \mid U(t) \mid \Phi_0> = e^{<\Phi_0|U|\Phi_0>_{C_1}} e^{<\Phi_0|U|\Phi_0>_{C_2}} e^{<\Phi_0|U|\Phi_0>_{C_3}} \ldots$$

$$<\Phi_0 \mid U(t) \mid \Phi_0> = e^{<\Phi_0|U(t)|\Phi_0>_c}. \tag{30.5.3}$$

A képlet *exponenciális formula* néven ismeretes az irodalomban. A kitevőben a $< >_c$ jelölés az összes lehetséges C_i összefüggő gráfok járulékainak egyszerű összegét jelenti.

Természetesen minden nem alapállapot gráf egy kapocsgráf és egy alapállapot gráf komponensből tehető össze: $\Gamma = L \otimes G$. A *Bloch*-szabály szerint tehát

$$< \alpha \mid U(t) \mid \beta > = < \alpha \mid U(t) \mid \beta >_L < \Phi_0 \mid U(t) \mid \Phi_0 >, \tag{30.5.4}$$

ahol a $< >_L$ az összes lehetséges kapocsgráf járulékainak eredőjét jelenti. (Ez most nem egyszerű összeg!) Felhasználva az exponenciális formulát a második tényező helyett, végeredményben

$$<\alpha \mid U(t) \mid \beta> = <\alpha \mid U(t) \mid \beta>_L e^{<\Phi_0|U(t)|\Phi_0>_c}. \tag{30.5.5}$$

Ez a formula az ún. „*linked-cluster*" formula.

6. §. Az alapállapot energiája és sajátfüggvénye

Az eddigiek alapján lehetőségünk nyílik arra, hogy meghatározzuk egy kölcsönhatásban álló rendszer alapállapotának energiáját. Az eljárás *Bloch*tól származik, és azon az ötleten alapul, hogy az $U(t)$ dinamikai operátorra vonatkozó (2.1) összefüggésben a t paraméter akármilyen komplex szám lehet. Legyen $t = -i\beta$ (β valós és pozitív) és, mivel az alapállapotbeli energiát keressük, a kezdeti és végállapot az alapállapot, azaz $\mid \alpha > = \mid \beta > = \mid \Phi_0 >$. A (2.3) képletünkből ekkor

$$< \Phi_0 \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 > = e^{\beta E_0} \sum_\nu \mid < \Phi_0 \mid \psi_\gamma > \mid^2 e^{-\beta W_\gamma}. \tag{30.6.1}$$

A $\beta \to \infty$ határesetben a $\sum_\gamma$ összeg domináló tagja az lesz, melyben a W_γ a legkisebb, tehát amelyben W_γ épp a kölcsönható rendszer W_0 alapállapotával egyenlő. Így aszimptotikusan (ha $\beta \to \infty$) írható

$$< \Phi_0 \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 > \approx \mid < \Phi_0 \mid \psi_0 > \mid^2 e^{-\beta(W_0 - E_0)}. \tag{30.6.2}$$

Ugyanezt az aszimptotikus kifejezést másképp is ki tudjuk számítani. Definiáljuk az $R(z)$ reakcióoperátort:

$$R(z) = V + VG(z)V, \tag{30.6.3}$$

ahol $G(z)$ a (2.4)-ben definiált *Green*-operátor. Egyszerű algebrával következik, hogy

$$G(z) = \frac{1}{z - H_0} + \frac{1}{z - H_0} R(z) \frac{1}{z - H_0}. \tag{30.6.4}$$

Ez felhasználható arra, hogy (6.3)-at hatványsorba fejtsük

$$R(z) = V + V \frac{1}{z - H_0} V + V \frac{1}{z - H_0} V \frac{1}{z - H_0} V + \ldots \tag{30.6.5}$$

Az $U(t)$ és $G(z)$ operátorok közötti összefüggést felhasználva az összefüggő alapállapot-gráfok járulékainak összegére is írható:

$$< \Phi_0 \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 >_C = \frac{1}{2\pi i} \oint_K e^{\beta(E_0 - z)} < \Phi_0 \mid G(z) \mid \Phi_0 >_C dz. \tag{30.6.6}$$

Ha ide beírjuk $G(z)$-nek (6.4)-ben felírt alakját, látható, hogy az első, $(z - H_0)^{-1}$ tag nem ad járulékot egyszerűen azért, mert nulladrendű alapállapot-gráf nincsen. Így írható

$$< \Phi_0 \mid G(z) \mid \Phi_0 >_C = (z - E_0)^{-2} R_C(z), \tag{30.6.7}$$

ahol

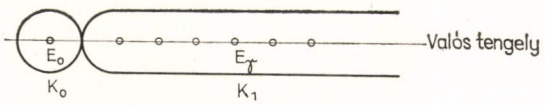
$$R_C(z) = < \Phi_0 \mid R(z) \mid \Phi_0 >_C, \tag{30.6.8}$$

azaz $R_C(z)$ az $R(z)$ reakcióoperátornak az összes lehetséges összefüggő alapállapot-gráf járulékának összegéből származó várható értéke.

Az $R_C(z)$ függvénynek szingularitása van – a (6.5) sorfejtésből láthatóan – a H_0 operátor minden E_γ sajátértékénél. Kivétel az E_0 alapállapot, mivel a $\mid \Phi_0 >$ állapot, mint közbenső $\mid \alpha >$ állapot, összefüggő gráfok esetén nem fordul elő és a $(z - E_0)^{-1}$ faktor csak e helyen lenne szinguláris. $R(z)$ tehát analitikus függvénye z-nek az E_0 hely környezetében. A (6.6)-beli K integrációs kontúrt válasszuk a 110. ábra szerint két részre.

A (6.6) integrálban a K_1 úttól származó járulék elhanyagolhatóan kicsiny lesz K_0-éhoz képest, ha $\beta \to \infty$, mivel minden $E_\gamma > E_0$, így ez a tag marad a határátmenet végrehajtásakor a vezető tag. Így a $\beta \to +\infty$ határesetben

$$< \Phi_0 \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 >_C \approx \frac{1}{2\pi i} \oint_{K_0} e^{\beta(E_0 - z)} R_C(z) \frac{1}{(z - E_0)^2} dz = R'_C(E_0) - \beta R_C(E_0), \tag{30.6.9}$$



110. ábra. A (6.6) integráció K kontúrjának felbontása K_0- és K_1-re

ahol $R'_C(z)$ az $R_C(z)$ függvény argumentuma szerint vett differenciálhányadosa. Felhasználva az (5.3) exponenciális formulát

$$< \Phi_0 \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 > \approx e^{R'_C(E_0)} e^{-\beta R_C(E_0)}. \tag{30.6.10}$$

Összehasonlítva ezt előző (6.2) képletünkkel

$$W_0 = E_0 + R_C(E_0) = E_0 + < \Phi_0 \mid V + V \frac{1}{E_0 - H_0} V + \ldots \mid \Phi_0 >_C ,$$

$$N_0 \equiv | < \Phi_0 \mid \psi_0 > |^2 = e^{R'_C(E_0)}. \tag{30.6.11}$$

Ez az *I. Goldstone formula.* Segítségével a kölcsönható rendszer W_0 alapállapotbeli energiája kifejezhető az $R(z)$ reakció-operátor segítségével. Az N_0 szám úgy értelmezhető, mint annak valószínűsége, hogy a reális rendszert olyannak találjuk, mintha nem lenne benne kölcsönhatás. Levezetésünkben lényegesen felhasználtuk, hogy $N_0 \neq 0$ (egyébként a $\beta \to +\infty$ határátmeneteknél nem ezek lennének a vezető tagok), így eredményünk csak az ilyen, ún. normál rendszerekre vonatkozik.

Számítsuk ki a H_0 operátor $| \alpha >$ sajátállapotaira, mint bázisrendszerre, $| \psi_0 >$ vetületét. (2.3) szerint

$$< \alpha \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 > = e^{\beta E_\alpha} \sum_\gamma < \alpha \mid \psi_\gamma > < \psi_\gamma \mid \Phi_0 > e^{-\beta W_\gamma}.$$

Az előző pragrafusban kifejtett érvek alapján $\beta \to \infty$ esetre

$$< \alpha \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 > \approx < \alpha \mid \psi_0 > < \psi_0 \mid \Phi_0 > e^{-\beta(W_0 - E_\alpha)}.$$

Másrészt a linked-cluster formula szerint

$$< \alpha \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 > = < \alpha \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 >_L e^{< \Phi_0 \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 >_C}.$$

A második tényezőt az exponenciális formulával írjuk át és alkalmazzuk a (6.2) aszimptotikus alakot

$$e^{< \Phi_0 \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 >_C} = < \Phi_0 \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 > \approx | < \Phi_0 \mid \psi_0 > |^2 e^{-\beta(W_0 - E_0)}.$$

Az $< \alpha \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 >$-ra nyert két aszimptotikus kifejezés összevetésével a kapocsgráfok járulékára

$$< \alpha \mid U(-i\beta) \mid \Phi_0 >_L \approx \frac{< \alpha \mid \psi_0 >}{< \Phi_0 \mid \psi_0 >} e^{\beta(E_\alpha - E_0)} \tag{30.6.12}$$

adódik. Ugyanazt a járulékot kiszámíthatjuk az $R(z)$ reakcióoperátor segítségével is. Az $U_n(t)$ és $G_n(z)$ között fennálló (2.6) összefüggésben az előző paragrafus megfontolásai szerint, $\beta \to \infty$ esetében az integrált elegendő a K_0 úton végrehajtani. Ha a

$$G(z) = \frac{1}{z - H_0} + \frac{1}{z - H_0} R(z) \frac{1}{z - H_0}$$

alakot helyettesítjük s tekintetbe vesszük, hogy minden $< \alpha \mid D_0 \mid \Phi_0 >$ típusú

kifejezés $|\alpha> \neq |\Phi_0>$-ra eltűnik, továbbá, hogy az

$$<\alpha|G(z)|\Phi_0>_L = (z-E_0)^{-1}(z-E_\alpha)^{-1}<\alpha|R(z)|\Phi_0>_L \equiv$$
$$\equiv (z-E_0)^{-1}(z-E_\alpha)^{-1}R_L(z)$$

relációval definiált $R_L(z)$ függvény $z = E_0$ környezetében analitikus (mivel $|\Phi_0>$ nem lehet közbenső állapot egy kapocsgráfban), az integrálra

$$<\alpha|U(-i\beta)|\Phi_0>_L \approx (E_0-E_\alpha)^{-1}R_L(E_0)e^{\beta(E_\alpha-E_0)} \qquad (30.6.13)$$

kifejezést nyerjük. (6.12) és (6.13) összevetve szolgáltatja a *II. Goldstone-formulát*

$$<\alpha|\psi_0> = -N_0^{1/2}\frac{<\alpha|R(E_0)|\Phi_0>_L}{E_\alpha - E_0} =$$
$$= N_0^{1/2}\frac{<\alpha|V+V(E_0-H_0)^{-1}V+\ldots|\Phi_0>_L}{E_0-E_\alpha}. \qquad (30.6.14)$$

7. §. Kvázirészecske gerjesztések

Legyen most a kezdeti és végállapot egyaránt a *Fermi*-tenger felett egy részecskét tartalmazó állapot: $|\alpha> = |\beta> = |k>$.

$$<k|U(-i\beta)|k> = e^{\beta E_k}\sum_\gamma |<k|\psi_\gamma>|^2 e^{-\beta W_\gamma},$$

ahol

$$E_k = E_0 + \varepsilon(k).$$

A II. *Goldstone*-formula szerint $<k|\psi_0> = 0$, mivel olyan kapocsgráf, amelynek baloldalán egyetlen részecske van, jobboldalán pedig semmi, nem létezik. Így $\beta \to \infty$ esetén Σ_γ-ban a domináns tag az a legkisebb energiájú állapot lesz, amelyre már $<k|\psi_\gamma> \neq 0$. Jelöljük ezt $|\psi_k>$-val, a hozzá tartozó energiát W_k-val

$$W_k = W_0 + \bar{\varepsilon}(k),$$

itt W_0 a reális rendszer alapállapoti energiája, $\bar{\varepsilon}(k)$ a *kvázirészecske-energia*. Az összegnek csak a domináns tagját tartva meg

$$<k|U(-i\beta)|k> \approx |<k|\psi_k>|^2 e^{-\beta(W_0-E_0)}e^{-\beta[\bar{\varepsilon}(k)-\varepsilon(k)]}$$
$$\equiv N_k e^{-\beta(W_0-E_0)}e^{-\beta[\bar{\varepsilon}(k)-\varepsilon(k)]}.$$

Az előzőekhez hasonló módon a linked-cluster formulát, valamint (6.2)-t felhasználva

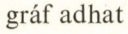
$$<k|U(-i\beta)|k>_L \approx \frac{N_k}{N_0}e^{-\beta[\bar{\varepsilon}(k)-\varepsilon(k)]}. \qquad (30.7.1)$$

Másrészt a kapocsgráfok járulékaira fennáll a

$$<k|U(-i\beta)|k>_L = (2\pi i)^{-1}\oint_K e^{\beta[E_0+\varepsilon(k)-z]}<k|G(z)|k>_L dz \qquad (30.7.2)$$

összefüggés.

Vizsgáljuk meg milyen típusú gráfok fordulhatnak elő $|\alpha> = |\beta> = |k>$ esetén. (111. ábra).

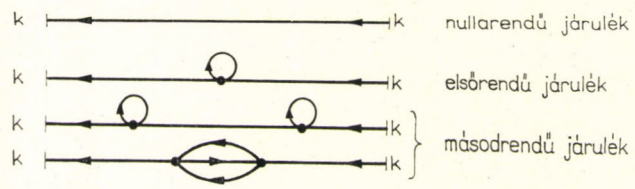
Közbenső állapotként $|k>$ előfordulhat. Teljesen általánosan a 112. ábrán látható típusú gráf adhat járulékot. Itt  tetszés szerinti olyan betétrész, amelyben a $|k>$ közbenső állapotként *nem* fordul elő. Neve: irreducibilis betétrész.

A (7.2)-ben szereplő $<k|G(z)|k>_L$-hez a fenti típusú gráfok járuléka (tekintetbe véve a $G(z)$ és $R(z)$ között fennálló (6.4) relációt):

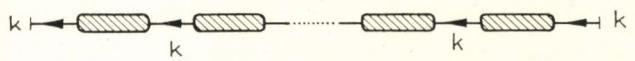
$$<k|G(z)|k>_L = \frac{1}{z - E_0 - \varepsilon(k)} + \frac{1}{[z - E_0 - \varepsilon(k)]^2} <k|R(z)|k>_{iC} +$$

$$+ \frac{1}{[z - E_0 - \varepsilon(k)]^3} <k|R(z)|k>_{iC}^2 + \ldots + \frac{1}{[z - E_0 - \varepsilon(k)]^n} <k|R(z)|k>_{iC}^{n-1} +$$

$$+ \ldots$$



111. ábra. (7.2)-höz járulékot adó nullad- első- és másodrendű gráfok



112. ábra. (7.2)-höz járulékot adó gráf általános szerkezete

Itt az *iC* index irreducibilis összefüggő gráfokra való összegezést jelent. Vezessük be az $<k|R(z)|k>_{iC} = R_k(z)$ rövidítést. Ezzel a fenti mértani sor összegére

$$<k|G(z)|k>_L = \frac{1}{z - E_0 - \varepsilon(k) - R_k(z)} \tag{30.7.3}$$

adódik. Szingularitás a $z = x$ helyeken van, ha az x az

$$x = E_0 + \varepsilon(k) + R_k(x)$$

egyenlet megoldása. Jelöljük a legkisebb valós gyököt x_k-val. Ezen hely környezetében

$$<k|G(z)|k>_L = \frac{1}{z - E_0 - \varepsilon(k) - R_k(x_k) - R_k'(x_k)(z - x_k)} =$$

$$= \frac{1}{(z - x_k)[1 - R_k'(x_k)]} = \frac{A_k}{z - x_k}, \tag{30.7.4}$$

$$A_k = [1 - R_k'(x_k)]^{-1}$$

Mivel $\beta \to \infty$ esetén az integrálban a legkisebb pólushely dominál,

$$< k \mid U(-i\beta) \mid k >_L \approx A_k e^{\beta(E_0+\varepsilon(k)-x_k)}. \tag{30.7.5}$$

(7.1)-gyel összevetve

$$x_k = E_0 + \bar{\varepsilon}(k), \qquad A_k = \frac{N_k}{N_0}.$$

Ezzel eljutottunk az $\bar{\varepsilon}(k)$ gerjesztési energiát és az N_k valószínűséget megadó *Hugenholtz*-formulákhoz

$$\begin{gathered} \bar{\varepsilon}(k) = \varepsilon(k) + R_k(E_0 + \bar{\varepsilon}(k)), \\ \bar{\varepsilon}(k) = \varepsilon(k) + < k \mid V + V(E_0 + \bar{\varepsilon}(k) - H_0)^{-1}V + \ldots \mid k >_{iC} \\ N_k = N_0[1 - R_k'(E_0 + \bar{\varepsilon}(k))]^{-1}. \end{gathered} \tag{30.7.6}$$

Az $\bar{\varepsilon}(k)$-ra vonatkozó első (vagy második) transzcendens egyenlet megoldása után N_k a harmadik képletből kiszámítható. Gyakorlati problémát $R_k(z)$ megadása jelent.

Megjegyzések

a) $V \to 0$ esetén az $\bar{\varepsilon}(k)$ gerjesztési energia átmegy $\varepsilon(k)$-ba. Bebizonyítható, hogy ez esetben $\mid \psi_k > \to \mid k >$. A kvázirészecske gerjesztést LANDAU éppen ezekkel a tulajdonságokkal definiálta.

b) A kvázirészecske fogalmának természetes kiterjesztése a kvázilyuk fogalma. A kvázilyuk energiáját az

$$\bar{\varepsilon}(m) = \varepsilon(m) + < m \mid R(E_0 - \bar{\varepsilon}(m)) \mid m >_{iC} \tag{30.7.7}$$

transzcendens egyenletből számíthatjuk.

c) Előfordulhat, hogy a *Hugenholtz*-egyenleteknek nincs valós megoldásuk $\bar{\varepsilon}(k)$-ra, de van a valós tengely közelébe eső komplex gyök: $\bar{\varepsilon}(k) \pm i\Gamma(k)$. (A gyökök szimmetrikusak a valós tengelyre, mert $R(z)$ hermitikus.) Míg $\mid \Gamma \mid \ll \mid \bar{\varepsilon} \mid$, a kvázirészecske kép fenttartható: $\bar{\varepsilon}(k)$ a kvázirészecske energiája, $\Gamma(k)^{-1}$ az élettartama.

8. §. Diagonális gráfok és a független kvázirészecske közelítés

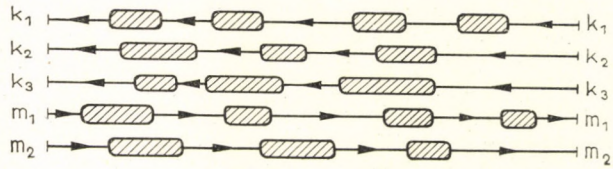
A kvázirészecske gerjesztésekre kapott eredményeket felhasználhatjuk az ún. diagonális gráfok járulékainak kiszámítására. Diagonálisnak azokat a gráfokat nevezzük, melyekben egyrészt a kezdeti és végállapot azonos, másrészt a gráf teljesen szétesik irreducibilis betétrészekkel „felöltöztetett" egyrészecske vonalakká (357. ábra).

Egyetlen egy ilyen vonalból álló gráf esetét az előző pontban már megbeszéltük, az eredményt (7.3) adja meg. A több vonalból álló diagonális gráf $< m_q \ldots m_1, k_p \ldots k_1 \mid G(z) \mid k_1 \ldots k_p, m_1 \ldots m_q >_D$ járulékának meghatáro-

zására pedig a (4.14) alatti *Bloch*-szabályt használhatjuk fel. Figyelemmel kell azonban lennünk arra, hogy a *Bloch*-szabály csak az $U(t)$ operátor mátrixelemeire érvényes, ezért eljárásunknak a következőnek kell lennie: először is a (7.3)-nak megfelelő $< k \mid U(t) \mid k >_L$ egyrészecske járulékot kell kiszámítanunk a (2.6) integrálformula segítségével, majd ezen egyrészecske járulékok összeszorzásával a *Bloch*-szabály értelmében megkapjuk a teljes diagonális gráf

$$< m_q \ldots m_1, k_p \ldots k_1 \mid U(t) \mid k_0 \ldots k_p, m_1 \ldots m_q >_D$$

járulékát, végül pedig a (2.7) transzformáció alkalmazásával jutunk a $G(z)$ operátor diagonális járulékához.



113. ábra. Diagonális gráf

A számítások igen nagy mértékben leegyszerűsödnek, ha az egzakt (7.3) formula helyett a következő közelítést engedjük meg magunknak:

$$< k \mid G(z) \mid k >_L = \frac{1}{z - E_0 - \bar{\varepsilon}(k)}\,,$$
$$< m \mid G(z) \mid m >_L = \frac{1}{z - E_0 + \bar{\varepsilon}(m)}\,. \tag{30.8.1}$$

E képletek nyilván akkor lennének egzaktul érvényesek, ha $R_k(z)$ és $R_m(z)$ nem függnének a z paramétertől. A (8.1) közelítés, melyet független kvázirészecske közelítésnek nevezünk, tehát az irreducibilis betétrészek z-függését hanyagolja el, R_k-t és R_m-et (az állapottól függő) konstansnak tekinti. Megjegyezzük, hogy a (7.4) formula szerint, ha z az x_k pólushely környezetében van, akkor (8.1) igen jó közelítést jelent, feltéve, hogy az A_k reziduum nem nagyon különbözik 1-től.

A független kvázirészecske közelítés a diagonális gráfok tárgyalását rendkívül egyszerűvé teszi. A (8.1) képleteket a (2.6) transzformációnak alávetve kapjuk, hogy

$$< k \mid U(t) \mid k >_L = e^{i[\varepsilon(k) - \bar{\varepsilon}(k)]t}\,,$$
$$< m \mid U(t) \mid m >_L = e^{-i[\varepsilon(m) - \bar{\varepsilon}(m)]t}\,. \tag{30.8.2}$$

A *Bloch*-szabály pedig a diagonális gráfra a következő eredményt adja:

$$< m_q \ldots m_1, k_p \ldots k_1 \mid U(t) \mid k_1 \ldots k_p, m_1 \ldots m_q >_D = e^{i(\varepsilon_\alpha - \bar{\varepsilon}_\alpha)t} \tag{30.8.3}$$

ahol ε_α és $\bar{\varepsilon}_\alpha$ a következő energiákat jelölik:

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon(k_1) + \ldots + \varepsilon(k_p) - \varepsilon(m_1) - \ldots - \varepsilon(m_q),$$
$$\bar{\varepsilon}_\alpha = \bar{\varepsilon}(k_1) + \ldots + \bar{\varepsilon}(k_p) - \bar{\varepsilon}(m_1) - \ldots - \bar{\varepsilon}(m_q). \tag{30.8.4}$$

ε_α tehát az $|\alpha> = |k_1 \ldots k_p, m_1 \ldots m_q>$ kezdeti- (és vég-) állapotban jelenlevő részecskék és lyukak energiáinak előjeles összege, $\bar{\varepsilon}_\alpha$ pedig a megfelelő kvázirészecskék és kvázilyukak energiaösszege. — A diagonális gráf tárgyalásának utolsó lépéseként (8.3)-at (2.7) segítségével visszatranszformáljuk a $G(z)$ *Green*-operátor megfelelő járulékává:

$$<m_q \ldots m_1, k_p \ldots k_1 | G(z) | k_1 \ldots k_p, m_1 \ldots m_q>_D = \frac{1}{z - E_0 - \bar{\varepsilon}_\alpha}. \tag{30.8.5}$$

E kifejezésnek pólusa van a $z = E_0 + \bar{\varepsilon}_\alpha$ helyen, és az 1. pontban megbeszéltek szerint a pólushelynek a kölcsönható rendszer egyik energiasajátértéke felel meg. Az alapállapothoz képesti gerjesztési energiát $\bar{\varepsilon}_\alpha$, az egyes kvázirészecskék és kvázilyukak energiáinak összege adja meg. Nyilvánvaló tehát a (8.1) független kvázirészecske közelítés fizikai tartalma: elhanyagoljuk a kvázirészecskék kölcsönhatását.

9. §. Perturbációszámítás

A térelméleti technika segítségével levezettük a *Goldstone*- valamint a *Hugenholtz*-féle formulákat. E képletek segítségével az ideális rendszer energiaspektruma ismeretében meghatározhatjuk a reális rendszer alapállapotának energiáját és állapotvektorának amplitúdóit, továbbá a kvázirészecskék, ill. kvázilyuknak energiáját és állapotvalószínűségét. Formuláink egzakt formulák, amelyek levezetésénél a bevezetőben megbeszélt feltételezéseken túlmenően semmilyen további feltevéssel, ill. elhanyagolással nem éltünk.

A formulákban az $R(z)$ reakcióoperátor bizonyos mátrixelemeinek gráftípusok adott összegére számolt értéke játszik lényeges szerepet. Alapállapot és kvázirészecskegerjesztés esetén az ideális rendszer megfelelő energiájától való eltérést ilyen mátrixelem szolgáltatja megfelelő helyettesítési értékben. Az állapotvalószínűségeket megadó formákban pedig a szóbanforgó mátrixelemek deriváltjainak rögzített z-nél adódó értéke szerepel.

Mielőtt konkrét eseteket vizsgálnánk, meg kell beszélnünk, hogy a képleteket gyakorlatilag hogyan fogjuk kezelni, ugyanis azok pontos számítása, a jelenlegi gépi technikát is beleértve, lehetetlen. Közelítő módszerek használatára vagyunk utalva. A sorra következő §-okban ezzel a kérdéssel foglalkozunk. Le kell azonban szögeznünk, hogy a közelítő módszerek hibájának megbecslésére nem vállalkozhatunk. A közelítések jogosságát eredményeinknek a tapasztalattal való összevetésén keresztül mérhetjük le. Az általunk vizsgált közelítő módszerek alkalmazhatóságának kérdését kvalitatíve e fejezet végén megbeszéljük.

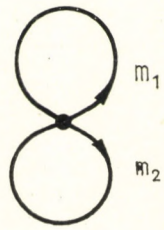
Először a *Rayleigh–Schrödinger*-féle perturbációszámítással foglalkozunk. A perturbációszámítás n-ed rendű ($n \geq 1$) közelítésében a felösszegzéseknél a legfeljebb n-ed rendű gráfokat veszünk csak figyelembe. Mivel természetesen a gráf rendjét a benne szereplő kölcsönhatások száma adja meg, s az $R(z)$ reakcióoperátor (6.5) sorfejtése mutatja, hogy az n-edik tagja épp n darab V operátort tartalmaz, a *Schrödinger*-féle közelítés a reakcióoperátor végtelen sorát egy bizonyos tagnál letöri. A perturbációszámítás rendjét az utolsó megtartott tag sorszáma adja meg. Az ideális rendszer adatait a perturbációszámítás nulladik közelítésének szokás nevezni. Vegyük sorra a paerturbációszámítás néhány közelítését.

1. *Első közelítés*

$$R(z) \equiv R^1(z) = V \tag{30.9.1}$$

Alapállapotenergia

$R_C^{(1)} = < \Phi_0 \mid V \mid \Phi_0 >_C$. Mivel a kezdő és végállapot alapállapot, egyetlen gráf van, amely egy kölcsönhatást tartalmaz (114. ábra). E gráf egyben összefüggő is.



114. ábra. Az elsőrendű alapállapot-gráf

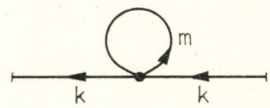
Járuléka, s vele a W_0 elsőközelítésű értéke

$$W_0^{(1)} = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{m_1, m_2} (m_1 m_2 \mid V \mid m_1 m_2) . \tag{30.9.2}$$

Kvázirészecske

Elsőrendű egyrészecske kapocs-gráf csak egy van (115. ábra). A reakcióoperátor e gráfra számolt járuléka

$$R_k^{(1)} = < k \mid V \mid k > = \sum_m (km \mid V \mid km). \tag{30.9.3a}$$



115. ábra. Az elsőrendű linked egyrészecske gráf

Tehát

$$\bar{\varepsilon}^{(1)}(k) = \varepsilon(k) + \sum_m (km \mid V \mid km). \tag{30.9.3b}$$

A képlet explicit, mivel $R(z)$ e közelítésben z-től független volt.

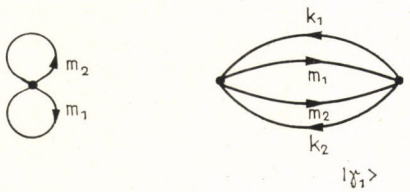
2. *Második közelítés*

A reakcióoperátor sorát a második tagnál szakítjuk meg:

$$R^{(2)}(z) = V + V(z - H_0)^{-1}V. \tag{30.9.4}$$

Alapállapot

A lehetséges összefüggő alapállapotgráfok a 116. ábrán láthatók.



116. ábra. Az első és másodrendű alapállapot-gráfok

A másodrendű gráf közbenső állapotában a $(z - H_0)^{-1}$ propagátor értéke a $z = E_0$ helyen

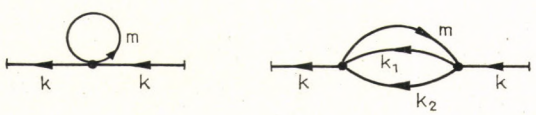
$$E_{\gamma 1} = E_0 - [E_0 + \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2) - \varepsilon(m_1) - \varepsilon(m_2)].$$

Az $R_C^{(2)}(E_0)$-lal kifejezett alapállapotenergia

$$W_0^{(2)} = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{m_1, m_2} (m_1 m_2 \mid V \mid m_1 m_2) + \\ + \frac{1}{4} \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ k_1 k_2}} \frac{(m_1 m_2 \mid V \mid k_1 k_2)(k_1 k_2 \mid V \mid m_1 m_2)}{\varepsilon(m_1) + \varepsilon(m_2) - \varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2)}. \tag{30.9.5}$$

Kvázirészecske

A lehetséges irreducibilis összefüggő $n \leq 2$ gráfokat a 117. ábra mutatja.



117. ábra. Az irreducibilis összefüggő első- és másodrendű gráfok

$R_k^{(2)} = \langle k \mid R^{(2)}(E_0 + \bar{\varepsilon}(k)) \mid k \rangle$ számításával a kvázirészecskeenergia

$$R_k^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m \\ k_1 k_2}} \frac{(km \mid V \mid k_1 k_2)\,(k_1 k_2 \mid V \mid km)}{\bar{\varepsilon}(k) - \varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2) + \varepsilon(m)} \,, \tag{30.9.6}$$

$$\bar{\varepsilon}(k) = \varepsilon(k) + \sum_m (km \mid V \mid km) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ m}} \frac{(km \mid V \mid k_1 k_2)\,(k_1 k_2 \mid V \mid km)}{\bar{\varepsilon}(k) + \varepsilon(m) - \varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2)} \,.$$

Mivel az $R(z)$ reakcióoperátor e közelítéstől kezdve függ z-től, az $\bar{\varepsilon}(k)$ értékét implicit formulák fogják szolgáltatni. Már (9.6) is ilyen.

A fentiek alapján, magasabb rendű közelítések formuláinak felírása nem okozhat különösebb problémát. Általános szabályként megállapíthatjuk, hogy $\bar{\varepsilon}(k)$ meghatározására $n \geq 2$ esetén (7.6) implicit formát szolgáltat. W_0-t a „csupasz" részecske, illetve lyukvonalakból álló gráfok használata miatt (6.11) explicit formában adja.

10. §. Bethe—Goldstone-féle módszer

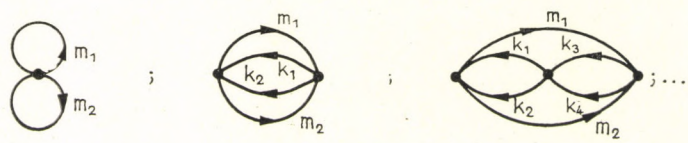
Azt a közelítést, amely a felösszegzésben csak a kevés belső lyukvonalat tartalmazó gráfokat veszi figyelembe, *Bethe—Goldstone*-módszernek nevezzük.

Mi a továbbiakban a *Bethe—Goldstone*-módszert csak a legalacsonyabb közelítésű esetben részletezzük, tehát W_0 számításánál csak a két belső lyukvonalat tartalmazó gráfokra, $\bar{\varepsilon}(k)$ számításánál pedig csak az egy belső lyukvonalat tartalmazó gráfokra leszünk tekintettel.

A módszer kis részecskeszámú rendszerek vizsgálata esetén bizonyult hatékonynak. Nagy részecskeszámú rendszerekre akkor jó, ha a rendszer „híg". Két részecskéből álló rendszerekre, az alább megbeszélendő módszer egzakt.

Alapállapotenergia

Mivel (6.11)-ben $\langle \Phi_0 \mid R(E_0) \mid \Phi_0 \rangle_c$ szerepel, csak alapállapotgráfokra kell tekintettel lenni. Összefüggő alapállapotgráfoknál kettő a lehető legkevesebb belső lyukvonal. Ezért vizsgáljuk legalacsonyabb közelítésként ezt az esetet. A szóba jöhető gráfok a 118. ábrán láthatók. Az első- illetve másodrendű gráf ugyanaz, mint a perturbációszámítás esetén, tehát a megfelelő tagok W_0 képleté-



118. ábra. A két lyukvonalat tartalmazó gráfok

ben (9.2) és (9.5). A 119. ábra harmadrendű gráfjának járuléka

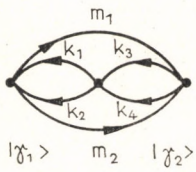
$$R_c^{(3)}(z) = \frac{1}{2^3} \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ k_1, k_2 \\ k_3, k_4}} (m_1 m_2 \mid V \mid k_1 k_2)\,(z - E_{\gamma_1})^{-1} (k_1 k_2 \mid V \mid k_3 k_4)(z - E_{\gamma 2})^{-1} \times$$

$$\times (k_3 k_4 \mid V \mid m_1 m_2), \tag{30.10.1}$$

ahol

$$E_{\gamma_1} = E_0 + \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2) - \varepsilon(m_1) - \varepsilon(m_2),$$

$$E_{\gamma_2} = E_0 + \varepsilon(k_3) + \varepsilon(k_4) - \varepsilon(m_1) - \varepsilon(m_2).$$



119. ábra. A két lyukvonalat tartalmazó harmadrendű gráf

Végeredményben tehát

$$W_0 = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} \Bigg[(m_1 m_2 \mid V \mid m_1 m_2) + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \frac{(m_1 m_1 \mid V \mid k_1 k_2)\,(k_1 k_2 \mid V \mid m_1 m_2)}{\varepsilon(m_1) + \varepsilon(m_2) - \varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2)} +$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} \frac{(m_1 m_2 \mid V \mid k_1 k_2)\,(k_1 k_2 \mid V \mid k_3 k_4)\,(k_3 k_4 \mid V \mid m_1 m_2)}{[\varepsilon(m_1) + \varepsilon(m_2) - \varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2)]\,[\varepsilon(m_1) + \varepsilon(m_2) - \varepsilon(k_3) - \varepsilon(k_4)]} + \ldots \Bigg]. \tag{30.10.2}$$

W_0 meghatározását ezzel megoldottnak tekinthetjük. Amit mégis hozzáfűzünk, az a későbbiekben is igen hasznosnak bizonyuló, (10.2)-ben szereplő végtelen sor összegének kiszámolására szolgáló eljárás lesz.

A mellékszámításokat is részletezzük, mivel ezt a gondolatmenetet még többször fogjuk követni.

Definiáljuk a K_s *Bethe–Goldstone*-mátrixot a következő implicit lineáris egyenletrendszerrel

$$(l_1 l_2 \mid K_s \mid l_3 l_4) = (l_1 l_2 \mid V \mid l_3 l_4) + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \frac{(l_1 l_2 \mid V \mid k_1 k_2)\,(k_1 k_2 \mid K_s \mid l_3 l_4)}{\varepsilon(l_3) + \varepsilon(l_4) - \varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2)}. \tag{30.10.3}$$

Kimutatjuk, hogy

$$R_c(E_0) = \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} (m_1 m_2 \mid K_s \mid m_1 m_2). \tag{30.10.4}$$

Állításunkat a következőképp bizonyíthatjuk be: keressük (10.3) megoldását

iterációval

$$(l_1 l_2 \mid K_s^{(n)} \mid l_3 l_4) = (l_1 l_2 \mid V \mid l_3 l_4) + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \frac{(l_1 l_2 \mid V \mid k_1 k_2)}{\varepsilon(l_3) + \varepsilon(l_4) - \varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2)} (k_1 k_2 \mid K_s^{(n-1)} \mid l_3 l_4) \tag{30.10.5}$$

ahol $n = 1, 2, \ldots$ és $K_s^{(0)} = V$.

$$K_s = \lim_{n \to \infty} K_s^{(n)}. \tag{30.10.6}$$

A képzés mutatja, hogy ha $l_1 = l_3 = m_1$, $l_2 = l_4 = m_2$, akkor

$$\frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} (m_1 m_2 \mid K_s^{(0)} \mid m_1 m_2) = R_C^{(1)}(E_0),$$

$$\frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} (m_1 m_2 \mid K_s^{(1)} \mid m_1 m_2) = R_C^{(1)}(E_0) + R_C^{(2)}(E_0),$$

$$\frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} (m_1 m_2 \mid K_s^{(2)} \mid m_1 m_2) = R_C^{(1)}(E_0) + R_C^{(2)}(E_0) + R_C^{(3)}(E_0).$$

Teljes indukcióval könnyen kimutatható, hogy

$$\frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} (m_1 m_2 \mid K_s^{(n)} \mid m_1 m_2) = \sum_{s=1}^{n+1} R_C^{(s)}(E_0). \tag{30.10.7}$$

(10.7)-ben az $n \to \infty$ határátmenetet véve (10.6) felhasználásával adódik (10.4). Végeredményben a reális rendszer alapállapotának energiája

$$W_0 = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} (m_1 m_2 \mid K_s \mid m_1 m_2). \tag{30.10.8}$$

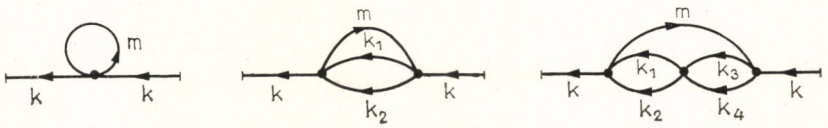
(10.8) természetesen jóval több, mint (10.2) ötletes átírása. Az a lehetőség teszi (10.8)-at jobban használhatóvá, hogy K_s lényegében véve nem más, mint a (28.4.6) szórásmátrix. Ezt a (10.3) definiáló egyenlet mutatja. A szórásmátrix elemeinek meghatározására azonban használhatjuk a huszonnyolcadik fejezetben megismert módszereket. (10.3)-nak a szórásmátrix egyenletével való összehasonlítása mutatja, hogy formuláink két *Fermi*-tengerbeli részecske egymáson való szórását írják le. A lényeges eltérés, hogy esetünkben $\Sigma_{k_1 k_2}$ áll, szemben $\Sigma_{l_1 l_2}$-vel. Ennek szemléletes jelentése van. A *Pauli*-elv miatt a *Fermi*-tengerbeli állapotok mint belső állapotok nem jöhetnek szóba.

Kvázirészecske

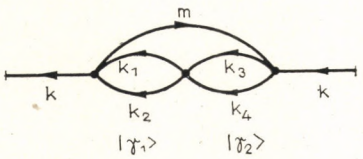
Mivel a (7.6)-ban szereplő $R_k(z)$-ben a kezdeti és végállapot egyrészecske állapot, a lehető legkevesebb belső lyukvonal: egy. (Ugyanis minden kölcsönhatási pontba két vonal fut be és két vonal fut ki.) Ez tehát a legalacsonyabb közelítés. A lehetséges *iC*-gráfokat a 120. ábra mutatja. Az első és második gráf most is ugyanaz,

mint a perturbációszámítás esetén, tehát $R_k^{(1)}(z)$, $R_k^{(2)}(z)$ ugyanaz, mint (9.3), illetve (9.6). A 121. ábra harmadrendű gráfjának járuléka a (3.12) szabály alkalmazásával

$$R_C^{(3)}(z) = \frac{1}{4} \sum_{\substack{m,k_1k_2 \\ k_3k_4}} (km \mid V \mid k_1k_2)(z - E_{\gamma_1})^{-1}(k_1k_2 \mid V \mid k_3k_4)(z - E_{\gamma_2})^{-1}(k_3k_4 \mid V \mid km), \tag{30.10.9}$$



120. ábra. Az egy lyukvonalat tartalmazó irreducibilis összefüggő gráfok



121. ábra. Az egy lyukvonalat tartalmazó irreducibilis harmadrendű gráf

ahol pl.

$$E_{\gamma_2} = E_0 + \varepsilon(k_3) + \varepsilon(k_4) - \varepsilon(m), \text{ stb.}$$

Tehát

$$\bar{\varepsilon}(k) = \varepsilon(k) + \sum_m \left[(km \mid V \mid km) + \frac{1}{2} \sum_{k_1k_2} \frac{(km \mid V \mid k_1k_2)(k_1k_2 \mid V \mid km)}{\bar{\varepsilon}(k) + \varepsilon(m) - \varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2)} + \ldots \right]. \tag{30.10.10}$$

A K_s „szórásmátrix" felhasználásával, a W_0-lal kapcsolatban megbeszélt gondolatmenetet követve, egyszerű átírással adódik, hogy

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{s=1}^{n} R_k^{(s)}(E_k) = \lim_{n\to\infty} \sum_m (km \mid K_s^{(n-1)} \mid km) \equiv \sum_m (km \mid K_s \mid km), \tag{30.10.11}$$

$$E_k = E_0 + \varepsilon(k).$$

(10.11)-ben azért áll egyszeres összeg, mert gráfjainkban egyetlen belső lyukvonal van. Ugyancsak emiatt a $(z - H_0)^{-1}$ propagátoroknak a közbenső állapotbeli értéke $z - E_0 - \varepsilon(k') - \varepsilon(k'') + \varepsilon(m)$. Tehát hogy a (10.3) egyenlet négy $\varepsilon(l)$-je meg legyen a nevezőben, a $z = E_0 + \varepsilon$ helyettesítését kell venni. Mivel a (10.3) egyenletben $l_1 = l_3 = k$, az $\varepsilon = \varepsilon(l_3) = \varepsilon(k)$ választást kell tenni.

A K_s mátrixszal $\bar{\varepsilon}(k)$ csak akkor lenne kifejezhető, ha $R_k(z)$ argumentumában $E_0 + \bar{\varepsilon}(k)$ helyett $E_0 + \varepsilon(k)$ állna. Tételezzük fel, hogy közelítőleg

$$R_k\big(E_0 + \bar{\varepsilon}(k)\big) = R_k\big(E_0 + \varepsilon(k)\big). \tag{30.10.12}$$

Ez további approximáció a gráfokra tett elhanyagoláson túl. A kvázirészecske energia

$$\bar{\varepsilon}(k) = \varepsilon(k) + \sum_{m} (km \mid K_s \mid km), \tag{30.10.13}$$

illetve teljesen hasonló számolás után a kvázilyuk-energia

$$\bar{\varepsilon}(m) = \varepsilon(m) + \sum_{m'} (mm' \mid K_s \mid mm'). \tag{30.10.14}$$

Megjegyzendő, hogy a (7.6) implicit forma a (10.12) feltevés miatt vette fel a (10.13) illetve (10.14) explicit alakot.

A (10.12) feltevést tartva, W_0-ra érdekes összefüggés származtatható

$$W_0 = \frac{1}{2} \sum_{m} \left(\varepsilon(m) + \bar{\varepsilon}(m)\right). \tag{30.10.15}$$

Kimutathatóan hasonló igaz a perturbációszámításban is. Állításunkat a következőképp láthatjuk be. (10.8)-at átírva:

$$W_0 = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{m} \left[\sum_{m'} (mm' \mid K_s \mid mm')\right].$$

E kifejezés jobboldalának szögletes zárójelbe írt tagja (10.14) alapján $\bar{\varepsilon}(m) - \varepsilon(m)$. Figyelembe véve, hogy

$$E_0 = \sum_{m} \varepsilon(m),$$

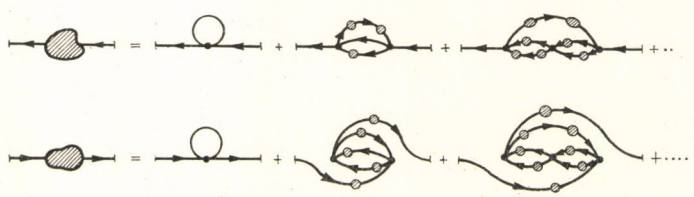
a helyettesítések után valóban kiadódik (10.15).

11. §. A Brueckner-módszer

A *Bethe—Goldstone*-módszernek azt az általánosítását, mely a felösszegzés során a „felöltöztetett" belső vonalakkal rendelkező *Bethe—Goldstone*-típusú gráfok járulékait veszi figyelembe, *Brueckner*-módszernek nevezzük

Az irreducubulus betétiészek rekurziós definícióját a 366. ábra szerinti sémával adhatjuk meg.

Az egyes részecske- illetve lyukvonalakra rajzolt sraffozott körök azt jelentik, hogy helyükre tetszőleges számban helyettesíthetjük a 122. ábra „egyenletének" jobboldalát. Ezt úgy fogalmazzuk meg, hogy a *Bethe—Goldstone*-gráfok vonalait „felöltöztetjük" kvázirészecskékké.



122. ábra. Az irreducibilis betétrészek rekurziós defciiniója

A *Brueckner*-módszer tehát tetemesen kiszélesíti azoknak a gráfoknak körét, amelyek járulékait a W_0 és $\bar{\varepsilon}(l)$ számításánál figyelembe veszi. Minthogy e gráfokat implicit módon dfiniáltuk, érdekes annak megvizsgálása, hogy végeredményben melyek azok a gráfok, amelyeket még ez a módszer is elhanyagol. E kérdést, e fejezet végén, a gráfegyszerűsítés fogalmának a bevezetésével tisztázzuk.

Az előző fejezetektől eltérően előbb a *Hugenholtz*-formulát kell kiszámítani, mivel W_0 számításában már szerepelni fognak a kvázirészecskék.

Kvázirészecskék

Az $R_k(z)$ meghatározásához szükséges irreducibilis összefüggő gráfok a 123. ábrán láthatók.



123. ábra. $R_k(z)$ meghatározásához szükséges irreducibilis összefüggő gráfok

Az egyes gráfok járulékai legyenek rendre $R_k^{(1)}, R_k^{(2)}, \ldots$ (3.12) felhasználásával

$$R_k^{(1)} = \sum_m (km \mid V \mid km). \tag{30.11.1}$$

$R_k^{(2)}$ számításánál vegyük figyelembe, hogy a propagátor most $(z - H_0)^{-1}$ helyett $G(z)$, tehát (3.10) szerint

$$R_k^{(2)}(z) = \frac{1}{2} \sum_{mk_1k_2} (km \mid V \mid k_1k_2) < mk_2k_1 \mid G(z) \mid k_1k_2m >_D (k_1k_2 \mid V \mid km). \tag{30.11.2}$$

E mátrixelem számításánál használjuk a független kvázirészecske közelítést (továbbiakban *FK*) (8.5) és (8.4) figyelembevételével

$$R_k^{(2)}(z) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m \\ k_1k_2}} \frac{(km \mid V \mid k_1k_2)\,(k_1k_2 \mid V \mid km)}{z - E_0 - \bar{\varepsilon}(k_1) - \bar{\varepsilon}(k_2) + \bar{\varepsilon}(m)}. \tag{30.11.3}$$

(9.6)-tal összehasonlítva különbség az, hogy az energiák helyett az $\bar{\varepsilon}(l)$ energiaértékek szerepelnek. A részecske ill. lyukvonalak „felöltöztetése", ha a *FK* közelítést használjuk, ebben a formában jelentkezik.

Az eljárás analóg folytatásaként

$$R_k^{(3)}(E_0 + \bar{\varepsilon}(k)) = \frac{1}{4} \sum_{\substack{m \\ k_1k_2 \\ k_3k_4}} \frac{(km \mid V \mid k_1k_2)\,(k_1k_2 \mid V \mid k_3k_4)\,(k_3k_4 \mid V \mid km)}{[\bar{\varepsilon}(k) + \bar{\varepsilon}(m) - \bar{\varepsilon}(k_1) - \bar{\varepsilon}(k_2)]\,[\bar{\varepsilon}(k) + \bar{\varepsilon}(m) - \bar{\varepsilon}(k_3) - \bar{\varepsilon}(k_4)]}, \tag{30.11.4}$$

stb. A kvázilyukakra hasonlóan

$$R_m^{(1)}(E_0 + \bar{\varepsilon}(m)) = \sum_{m'} (mm' \mid V \mid mm'), \tag{30.11.5}$$

illetve

$$R_m^{(2)}(E_0 + \bar{\varepsilon}(m)) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m' \\ k_1 k_2}} \frac{(mm' \mid V \mid k_1 k_2)\,(k_1 k_2 \mid V \mid mm')}{\bar{\varepsilon}(m) + \bar{\varepsilon}(m') - \bar{\varepsilon}(k_1) - \bar{\varepsilon}(k_2)}, \quad \text{stb.}$$

Összefoglalva

$$\bar{\varepsilon}(k) = \varepsilon(k) + \sum_m \left[(km \mid V \mid km) + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \frac{(km \mid V \mid k_1 k_2)\,(k_1 k_2 \mid V \mid km)}{\bar{\varepsilon}(k) + \bar{\varepsilon}(m) - \bar{\varepsilon}(k_1) - \bar{\varepsilon}(k_2)} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{4} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} \frac{(km \mid V \mid k_1 k_2)\,(k_1 k_2 \mid V \mid k_3 k_4)\,(k_3 k_4 \mid V \mid km)}{[\bar{\varepsilon}(k) + \bar{\varepsilon}(m) - \bar{\varepsilon}(k_1) - \bar{\varepsilon}(k_2)]\,[\bar{\varepsilon}(k) + \bar{\varepsilon}(m) - \bar{\varepsilon}(k_3) - \bar{\varepsilon}(k_4)]} + \ldots \right] \tag{20.11.6}$$

(11.6)-ban jelentkező végtelen sort a *Bethe–Goldstone*-módszerben is követett eljárás némi módosításával ismét átírhatjuk. Definiáljuk a K_B *Brueckner*-féle reakciómátrixot a következő módon:

$$(l_1 l_2 \mid K_B \mid l_3 l_4) = (l_1 l_2 \mid V \mid l_3 l_4) + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \frac{(l_1 l_2 \mid V \mid k_1 k_2)}{\bar{\varepsilon}(l_3) + \bar{\varepsilon}(l_4) - \bar{\varepsilon}(k_1) - \bar{\varepsilon}(k_2)} (k_1 k_2 \mid K_B \mid l_3 l_4). \tag{30.11.7}$$

Ha (12.7) megoldását ismét iterációs úton keressük, azaz

$$(l_1 l_2 \mid K_B^{(n)} \mid l_3 l_4) = (l_1 l_2 \mid V \mid l_3 l_4) +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \frac{(l_1 l_2 \mid V \mid k_1 k_2)}{\bar{\varepsilon}(l_3) + \bar{\varepsilon}(l_4) - \bar{\varepsilon}(k_1) - \bar{\varepsilon}(k_2)} (k_1 k_2 \mid K_B^{(n-1)} \mid l_3 l_4),$$

ahol $n = 1, 2, \ldots, K_B^{(0)} = V$, $\lim_{n \to \infty} K_B^{(n)} = K_B$;

teljes indukcióval igazolható, hogy

$$\sum_m (km \mid K_B^{(n)} \mid km) = \sum_{s=1}^{n+1} R_k^{(s)}(E_0 + \bar{\varepsilon}(k)). \tag{30.11.8}$$

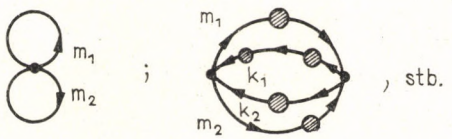
Vagyis a kvázirészecske- illetve kvázilyuk-energia

$$\bar{\varepsilon}(l) = \varepsilon(l) + \lim_{n \to \infty} \sum_{s=1}^{n} R_k^{(s)}(E_0 + \bar{\varepsilon}(k)) = \varepsilon(l) + \sum_m (lm \mid K_B \mid lm). \tag{30.11.9}$$

A *Bethe–Goldstone*-módszerrel való összehasonlítás mutatja, hogy (11.7)-nek (10.3), (11.9)-nek pedig (10.13) felel meg. A formai hasonlóság ellenére lényeges különbség van. Szemben a *Bethe–Goldstone*-esettel, most (11.7) és (11.9) egyenleteket szimultán kell megoldani, amelyek $\bar{\varepsilon}(k)$-ra nem lineáris egyenletek. A megoldás gyakorlati lebonyolításáról W_0 meghatározása után lesz szó.

Alapállapot

A *Goldstone*-formula számításához, a *Brueckner*-módszer által figyelembe vett összefüggő alapállapot gráfok („felöltöztetett" *Bethe–Goldstone*-féle gráfok) a 124. ábrán láthatók.



124. ábra. A Bruckner-módszer összefüggő alapállapot gráfjai

Az egyes gráfok járulékai $R_c(z)$-hez, ha a propagátorok „közbenső" állapotbeli mátrixelemét ismét az *FK* közelítésben számítjuk

$$R_c^{(1)}(z) = \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} (m_1 m_2 \mid V \mid m_1 m_2),$$

$$R_c^{(2)}(E_0) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ k_1 k_2}} \frac{(m_1 m_2 \mid V \mid k_1 k_2)\,(k_1 k_2 \mid V \mid m_1 m_2)}{\bar{\varepsilon}(m_1) + \bar{\varepsilon}(m_2) - \bar{\varepsilon}(k_1) - \bar{\varepsilon}(k_2)}, \ldots \quad (30.11.10)$$

A *Brueckner*-mátrix bevezetésével (11.8) származtatásához analóg módon adódik

$$W_0 = E_0 + \lim_{n \to \infty} \sum_{s=1}^{n} R_c^{(s)}(E_0),$$

$$\sum_{s=1}^{n+1} R_c^{(s)}(E_0) = \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} (m_1 m_2 \mid K_B^{(n)} \mid m_1 m_2), \quad (30.11.11)$$

$$W_0 = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} (m_1 m_2 \mid K_B \mid m_1 m_2).$$

Mivel a *Bethe–Goldstone*-, illetve *Brueckner*-közelítésben W_0 és $\bar{\varepsilon}(k)$ egyaránt azonos szerkezetben függenek a K_s illetve K_B mátrxioktól, a (11.15) alatti levezetés analóg megismétléseként ismét kapjuk

$$W_0 = \frac{1}{2} \sum_{m} (\varepsilon(m) + \bar{\varepsilon}(m)). \quad (30.11.12)$$

Természetesen $\bar{\varepsilon}(m)$ (10.15), illetve (11.12)-ben a *Bethe–Goldstone*- illetve *Brueckner*-közelítésben kapott kvázilyuk energiát jelenti.

A *Brueckner*-módszerrel kapcsolatban a következő fontos megállapításokat tehetjük

1. Ha (11.7) egyenletben az

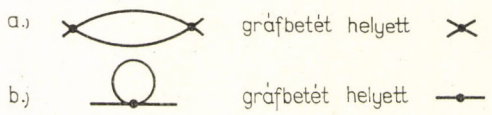
$$\bar{\varepsilon}(k) = \varepsilon(k),$$

$$\bar{\varepsilon}(m) = \varepsilon(m)$$

közelítéssel élünk, akkor a (10.3) egyenletre jutunk, s az alapállapotenergiát, ill. kvázirészecske spektrumot egyaránt a *Bethe—Goldstone*-közelítésben kapjuk meg.

2. Ha ezen az elhanyagoláson túl (11.7) jobboldalán K_B helyébe V-t írunk, akkor (11.9) és (11.11) a perturbációszámítás második közelítésű értékeit adja. Ez az utóbbi elhanyagolás azt jelenti, hogy K_s egyenletének iterációs megoldásában az első iteráció után megállunk.

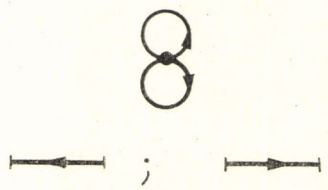
$\bar{\varepsilon}(l)$ számításával kapcsolatban említettük, hogy (11.7) és (11.9) egyenleteket szimultán kell megoldani. Gyakorlatilag az iterációs út látszik a legjárhatóbbnak. Az $\bar{\varepsilon}(l)$-okra valamilyen kezdő értékeket véve fel, megkeressük (11.7) megoldását. Ez, a K_B-re lineáris egyenletrendszer maga is számolható iteratíve. K_B ismeretében (11.9)-ből kiszámítható $\bar{\varepsilon}(l)$. Ezt eggyel magasabb közelítésnek tekintve újra kezdhetjük az eljárást, míg előre adott korlátra „self-consistens" nem lesz a ciklus.



125. ábra. A gráfegyszerűsítés művelete

A *Brueckner*-módszer ismertetését annak a kérdésnek a megválaszolásával zárjuk, hogy végeredményben ez az elmélet mely gráfok járulékait hanyagolja el.

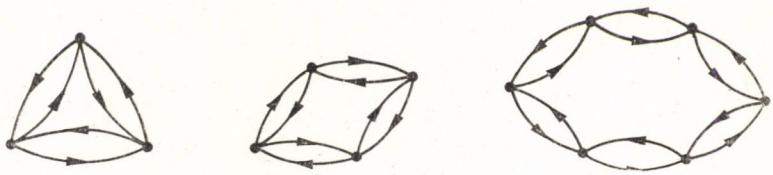
Gráfegyszerűsítésnek nevezzük azt az eljárást, amellyel egy gráf rendjét csökkentjük. A gráfegyszerűsítést a 125. ábra szerinti ún. elemi gráfegyszerűsítő lépések alkalmazásával valósítjuk meg. Azt a gráfot, amely már nem egyszerűsíthető, gráfváznak nevezzük. Mivel a *Brueckner*-gráfok a *Bethe—Goldstone*-gráfok „felöltöz-



126. ábra. A Bethe—Goldstone-gráfok gráfvázai

tetett" változatai voltak, s a „felöltöztetés" az elemi gráfegyszerűsítő lépések inverz alkalmazásával elérhető, a kétféle gráftípus gráfváza megegyezik. A *Bethe—Goldstone*-féle gráfok gráfváza a legalacsonyabb közelítésű esetben, tehát amikor a legkevesebb belső lyukvonalszámú gráfokat tekintjük, a 126. ábrán láthatók. A *Brueckner*-módszer tehát a felösszegzésnél figyelmen kívül hagyja mindazokat a gráfokat, amelyeknek gráfváza nem tartozik a 126. ábrán bemutatott típusba. Ilyen gráf pedig van. Maradjunk egyelőre az alapállapotgráfoknál. Gyűrűgráfoknak nevezzük azokat az összefüggő alapállapot-gráfokat, amelyeknek egyenlő-

számú részecske, illetve lyukvonala van. Néhány gyűrűgráf a 127. ábrán látható. A *Brueckner*-módszer tehát nem tekinti pl. az $n \geq 3$ rendű gyűrűgráffal rendelkező gráfvázú gráfokat, de nem tekinti például a 128. ábra szerintieket sem.



127. ábra. Gyűrűgráfok



128. ábra. A Brueckner-módszer által elhanyagolt negyedrendű gráfok

12. §. Fermi-gázok és folyadékok

Legyen a rendszer N számú és M tömegű fermion, melyek egy Ω térfogatba vannak bezárva. Az egyszerűség kedvéért a részecskék spinváltozójától eltekintünk; ennek figyelembevétele semmilyen elvi nehézséget nem okoz.

Vizsgálataink körét a felületi effektusok tanulmányozására nem terjesztjük ki, tehát feltételezzük, hogy $N \to \infty$, $\Omega \to \infty$, kikötve, hogy

$$\frac{N}{\Omega} = \rho \tag{30.12.1}$$

véges.

Az ideális rendszer *Hamilton*-operátora

$$H_0 = -\frac{1}{2M} \sum_{i=1}^{N} \Delta_i, \tag{30.12.2}$$

most és a továbbiakban is $h = 2\pi$ egységekben fogunk számolni. A fermionok hullámfüggvénye, illetve energiája

$$\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}, \tag{30.12.3}$$

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2M}. \tag{30.12.4}$$

Az általánosság megszorítása nélkül feltehető, hogy az Ω kockatérfogat, amelynek élhosszúsága L. Ekkor

$$\Omega = L^3,$$

$$(\mathbf{p})_i = 2\pi \frac{n_i}{L}. \quad (i = x, y, z)$$

A reális rendszer $V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ kölcsönhatási potenciáljára egyetlen feltevést teszünk

$$V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j).$$

A számításainkban előforduló új típusú jelölések és számolási elhanyagolások a következőek:

a) A 3. §-ban rögzítettük az l, k, m betűk jelentését. A kvantumállapot jelölésére a továbbiakban a vektort használjuk, de hogy számításainkban a részecske- illetve lyukállapotokat mégis külön tudjuk választani, bevezetjük a betöltési függvényt

$$n(\mathbf{p}) = \begin{cases} 1, & \text{ha } |\mathbf{p}| \leq p_F, \\ 0, & \text{ha } |\mathbf{p}| > p_F, \end{cases} \tag{30.12.5}$$

ahol p_F a *Fermi*-impulzus. Ez a következő átírásokat jelenti:

$$\sum_m \{m, \dots\} \to \sum_{\mathbf{p}} n(\mathbf{p}) \{\mathbf{p}, \dots\},$$

$$\sum_k \{k, \dots\} \to \sum_{\mathbf{p}} (1 - n(\mathbf{p})) \{\mathbf{p}, \dots\}.$$

Azaz például

$$N = \sum_{\mathbf{p}} n(\mathbf{p}),$$

$$E_0 = \sum_{\mathbf{p}} n(\mathbf{p}) \varepsilon(\mathbf{p}). \tag{30.12.6}$$

b) Formuláinkban igen sokszor előfordul a $\mathbf{p}$-re való összegzés. Mivel nagy Ω esetén a lehetséges impulzusállapotok az impulzustérben igen sűrűn helyezkednek el, az előforduló összegeket integrálközelítő összegként kezeljük, s helyettük a megfelelő integrálokat fogjuk használni. Formálisan

$$\sum_{\mathbf{p}} F(\mathbf{p}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{p} F(\mathbf{p}) \,. \tag{30.12.7}$$

Alkalmazásként N, ρ, E és az $<\varepsilon>$ átlag-energiaértéket kifejezzük a *Fermi*-impulzus segítségével

$$N = \sum_{\mathbf{p}} n(\mathbf{p}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int n(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{p_F} p^2 4\pi dp = \frac{\Omega}{6\pi^2} p_F^3 \,,$$

$$\rho = \frac{p_F^3}{6\pi^2} \,, \tag{30.12.8}$$

$$E_0 = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p}) n(\mathbf{p}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{p_F} \frac{1}{2M} p^2 \cdot p^2 4\pi dp = \frac{\Omega}{20\pi^2 M} p_F^5 \,, \tag{30.12.9}$$

s végül

$$<\varepsilon> = \frac{E_0}{N} = \frac{3}{5}\frac{p_F^2}{2M}. \tag{30.12.10}$$

A *Goldstone*- illetve *Hugenholtz*-formulák számítása előtt kimutatjuk, hogy esetünkben az impulzus megmaradási törvényére bizonyos formában tekintettel kell lenni. Ennek fontos következménye, hogy a gráfvonalakra való összegzésnél egy redukciót vezethetünk be.

A gráfok járulékainak kiszámításánál előfordul a

$$(\mathbf{p}_1'\mathbf{p}_2' \mid V \mid \mathbf{p}_1\mathbf{p}_2) \tag{30.12.11}$$

mátrixelem. A P_r koordinátafelcserélési operátor bevezetésével (29.6.42) és (12.3) alapján

$$(\mathbf{p}_1'\mathbf{p}_2' \mid V \mid \mathbf{p}_1\mathbf{p}_2) = \frac{1}{\Omega^2}\iint e^{-i\mathbf{p}_1'\mathbf{r}_1}e^{-i\mathbf{p}_2'\mathbf{r}_2}V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)(1 - P_r)e^{i\mathbf{p}_1\mathbf{r}_1}e^{i\mathbf{p}_2\mathbf{r}_2}d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2. \tag{30.12.12}$$

Legyen

$$\begin{aligned}
\mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \\
\mathbf{R} &= \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \\
\mathbf{p}' &= \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_2'), \\
\mathbf{P}' &= \mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2', \\
\mathbf{p} &= \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2), \\
\mathbf{P} &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 .
\end{aligned} \tag{30.12.13}$$

Így

$$\mathbf{p}_1\mathbf{r}_1 + \mathbf{p}_2\mathbf{r}_2 = \mathbf{p}\mathbf{r} + \mathbf{P}\mathbf{R} \tag{30.12.14}$$

és hasonló összefüggés írható fel a „vesszős" impulzusokra. A fentiek behelyettesítésével

$$(\mathbf{p}_1'\mathbf{p}_2' \mid V \mid \mathbf{p}_1\mathbf{p}_2) = \frac{1}{\Omega^2}\iint e^{-i\mathbf{P}'\mathbf{R}}e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}}V(\mathbf{r})(1 - P_r)e^{i\mathbf{P}\mathbf{R}}e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}d^3\mathbf{R}d^3\mathbf{r}.$$

Mivel a P_r operátor az exp ($i\mathbf{PR}$)-re nem hat, az **R**-re vonatkozó integrál leválasztható. Ugyanakkor

$$\int e^{i(\mathbf{P}-\mathbf{P}')\mathbf{R}}d^3\mathbf{R} = \Omega\delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}'),$$

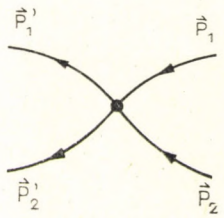
azaz végeredményben

$$(\mathbf{p}_1'\mathbf{p}_2' \mid V \mid \mathbf{p}_1\mathbf{p}_2) = \frac{1}{\Omega}\delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}')(\mathbf{p}' \mid V \mid \mathbf{p}), \tag{30.12.16}$$

ahol

$$(\mathbf{p}' \mid V \mid \mathbf{p}) = \int e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}} V(\mathbf{r})\,(1 - P_{\cdot})e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}\,. \tag{30.12.17}$$

A (12.16) formula azt jelenti, hogy a felösszegzésnél eleve csak olyan impulzusokra kell tekintettel lenni, amelyekre $\mathbf{P} = \mathbf{P}'$, illetve $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2$ igaz, tehát a „bemenő" és „kimenő" vonalak összimpulzusa állandó. (129. ábra) Más szavak-



129. ábra. Az impulzusmegmaradási törvény szerint $\mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$

kal, az impulzusmegmaradás minden „kölcsönhatásban", minden kölcsönhatási pontban teljesül.

13. §. Fermi-folyadékok alapállapota

A (6.11) *Goldstone* I. formulákat, azaz a W_0 energiát és N_0 állapotvalószínűséget számítjuk ki.

Két fontos összefüggést fogunk felhasználni

$$E_0 = \Omega \tilde{E}_0(p_F), \tag{30.13.1}$$

$$R_c(E_0 + z) = \Omega \tilde{R}_c(z, p_F), \tag{30.13.2}$$

ahol $\tilde{E}_0(p_F)$ és $\tilde{R}_c(z, p_F)$ az Ω térfogattól egyaránt függetlenek.

A (13.1) összefüggést (12.9) alatt már bebizonyítottuk.

$$\tilde{E}_0(p_F) = \frac{1}{20\pi^2 M} p_F^5\,. \tag{30.13.3}$$

A (13.2) összefüggés bizonyítására vizsgáljuk meg $R_c^{(n)}(z)$-t, tehát azt a járulékot, amit az n-edrendű gráfok szolgáltatnak $R_c(z)$ értékéhez.

$$R^{(n)}(z) = \underbrace{V}_{1}(z - H_0)^{-1}\underbrace{V}_{2} \ldots \underbrace{V}_{n-1}(z - H_0)^{-1}\underbrace{V}_{n}. \tag{30.13.4}$$

(3.1) és (3.12) felhasználásával kapjuk, hogy

$$R_c^{(n)}(z) = \langle \Phi_0 \mid R^{(n)}(z) \mid \Phi_0 \rangle_c$$

illetve

$$R_c^{(n)}(z) = \pm \sum_{\substack{\text{belső} \\ \text{vonalak}}} (l_1 n_1 \mid V \mid r_1 s_1)\,(z - E_{\gamma_1})^{-1} \ldots (z - E_{\gamma_{n-1}})^{-1}(l_n n_n \mid V \mid r_n s_n)\,. \tag{30.13.5}$$

Most az Ω-tól való függést részletezzük. (13.5)-ben Ω fellép a (12.7) közelítés alkalmazásakor, a $(z - H_0)^{-1}$ propagátor közbenső állapotbeli értékében, valamint a V_i kölcsönhatási potenciál $(l_i n_i \mid V \mid r_i s_i)$ mátrixelemeiben. Ezeket sorra megvizsgáljuk.

a) A $\Sigma_p \to \int d^3\mathbf{p}$ áttéréskor, mint (12.7) mutatja, az Ω annyiadik hatványon fog előfordulni, ahányszoros összeg a Σ belső vonalak. Az n-ed rendű alapállapotgráf minden vonala belső vonal. Számuk, mivel minden kölcsönhatási pontban négy vonal találkozik, $2n$. A (12.16) impulzusmegmaradás miatt a független belső vonalak száma ennél kevesebb. Ha $(n - 1)$ kölcsönhatási pontban az impulzusmegmaradás teljesül, teljesül az n-edikben is. Tehát a $2n$ számú belső vonalra $(n - 1)$ „mellékfeltétel" áll. Így a független belső vonalak száma

$$2n - (n - 1) = n + 1.$$

Vagyis a (12.7) közelítéskor (13.5)-höz egy Ω^{n+1}-es faktor járul.

b) A propagátor értéke a közbenső állapotban

$$(z - E_{\gamma i})^{-1} = (z - [E_0 + \varepsilon(k_{i1}) + \varepsilon(k_{i2}) + \ldots - \varepsilon(m_{i_1}) - \varepsilon(m_{i_2}) - \ldots])^{-1}.$$

(13.1) illetve (12.4) mutatja, hogy E_0 függ és $\varepsilon(\mathbf{p} = k_i, m_i)$ független az Ω-tól. Ha tehát $R_c^n(z)$ argumentumául a $z + E_0$ változót írjuk, a propagátor értéke

$$(z - [\varepsilon(k_{i1}) + \varepsilon(k_{i2}) + \ldots - \varepsilon(m_{i1}) - \varepsilon(m_{i2}) - \ldots])^{-1}, \qquad (30.13.7)$$

azaz a térfogattól független.

c) (12.16) mutatja, hogy a $V(r)$ mátrixelemei annyi Ω^{-1}-t hoznak be, ahányszor V az $R^{(n)}(z)$-ben előfordul, azaz amennyi a gráf rendje. Ezek alapján

$$R_c^{(n)}(z + E_0) = \frac{\Omega^{n+1}}{(2\pi)^{3(n+1)}} \frac{1}{\Omega^n} \int_1 \ldots \int_{n+1} \frac{1}{2^p} (\mathbf{p}'_{(1)} \mid V \mid \mathbf{p}_{(1)}) \ldots$$

$$\ldots (z - [\varepsilon(k_1) + \ldots - \varepsilon(m_1) - \ldots])^{-1} d^3\mathbf{p}_{(1)} \ldots \qquad (30.13.8)$$

Tehát $R_c^{(n)}(z + E_0)$ valóban arányos a térfogattal. Mivel pedig ez a gráf rendjétől függetlenül igaz, (13.2) valóban teljesül.

Alapállapot-energia

$$W_0 = E_0 + R_c(E_0),$$

(13.1), (13.2) alapján

$$W_0 = \Omega[\tilde{E}_0(p_F) + \tilde{R}_c(0, p_F)]. \qquad (30.13.9)$$

(12.9) és (12.8) felhasználásával

$$W_0 = NE_b(p_F),$$

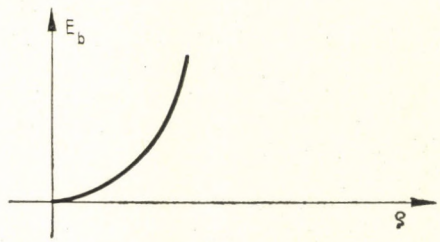
ahol

$$E_b(p_F) = \frac{3}{5} \frac{1}{2M} p_F^2 + \frac{6\pi^2}{p_F^3} \tilde{R}_c(0, p_F), \qquad (30.13.10)$$

illetve, mivel $<\varepsilon> = \frac{3}{5}\varepsilon_F$ és $p_F = p_F(\rho)$,

$$E_b(\rho) = <\varepsilon(\rho)> + \frac{1}{\rho}\tilde{R}_c(0, \rho)\,. \tag{30.13.11}$$

A fermionrendszert *Fermi*-gáznak nevezzük, ha $E_b(\rho)$ a ρ-nak monoton növekvő pozitív függvénye (130. ábra). Ez az eset fordul elő $V(r) > 0$ taszító kölcsönhatás



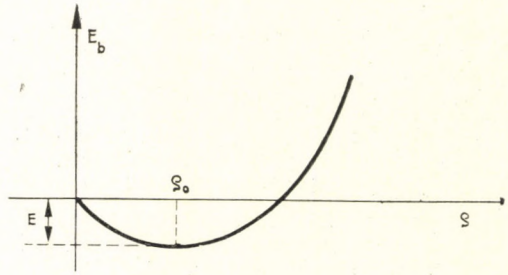
130. ábra. E_b mint ϱ függvénye Fermi-gázok esetén

esetén. Termodinamikai összefüggések felhasználásával a *Fermi*-gázok állapotegyenlete illetve kompresszibilitása:

$$p(\rho) = -\left(\frac{\partial W_0}{\partial \Omega}\right)_N = \rho \frac{dE_b(\rho)}{d\rho}, \tag{30.13.12}$$

$$\frac{1}{\kappa} = -\Omega\left(\frac{\partial p}{\partial \Omega}\right)_N = \rho^3 \frac{d^2E_b(\rho)}{d\rho^2} + 2\rho^2 \frac{dE_b(\rho)}{d\rho}\,. \tag{30.13.13}$$

A fermionrendszert *Fermi*-folyadéknak nevezzük, ha $E_b(\rho)$-nak minimuma van a 131. ábrán látható módon. Ez az úgynevezett telített kölcsönhatás esete. A ρ_0-at



131. ábra. E_b mint ϱ függvénye Fermi-folyadékok esetén

egyensúlyi sűrűségnek, E-t az egyrészecskére vonatkozó párolgási hőnek nevezzük. Az egyensúlyi sűrűséget a

$$\frac{dE_b(\rho)}{d\rho} = 0 \tag{30.13.14}$$

egyenlet gyöke adja.

$$E = E_b(\rho_0). \tag{30.13.15}$$

$\rho > \rho_0$ esetén $p(\rho) > 0$, ez az összenyomott folyadékállapot. $\rho < \rho_0$-ról annyit mondhatunk, „nincs bizonyítva, hogy ennek nincs fizikai jelentése".

A kompresszibilitás az egyensúlyi állapotban

$$\left(\frac{1}{\kappa}\right)_{\rho=\rho_0} = \rho_0^3 \left(\frac{d^2E_b}{d\rho^2}\right)_{\rho=\rho_0}. \tag{30.13.16}$$

Egyelőre nyitott kérdés, hogy milyen $V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ kölcsönhatási potenciál vezet telített illetve telítetlen kölcsönhatásra.

Állapotvalószínűség

Az N_0 valószínűség (6.11) szerint

$$N_0 = \exp\left(\frac{dR_c(z)}{dz}\right)_{z=E_0}$$

Ha tehát

$$R_c(z + E_0) = \Omega\tilde{R}_c(z, p_F), \tag{30.13.17}$$

írható, hogy

$$N_0 = e^{\Omega\tilde{R}_c(0,\, p_F)}, \quad \tilde{R}_c'(0, p_F) = \left(\frac{d\tilde{R}_c(z, p_F)}{dz}\right)_{z=0}$$

(12.8)-at felhasználva

$$N_0 = \lambda^N(\rho), \tag{30.13.18}$$

ahol

$$\lambda(\rho) = \exp\left[\frac{6\pi^2}{p_F^3}\tilde{R}_c'(0, p_F)\right].$$

Mivel általában $\tilde{R}_c'(0, p_F) < 0$, ezért

$$\lim_{\Omega\to\infty} N_0 = 0. \tag{30.13.19}$$

Tehát annak valószínűsége, hogy a véges sűrűségű *Fermi*-folyadék kölcsönhatásmentesen viselkedik, ha a térfogat nő, exponenciálisan zérushoz tart.

14. §. Kvázirészecske gerjesztés Fermi-folyadékban

A (7.6) formula új jelöléseinkkel

$$\bar{\varepsilon}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + <\mathbf{p} \mid R\big(E_0 + \bar{\varepsilon}(\mathbf{p})\big) \mid \mathbf{p}>_{iC}. \tag{30.14.1}$$

A kvázirészecske-energia számítását a *Brueckner*-módszer felhasználásával végezzük el. Előbb azonban kimutatjuk, hogy a kvázirészecske-spektrum az Ω térfogattól független, csak az anyagsűrűségtől, illetve *Fermi*-impulzustól függ.

$$\bar{\varepsilon}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + \tilde{R}_{\mathbf{p}}(\bar{\varepsilon}(\mathbf{p}), p_F). \tag{30.14.2}$$

Állításunk igazolására csak annyit kell belátni, hogy $<\mathbf{p} \mid R(E_0 + \bar{\varepsilon}(\mathbf{p})) \mid \mathbf{p}>_{iC}$ nem függ Ω-tól. Az előző fejezetben követett gondolatmenet analóg megismétléseként viszont elegendő bebizonyítani, hogy

$$R_{\mathbf{p}}(z) = <\mathbf{p} \mid R(z + E_0) \mid \mathbf{p}>_{iC} \tag{30.14.3}$$

tetszőleges rendű gráfcsoport esetén független a térfogattól. Tekintsünk tehát egy n-ed rendű gráfot. $R(z)$ (6.5) definíciójából (3.12), valamint (3.1) felhasználásával

$$R_{\mathbf{p}}^{(n)}(z) = \pm \frac{1}{2^r} \sum_{\substack{\text{belső} \\ \text{vonal}}} (l_1 n_1 \mid V \mid r_1 s_1)\,(z + E_0 - E_{\gamma_1})^{-1} \ldots (l_n n_n \mid V \mid r_n s_n)\,. \tag{30.14.4}$$

Az Ω térfogat a (14.4) formulában ismét három helyen szerepelhet, a (12.7) közelítésben, a $(z - H_0)^{-1}$ propagátorok közbenső állapotbeli értékében, valamint a $(l_i n_i \mid V \mid r_i s_i)$ mátrixelemben.

Sorra véve az egyes eseteket:

a) Egy n-ed rendű gráf, amelynek a kezdeti és végállapothoz egy-egy külső vonala van,

$$\frac{1}{2}[4(n-2) + 2\cdot 3] = 2n - 1$$

belső vonalat tartalmaz. (Az első és n-edik kölcsönhatási ponthoz 3–3 belső vonal csatlakozik.) Mivel viszont a (12.16) impulzusmegmaradás $(n-1)$ „mellékfeltételt" jelent, a $\Sigma_{\text{belső vonalak}}$ végeredményben n-szeres összegzésből áll. A (12.7) közelítést alkalmazva (14.4)-ben megjelenik egy Ω^n faktor.

b) Ha argumentumként z helyett $z + E_0$-t veszünk, a propagátor közbenső állapotbeli értéke nem tartalmazza az Ω-tól függő E_0-t, azaz ezek a kifejezések nem függenek a térfogattól.

c) A (14.4)-ben n számú $(l_i n_i \mid V \mid r_i s_i)$ típusú tényező van. (12.16) mutatja, hogy ezek egyenként Ω^{-1}-val arányosak. E mátrixelemek tehát, a térfogatfüggést tekintve egy Ω^{-n} faktort eredményeznek.

A fentiek összefoglalásaként

$$R_{\mathbf{p}}^{(n)}(z) = \Omega^0 \tilde{R}_{\mathbf{p}}^{(n)}(z; p_F),$$

ahol

$$R_{\mathbf{p}}^{(n)}(z, p_F) = \pm \frac{1}{2} \int \ldots \int (\mathbf{p}'_{(1)} \mid V \mid \mathbf{p}_{(1)}) \ldots (z - \bar{\varepsilon}(k_1) - \ldots + \bar{\varepsilon}(m_1) + \ldots)^{-1} \ldots d^3\mathbf{p}_{(1)} \ldots$$

független a térfogattól. Általában is

$$R_{\mathbf{p}}(z) = \tilde{R}_{\mathbf{p}}(z, p_F),$$

tehát a kvázirészecske-energiára azt kapjuk, hogy

$$\bar{\varepsilon}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + \tilde{R}_{\mathbf{p}}(\bar{\varepsilon}(\mathbf{p}), p_F). \tag{30.14.5}$$

Ez az egyenlet $\bar{\varepsilon}(\mathbf{p})$-ra implicit egyenlet és nem tartalmazza Ω-t. Eredményeink fizikailag azt jelentik, hogy

1. A kvázirészecske-spektrum $\Omega \to \infty$ esetén is létezik, véges értékű.
2. Mivel $\bar{\varepsilon}(\mathbf{p})$ függ p_F-től, azaz (12.8) szerint ρ-tól, ha a sűrűség például összenyomás miatt megváltozik, megváltozik a kvázirészecske spektrum is.

Röviden vázoljuk, hogy a *Brueckner*-egyenletek felhasználásával hogyan számolható ki $\bar{\varepsilon}(\mathbf{p})$. E feladatot két lépésben oldjuk meg. Előbb speciális esetünkre átírjuk a (11.7) és (11.9) egyenleteket, majd bevezetünk olyan új mennyiségeket, amelyek felhasználásával ezek az egyenletek például iterációs úton megoldhatók. Az idézett *Brueckner*-egyenletek

$$(\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2 \mid K_B \mid \mathbf{p}_3\mathbf{p}_4) = (\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2 \mid V \mid \mathbf{p}_3\mathbf{p}_4) + \\ + \frac{1}{2} \sum_{|\mathbf{p}_5|,\, |\mathbf{p}_6| > p_F} \frac{(\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2 \mid V \mid \mathbf{p}_5\mathbf{p}_6)\,(\mathbf{p}_5\mathbf{p}_6 \mid K_B \mid \mathbf{p}_3\mathbf{p}_4)}{\bar{\varepsilon}(\mathbf{p}_3) + \bar{\varepsilon}(\mathbf{p}_4) - \bar{\varepsilon}(\mathbf{p}_5) - \bar{\varepsilon}(\mathbf{p}_6)} \tag{30.14.6}$$

$$\bar{\varepsilon}(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}) + \sum_{|\mathbf{p}^*| < p_F} (\mathbf{p}\mathbf{p}^* \mid K_B \mid \mathbf{p}\mathbf{p}^*). \tag{30.14.7}$$

A (14.6) egyenlet megoldását keressük a következő alakban

$$(\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2 \mid K_B \mid \mathbf{p}_3\mathbf{p}_4) = \frac{1}{\Omega}\delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)\left(\frac{1}{2}\{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\} \mid K_B \mid \frac{1}{2}\{\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4\}\right). \tag{30.14.8}$$

Ekkor (14.6), tekintettel (12.16) alatti eredményünkre

$$\Omega^{-1}\delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}')\,(\mathbf{p} \mid K_B \mid \mathbf{p}') = \Omega^{-1}\delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}')\,(\mathbf{p} \mid V \mid \mathbf{p}') + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}''\mathbf{P}''} \left(1 - n\left(\frac{1}{2}\mathbf{P}'' + \mathbf{p}''\right)\right)\left(1 - n\left(\frac{1}{2}\mathbf{P}'' - \mathbf{p}''\right)\right) \times \\ \times \Omega^{-2} \frac{\delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}'')\,(\mathbf{p} \mid V \mid \mathbf{p}'')\,\delta(\mathbf{P}'' - \mathbf{P}')\,(\mathbf{p}'' \mid K_B \mid \mathbf{p}')}{\bar{\varepsilon}\left(\frac{1}{2}\mathbf{P}' + \mathbf{p}'\right) + \bar{\varepsilon}\left(\frac{1}{2}\mathbf{P}' - \mathbf{p}'\right) - \bar{\varepsilon}\left(\frac{1}{2}\mathbf{P}'' + \mathbf{p}''\right) - \bar{\varepsilon}\left(\frac{1}{2}\mathbf{P}'' - \mathbf{p}''\right)} \tag{30.14.9}$$

A képlet felírásakor egyszerűsítő jelöléseket vezettünk be

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \qquad \mathbf{p}' = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4),$$

$$\mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2), \qquad \mathbf{P}'' = \mathbf{p}_5 + \mathbf{p}_6, \tag{30.14.10}$$

$$\mathbf{P}' = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4. \qquad \mathbf{p}'' = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_5 - \mathbf{p}_6).$$

A betöltési függvény beiktatásával biztosítottuk, hogy a *Fermi*-tengerbeli állapotok az összegzésben ténylegesen ne forduljanak elő. A (14.10)-beli összegben előfordul $\delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}'')$, tehát a $\mathbf{P}''$-re való összegből csupán a $\mathbf{P}'' = \mathbf{P}$ tag marad meg. A delták tulajdonságai alapján

$$\delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}'')\delta(\mathbf{P}' - \mathbf{P}'') = \delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}').$$

Behelyettesítések után, szorozva az Ω térfogattal és alkalmazva a (12.7) közelítést,

$$(\mathbf{p} \mid K_B \mid \mathbf{p}') = (\mathbf{p} \mid V \mid \mathbf{p}') + \frac{1}{2}\int \frac{d^3\mathbf{p}''}{(2\pi)^3} \times$$

$$\times \frac{(\mathbf{p} \mid V \mid \mathbf{p}'')f(\mathbf{P}, \mathbf{p}'')(\mathbf{p}'' \mid K_B \mid \mathbf{p}')}{\bar{\varepsilon}\left(\frac{1}{2}\mathbf{P} + \mathbf{p}'\right) + \bar{\varepsilon}\left(\frac{1}{2}\mathbf{P} - \mathbf{p}'\right) - \bar{\varepsilon}\left(\frac{1}{2}\mathbf{P} + \mathbf{p}''\right) - \bar{\varepsilon}\left(\frac{1}{2}\mathbf{P} - \mathbf{p}''\right)}. \tag{30.14.11}$$

Az egyenlet mindkét oldalán előforduló $\delta(\mathbf{P} - \mathbf{P}')$ tényezőt nem írtuk ki, és bevezettük az

$$f(\mathbf{P}, \mathbf{p}'') = \left(1 - n\left(\frac{1}{2}\mathbf{P} - \mathbf{p}''\right)\right)\left(1 - n\left(\frac{1}{2}\mathbf{P} - \mathbf{p}''\right)\right) \tag{30.14.12}$$

jelölést. Az $f(\mathbf{P}, \mathbf{p}'')$ jelentése

$$f(\mathbf{P},\mathbf{p}'') = \begin{cases} 1, & \text{ha } \left|\frac{1}{2}\mathbf{P} \pm \mathbf{p}''\right| > p_F, \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases}$$

A *Brueckner*-mátrix ismeretében a kvázirészecske-energia (14.7)-ből (14.8) feltételezésével

$$\bar{\varepsilon}(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}) + \sum_{\mathbf{p}^*} n(\mathbf{p}^*)\,\Omega^{-1}\,\delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}^* - \mathbf{p} - \mathbf{p}^*)\left(\frac{1}{2}[\mathbf{p} - \mathbf{p}^*] \mid K_B \mid \frac{1}{2}[\mathbf{p} - \mathbf{p}^*]\right), \tag{30.14.13}$$

illetve az $\frac{1}{2}[\mathbf{p} - \mathbf{p}^*] = \mathbf{p}'$ jelöléssel a (14.7) közelítésben

$$\bar{\varepsilon}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2M}\mathbf{p}^2 + \frac{1}{2(2\pi)^3}\int n(\mathbf{p}^*)(\mathbf{p}' \mid K_B \mid \mathbf{p}')d^3\mathbf{p}^*. \tag{30.14.14}$$

Az egyrészecskére eső belső energia

$$E_b(\rho) = \frac{1}{\rho} \frac{W_0}{\Omega}.$$

A *Brueckner*-elméletben teljesülő (11.12) összefüggés felhasználásával

$$E_b(p_F) = \frac{1}{2\rho} \sum_{\mathbf{p}} \frac{n(\mathbf{p})}{\Omega} \left(\varepsilon(\mathbf{p}) + \bar{\varepsilon}(\mathbf{p})\right).$$

Ez a (12.7) közelítésben, tekintettel (12.8)-ra

$$E_b(p_F) = \frac{3}{2p_F^3} \int_0^{p_F} \left(\frac{p^2}{2M} + \bar{\varepsilon}(\mathbf{p})\right) p^2 dp. \qquad (30.14.15)$$

15. §. Az egyes közelítő módszerek alkalmazási köre, kis és nagy sűrűségű határeset

A közelítő módszerek ismertetése során nem tértünk ki részletesen arra, hogy az egyes speciális közelítések alkalmazási körét hogyan lehet megvonni. Végezetül, a részletszámításokat mellőzve, foglalkozunk ezzel a problémával.

Az alapállapot energiájára illetve az egy részecskére eső belső energiára a kis és nagy sűrűségű határesetben fontos megállapítások tehetők.

Kis sűrűségű rendszerek

(13.10) szerint

$$E_b(p_F) = \frac{3}{5} \frac{p_F^2}{2M} + 6\pi^2 \frac{\tilde{R}_c(0, p_F)}{p_F^3}. \qquad (30.15.1)$$

$\tilde{R}_c(0, p_F)$ kifejezése, mint (13.8) mutatja, a $(p \mid V \mid p')$ szorzatainak integrálásából áll. $\rho \to 0$ esetén $p_F \to 0$, tehát a lyukimpulzusok integrációs tartománya egy pontra zsugorodik, míg a részecskeimpulzusoké kiterjed az egész térre. Ezért $\rho \to 0$ esettel úgy számolhatunk, hogy a lyukimpulzusokat zérusnak vesszük, a részecskeimpulzusokra való integrálás tartományát pedig kiterjesztjük az egész térre.

Kimutatható, hogy $\tilde{R}_c(0, p_F)$-nek egy n-ed rendű gráftól származó járuléka

$$\tilde{R}_c^{(n)}(0, p_F) = a_c p_F^{3q}, \qquad (30.15.2)$$

ahol q a gráf lyukvonalainak száma. Tehát

$$E_b(p_F) = \frac{3}{5} \varepsilon_F + 6\pi^2 \sum_c a_c p_F^{3(q-1)}. \qquad (30.15.3)$$

Formulánk mutatja, hogy azok a gráfok szolgáltatják a domináns tagokat, me-

lyekre q a lehető legkisebb. Alapállapotgráfoknál $q = 2$. Mivel pedig a *Bethe–Goldstone*-módszert épp úgy definiáltuk, hogy csak kevés belső lyukvonalat tartalmazó gráfokat vesz figyelembe, a *Bethe–Goldstone*-módszer a kis sűrűségű, „híg" fizikai rendszerek vizsgálatára jó:

$$E_b(\rho) = a'_0\rho^{2/3} + a'_1\rho + \ldots, \tag{30.15.4}$$

ahol $a'_0 = \dfrac{3(6\pi^2)^{2/3}}{10M}$, és $a'_1 = (6\pi^2)^2 \sum_{\substack{\text{Bethe-}\\ \text{Goldstone}\\ \text{gráfok}}} a_c$.

Nagy sűrűségű rendszerek

Hugenholtz bebizonyította, hogy $\rho \to \infty$ esetén egy n-ed rendű gráf $\tilde{R}_c(0, p_F)$-hez

$$\tilde{R}_c^{(n)}(0, p_F) = \frac{b_c}{6\pi^2} p_F^{2\nu+1-n} \tag{30.15.5}$$

járulékot szolgáltat. ν a zárt hurokvonalak száma. Az $E_b(p_F)$ energiára írható:

$$E_b(p_F) = \frac{3}{5}\varepsilon_F + \sum_c b_c p_F^{2\nu-2-n}. \tag{30.15.6}$$

Tehát adott rendű gráfok közül azok szolgáltatják a domináns tagokat, amelyekben $\nu = \nu(n)$ maximális, azaz $\nu = n$. Ezek a gyűrűgráfok. Csak ezeket tekintve

$$E_b(p_F) = \frac{3}{5}\varepsilon_F + \sum_{\substack{\text{gyűrű-}\\ \text{gráfok}}} b_c p_F^{n-2}. \tag{30.15.7}$$

A *Bethe–Goldstone*- és *Hugenholtz*-módszerek $\rho \to \infty$ esetén való eltérő viselkedését szemléletesen mutatja az alábbi táblázat, ahol feltüntettük, hogy az egyes módszerekben a növekvő rendű gráfok p_F hanyadik hatványával arányos járulékot adnak. $n \geq 3$ esettől kezdve ellentétes tendencia jelentkezik

Aszimptotikus viselkedés $p_F \to \infty$ esetén

a gráfok rendje	0	1	2	3	4	5	6
Hugenholtz	p_F^2	p_F^3	konst.	p_F	p_F^2	p_F^3	p_F^4
Bethe—Goldstone	p_F^2	p_F^3	konst.	p_F^{-1}	p_F^{-2}	p_F^{-3}	p_F^{-4}

A *Brueckner*-módszer alkalmazhatósági körét illetően nincsenek ilyen biztos támpontok. Mivel viszont a *Brueckner*-módszer a kis sűrűségű esetre jó *Bethe–Goldstone*-módszer továbbfejlesztése, kis sűrűségű rendszerekre valószínűleg jó; nagy sűrűségű rendszerekre való alkalmazása problematikus lehet.

AJÁNLOTT IRODALOM

Általános elméleti fizikai művek

FLÜGGE, S. Lehrbuch der theoretischen Pnysik. Springer, Berlin 1961.
HUND, F. Einführung in die theoretische Physik. Bibl. Inst. Leipzig 1950.
JOOS, G. Lehrbuch der theoretischen Physik. Akad. Verlagsges. Leipzig 1950.
SCHÄFER, C. Einführung in die theoretische Physik. De Grugtner, Berlin 1955.
SOMMERFELD, A. Vorlesungen über theoretische Physik. Dietrich'sche Verlagsbuchhandlung 1952.
WEIZEL, W. Lehrbuch der theoretischen Physik. Springer, Berlin 1961.

Mechanika

BUDÓ Á. Mechanika. Tankönyvkiadó, Budapest 1951.
CORBEN, H. C.—STEHLE, P. Classical Mechanics. Wiley, New York 1950.
GOLDSTEIN, H. Classical Mechanics. Addison-Wesley, Cambridge, Mass. 1950.
HALPERN, O. Relativitätsmechanik. Handb. d. Phys. Vol. V. Springer, Berlin 1927.
HAMEL, G. Theoretische Mechanik. Springer, Berlin 1949.
LANDAU, L. D. Lifshitz, E. M. Mechanics. Pergamon, London 1958.
LANDAU, L. D. Fluid Mechanics. Pergamon, London 1959.
LANDAU, L. D. Theory of Elasticity. Pergamon, London 1959.
MACMILLAN, W. D. Theoretical Mechanics. McGraw-Hill, New York—London 1936.
MOLLER, C. The Theory of Relativity. Oxford Univ. Press. 1952.
SNEDDON, J. N.—BERRY, D. S. The Classical Theory of Elasticity. Handb. d. Phys. Vol VI. Springer, Berlin 1958.
SYNGE, J. L. Classical Dynamics. Handb. d. Phys. Vol III/1. Springer, Berlin 1960.

Elektrodinamika

ABRAHAM, M.—BECKER, R. The Classical Theory of Electricity and Magnetism. Blackie & Son, London—Glasgow 1950.
BORN, M.—WOLF, E. Principles of Optics. Pergamon, London 1959.
FÖRSTERLING, K. Lehrbuch der Optik. Leipzig, 1928.
LANDAU, L. D.—LIFSHITZ, E. M. The Classical Theory of Fields. Pergamon, London 1959.
LANDAU, L. D. Electrodynamics of Continuous Media. Pergamon, London 1960.
NAGY K. Elektrodinamika. Tankönyvkiadó, Budapest 1968.
SIMONYI K. Villamosságtan. Akadémiai Kiadó, Budapest 1962.
SIMONYI K. Elméleti villamosságtan. Tankönyvkiadó, Budapest 1958.
STRATTON, J. A. Electromagnetic Theory. McGraw-Hill, New York 1941.

Termodinamika és statisztikus mechanika

BECKER, R. Theorie der Wärme. Springer, Berlin 1961.
BLATT, J. M.—WEISSKOPF, V. F. Theoretical Nuclear Physics. Wiley, New York 1952.
BORN, M.—KUN HUANG. Dynamical Theory of Cristal Lattices. Oxford 1954.

GUGGENHEIM, E. A. Thermodynamics. Amsterdam
HORVÁTH J. Termodinamika és statisztikai mechanika. Tankönyvkiadó, Budapest 1960.
KENNARD, E. H. Kinetic Theory of Gases. McGraw-Hill, New York 1938.
LANDAU, L. D.—LIFSHITZ, E. M. Statistical Physics. Pergamon, London 1958.
TER HAAR, D. Elements of Statistical Mechanics. Rinehart, New York 1954.
TOLMAN, R. C. Principles of Statistical Mechanics. Oxford 1938.
ZEMANSKY, M. W. Heat and Thermodynamics. McGraw-Hill. New York 1951.

Kvantummechanika

BETHE, H. A.—JACKIW, R. Intermediate Quantum Mechanics. 2nd ed. Benjamin, Inc., New York—Amsterdam 1968.
BLOHINCEV, D. I. A kvantummechanika alapjai. Tankönyvkiadó, Budapest 1952.
DAWIDOW, A. S. Quantenmechanik. Deutscher Verl. d. Wiss. 1967.
DIRAC, P. A. M. Quantum Mechanics, 4th ed. Clarendon Press, Oxford 1958.
FLÜGGE, S., HAND, D Phys. XXXV, XXXVI, XXXVII/1, XXXVII/2, Springer, Berlin, 1957, 1956, 1959, 1961.
FLÜGGE, S.—MARSCHALL, H. Rechenmethoden der Quantentheorie. Springer, Berlin 1965.
GOMBÁS P. Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik. Birkhäuser, Basel 1950.
GOMBÁS P. Az atom statisztikus elmélete és alkalmazásai. Akadémiai Kiadó, Budapest 1955.
GOMBÁS P. Pseudopotentiale. Springer, Wien 1967.
LANDAU, L. D.—LIFSHITZ, E. M. Quantum Mechanics-Non-relativistic Theory. Pergamon, London 1958.
MERZBACHER, E. Quantum Mechanics Wiley & Sons, New York—London 1961.
MESSIAH, A. Quantum Mechanics I—II. North-Holland Publ. Comp., Amsterdam 1961—1962.
MORRISON, H. L. The Quantum Theory of Many Particle System. Gordon-Breach, New York—London 1962.
MOTT, N. F.—MASSEY, H. S. W. The Theory of Atomic Collisions, 3rd ed. Clarendon Press, Oxford 1965.
SCHIFF, L. I. Quantum Mechanics, 2nd ed. McGraw-Hill, New York—London 1955.
SLATER, J. C. Quantum Theory of Atomic Structure I—II. McGraw-Hill, New York—London 1960.
SOMMERFELD, A. Atombau und Spektrallinien I—II, 3 Aufl. Vieweg & Sohn, Braunschweig 1953.

A, Á

α-bomlás II. 62, 367
α-részek szóródása II. 28, 393
α-részek szórási anomáliája II. 394
Aberráció I. 555
Abszolút entrópia I. 592
Abszolút hőmérsékleti skála I. 562
Abszolút idő I. 302
Abszolút nyugalomban levő tér I. 301
Abszolút zérus pont I. 593
Abszorbció index I. 459
Abszorbciós operátor II. 532, 533
Adiabatikus folyamat I. 576
Adiabatikus folyamat differenciálegyenlete I. 576
Adiabatikus kompresszió I. 570
Adiabatikus mágnesezés I. 571
Adjungált Dirac-egyenlet II. 416
Adjungált függvény II. 403, 408, 411
Adjungált operátor II. 437, 464, 533, 535
Aerodinamika alapegyenletei I. 276
Akusztikus rezgések II. 93
Alagúteffektus II. 277
Alakfaktor II. 397
Alapállapotgráf II. 583, 590, 591, 592, 602, 615, 522
Alapspinorok II. 253
d'Alembert-féle elv I. 110
Alkáli atomok színképe II. 431
Alkáli atomok termjei II. 213
Alkáli földfémek II. 50
Alkalohalogenid kristályok II. 78
Amaldi II. 572
Amplitudo I. 453
Amplitudo-mátrix II. 88
Amplitudo-vektor II. 104, 114
Anharmonikus lineáris oszcillátor II. 322
Anomális α-szórás II. 52
Anomális Zeeman-effektus II. 329, 431
Antilinearitás (skaláris szorzat) II. 485
Antineutrino II. 64, 419, 423
Antirészecske I. 328
Antiszimmetrizálás II. 527
Anyaghullám II. 234
Aperiodikus mozgás I. 62
Aperiodikus rezgőkör I. 438
Ar-atom II. 571
Aston II. 26, 33, 52
Aszimptotikus operátor II. 491, 500
Atommag belső energiája II. 51
Atommag impulzusmomentuma II. 55
Atommag mágneses momentuma II. 57
Atomok dimenziói II. 33
Atomok mágneses momentuma II. 39
Atomsugarak II. 21
Atomsúly II. 14, 32
Atom teljes impulzusmomentuma II. 217
Avogadro-szám I. 327, II. 135
Avogadro-törvény I. 567
Azimut I. 468
Azimutális kvantumszám II. 210, 307
Állapotegyenlet I. 564, II. 453, 458
Állapotegyenletek integrálhatósági feltételei I. 594
Állapotfüggvény I. 564, II. 432
Állapothatározók I. 559, 563
Állapotok szuperpozíciója II. 434, 452, 459
Állapotösszeg II. 143
Állapottér II. 444, 459, 474
Állapotvektor II. 433, 444
Állóhullám I. 475
Általános erőkomponens I. 127
Általános gázállandó I. 568
Általános koordináták I. 121
Általános (Riemann-) tér I. 138
Áramerősség I. 397
Áramsűrűség I. 397
Áramvonalak I. 274
Árnyékolási tényező II. 394, 396

Árnyékolt Coulomb-potenciál II. 394
Átfedési mátrix II. 342, 346
Átlagos felejtési idő II. 130
Átlagos szabad úthossz II. 124
Átmeneti fémek II. 76
Átmeneti valószínűségek II. 258, 495, 497

B

β-sugarak II. 17, 23, 27
Balmer-féle energiakifejezés II. 429
Barometrikus magassági formula I. 271
Bázis II. 434
Bázis-vektorok II. 434
Be-atom II. 576
Beesési merőleges I. 460
Beesési sík I. 460
Beesési szög I. 460
Belső energia II. 621
Belső erő I. 97
Belső kvantumszám II. 217, 328
Belső vonal II. 583, 584, 602, 618
Bemenő csatorna II. 72
Bemenő vonal II. 614
Bernoulli-egyenlet I. 279
Bernoulli-féle számok II. 189
Bethe II. 490, 576, 577
Bethe—Goldstone-gráf II. 610
Bethe—Goldstone-mátrix II. 603
Bethe—Goldstone-módszer II. 577, 602, 606, 608, 609, 622
Betöltési függvény II. 612, 620
Betöltési szám operátor II. 534, 544
Betöltési szám-reprezentáció II. 529, 532, 543, 581
Biot—Savart-törvény I. 415
Bloch II. 592
Bloch-szabály II. 591, 592, 598
Bogoljubov II. 577
Bohr, A. II. 577
Bohr, N. II. 13
Bohr-féle atommodel II. 205
Bohr-féle frekvenciafeltétel II. 39, 63, 206, 225
Bohr-féle kvantumfeltétel II. 206, 244, 429, 432
Bohr-féle magneton II. 41, 216, 218, 294
Boltzmann-állandó II. 134, 175
Boltzmann-féle egyenlet II. 134, 154
Bomlási állandó II. 67
Bomló állapot II. 365, 367, 369
Born I. 432, II. 77, 200, 203, 245
Born—Kármán-féle periodikus határfeltételek II. 94
Born-közelítés II. 390, 395
Born-modell II. 80
Bose II. 153
Bose—Einstein statisztika II. 153, 157, 159, 162, 179
Bose-gáz II. 157
Bose-részecske II. 523, 525, 530, 534
Boyle—Mariotte-törvény I. 271
Boyle-törvény I. 567, 597
Bozon II. 153
Bragg-féle formula I. 515
Brandley I. 557
Bravais II. 19
Bra-vektor II. 485
Breit II. 490
Breit—Wigner formula II. 366
Brewster-féle törvény I. 468
Brillouin-zóna II. 91, 107
Bródy II. 203
de Broglie II. 234, 236
de Broglie-hullám II. 236, 238, 515
de Broglie-hullámhossz II. 48
Brown-féle mozgás II. 13, 16
Brueckner II. 576
Brueckner-egyenletek II. 619
Brueckner-féle reakciómátrix II. 608, 609, 620
Brueckner-gráf II. 610
Brueckner-módszer II. 577, 578, 606, 607, 609, 610, 611, 618, 622

C, Cs

Carnot-körfolyamat I. 578
Cauchy II. 13
Cauchy-féle egyenletek I. 285
Cavendish-kísérlet I. 72
Centrális mozgás I. 65
Centrális szórás II. 506
Centrifugális erő I. 96
Chadwick II. 28
Chandler-féle nutáció I. 189
Ciklikus koordináták I. 142
Ciolkovszkij-egyenlet I. 79
Cirkulációs áramlás I. 290
Cirkulárisan poláros hullám I. 454
Clausius—Clapeyron-egyenlet I. 604, 642
Compton-effektus II. 227
Coriolis-erő I. 96
Coulomb-szórás II. 373, 375

Coulomb-törvény I. 367
Curie-pont I. 609
Curie-törvény I. 608
Curie—Weiss-törvény I. 609
Csatolási állandó II. 491, 494
Csavarmozgás I. 152
Csavarodás (helicitás) II. 420
Csavarodás sajátfüggvényei II. 420, 421
Cseppfolyós állapot I. 269
Csomófelületek II. 308
Csomósíkok I. 475, II. 309
Csoportsebesség I. 477, II. 233, 237
Csősugarak II. 21, 23

D

Dalton törvénye I. 568, 630, II. 13
Davisson és Germer kísérlete II. 48
Debye I. 516
Debye-féle fajhőkifejezés II. 202
Debye-féle frekvencia II. 94
Debye-féle frekvenciaeloszlás II. 103
Debye-modell II. 94
Debye—Scherrer-féle gyűrűk II. 48
Deformáció I. 221
Degenerált energianívók II. 299
Degenerált sajátérték II. 439
Dempster II. 26, 34
Determináns sajátfüggvény II. 558
Deviációs momentum I. 171
Diagonális gráf II. 597, 598, 599
Diagonális mátrix II. 469
Diamágneses közeg I. 408, 410, 607, 611
Dielektrikum I. 383, 395
Dielektromos állandó I. 383
Dielektromos indukció vektora I. 384
Diffúzió II. 119
Diffúzió mozgásegyenlete II. 128
Diffúziós állandó II. 120
Dilatációs ellipszoid I. 225
Dilatációs tenzor I. 251
Dinamikai operátor II. 578, 587, 592
Dipólréteg potenciálja I. 379
Dipólis potenciálja I. 378
Dirac II. 43, 178, 211, 398, 399, 475, 484, 485, 572
Dirac-egyenlet II. 309, 401, 403, 430
Dirac-egyenlet Lorentz-invarianciája II. 398, 410, 411
Dirac-egyenlet Majorana-féle megoldásai II. 417
Dirac-egyenlet szimmetrikus alakja II. 402, 403
Dirac-féle első közelítés II. 497
Dirac-féle energiaoperátor II. 400
Dirichlet-féle feltétel I. 115
Diszperzió I. 459
Diszperziós összefüggés II. 91
Diszperziós relációk II. 490, 505
Disszociációs energia I. 627, II. 345, 349
Disztribuciók II. 476
Doppler-effektus I. 340, 555, II. 46
Driftsebesség II. 130
Duhem—Gibbs egyenlet I. 623
Dulong—Petit törvény II. 151, 193, 198, 201

E, É

Effektív hatótávolság II. 383, 386
Effektív kvantumszám II. 213
Effektív molekulasúly I. 568
Effektív potenciál II. 554
Effektív rendszám II. 344, 566
Egyensúly feltételei I. 106
Egyensúlyi állapot entrópiája II. 155, 180
Egyensúlyi helyzet I. 115
Egyensúlyi koncentrációk I. 634
Egyensúlyi magtávolság II. 317, 345
Egyensúlyi sűrűség II. 616
Egyrészecske operátor II. 537, 549
Egyrészecske vonal II. 597
Ehrenfest-tétel II. 456
Ehrenhaft II. 21
Einstein I. 138, II. 35, 42, 51, 153, 199
Einstein-féle fajhőelmélet II. 200
Einstein-féle relativitási elv I. 303, 535, II. 398
Einstein foton-hipotézise II. 205
Einstein—de Haas kísérlet II. 42
Einstein-összefüggés II. 131
Einstein-reláció I. 326
Einstein—Schmoluchowszki formula II. 16
Ekvipartíció tétele II. 149, 159
Ekvipotenciális felületek I. 53
Ekvipotenciális görbék I. 285
Ekvivalencia elve I. 340
Ekvivalens töltés II. 16, 23
Ekvivalens vonalpár II. 583, 584, 586
Elasztikus potenciál I. 250
Elektrodinamika energiatörvénye I. 554
Elektromágneses hullámok I. 445
Elektromágneses impulzus sűrűsége I. 532, 553

Elektromágneses mértékrendszer I. 368, 411
Elektromágneses potenciálok I. 522
Elektromágneses tér alapegyenletei I. 441, 519
Elektromágneses tér energiatétele I. 532
Elektromágneses tér impulzusa I. 532
Elektromágneses tér impulzusmomentuma I. 532
Elektromágneses tértenzor I. 548
Elektromos áram I. 397
Elektromos oszcillátor I. 486
Elektromos szuszceptibilitás I. 388
Elektromos térerősség I. 364
Elektromos töltés I. 364
Elektromos töltés sűrűsége I. 366
Elektromos erő I. 400
Elektronaffin gázok II. 36
Elektrongáz II. 76, 182
Elektrongáz a hőmérséklet abszolút nulla pontján II. 185
Elektrongáz erős elfajulása II. 187, 193
Elektrongáz gyenge elfajulása II. 192
Elektrongáz igen alacsony hőmérsékleten II. 187
Elektrongáz igen magas hőmérsékleten II. 190
Elektronhéjak II. 212
Elektronkonfigurációk II. 223
Elektron nyugalmi energiája II. 429
Elektronok megkülönböztethetetlensége II. 545
Elektron saját mágneses momentuma II. 258, 408
Elektronspin II. 252
Elektronsugár II. 48
Elektronsugárzás II. 63
Elektronszám II. 568, 569
Elektron teljes impulzusmomentuma II. 287
Elektrosztatika alapegyenletei I. 520
Elektrosztatikus mértékrendszer I. 368
Elektrosztatikus potenciál I. 369
Elektrosztatikus terek I. 343, 364, 368
Elektrosztatikus tér energiája I. 390
Elemi cella II. 76
Elemi töltés II. 22
Eleven erő tétele I. 48
Elfajulási tényező II. 166
Elfajult elektrongáz II. 568
Elliptikusan polgáros hullám I. 454
Eltérítési módszer II. 26, 33
Eltolási áramlás I. 439
Eltolási modulus I. 247
Emery II. 577
Emissziós operátor II. 532, 533
Energiaáramlás vektora I. 443
Energia ekvipartíció tétele I. 150, 159
Energia-impulzus tenzor I. 553
Energia-korrekció II. 318
Energiamátrix II. 342, 346
Energiaoperátor II. 239
Energiasávok II. 281
Energiaspektrum II. 350
Energiasűrűség I. 393, 553
Energiatétel I. 51, 105
Energiától függő Green-függvény II. 578
Entrópia I. 589, 596
Entrópiakonstans I. 598, 636, II. 161, 168
Eötvös-féle torziós inga I. 340
Erőállandó I. 67
Erőcsavar I. 202
Erőfluxus I. 365
Erő momentuma I. 36, 102
Erőpár I. 200
Erős tértükrözés II. 417
Erő támadáspontja I. 199
Erővonalak I. 54, 346
Euler-féle egyenletek I. 178
Euler-féle szögek I. 160, II. 516, 518
Euler—Mascheroni szám II. 389
Euler tétele homogén függvényekre I. 129
Exponenciális formula II. 592, 594
Extenzív állapotjelzők I. 564
Extrém relativisztikus határeset I. 329
Észlelési valószínűség II. 446
Észlelés valószínűségi amplitúdója II. 447

F

Fajhő I. 574, II. 149
Faraday I. 343
Faraday első törvénye II. 16
Faraday második törvénye II. 16
Fázis I. 57
Fázisállandó I. 57, 453, II. 354, 507
Fáziscella II. 141, 152, 153, 157, 161
Fázisdiagram I. 640
Fázissebesség I. 477, II. 232
Fázistér II. 140, 152, 153
Fázistérfogat II. 157
Fehér törpék II. 198
Fekete test sugárzása II. 152
Felezési idő II. 67
Felhangok I. 266
Felületi divergencia I. 361
Felületi erők I. 230

Felületi feltételek I. 250
Felületi rotáció I. 362
Fermat-féle elv II. 234
Fermi, E. II. 64, 178, 568, 572
Fermi (magfizika hosszegysége) II. 53
Fermi—Dirac energiaeloszlás II. 182
Fermi—Dirac statisztika II. 178
Fermi-folyadék II. 611, 616, 617
Fermi-gáz II. 611, 616
Fermi-impulzus II. 612, 618
Fermion II. 178
Fermionok egyensúlyi eloszlása II. 179
Fermi-részecskék II. 523, 524, 525, 530, 534, 540, 560
Fermi-tenger II. 544, 581, 595, 604, 620
Ferroelektromos kristályok II. 74
Ferromágneses anyagok I. 410, 609, II. 577
Feszültségellipszoid I. 240
Feszültségtenzor I. 233, 551, 552
Feynman-féle fényóra I. 311
Fémes kötés II. 223
Fémkristályok II. 76, 278
Fényabszorbció II. 39
Fényelhajlás I. 494
Fényes I. II. 575
Fénygömb egyenlete I. 330
Fényemisszió II. 39
Finomszerkezeti állandó II. 426, 429
Fizikai inga I. 167
Fizikai mennyiségek mérése II. 449
Fizikai mennyiségek mérési átlagértéke II. 447
Fizikai mennyiségek vákuumértéke II. 537
Flettner-rotor I. 298
Fock II. 545
Fonon II. 199
Forgatómomentum I. 36, 102
Forgás (mint transzformáció) I. 208, 210
Forgó mozgás I. 86
Forráserősség I. 350
Fotoelektromos effektus II. 27, 44
Foton II. 45, 64
Fotonemisszió II. 230
Foton energiája II. 66
Fotongáz II. 156, 170
Fotonrakéta I. 323
Foucault-inga I. 96
Fourier II. 258
Fődilatációk I. 229
Fődilatációs tengely I. 225
Főfeszültségek I. 240
Főkvantumszám II. 210, 298, 307
Földalkáliák II. 50
Földi nehézségi erő I. 54
Földi nehézségi gyorsulás I. 73
Főtehetetlenségi momentum I. 175
Főtehetetlenségi tengely I. 175
Franck II. 36
Franck—Hertz kísérlet II. 36
Fraunhofer-féle elhajlásjelenségek I. 502
Frekvencia I. 57
Frekvenciaeloszlási függvény II. 88, 96, 171
Frekvenciák tiltott sávja II. 100
Fresnel I. 494
Fresnel-féle elhajlásjelenség I. 502
Fresnel-féle formulák I. 467
Független kvázirészecske közelítés II. 597, 598, 599, 607, 609

G, Gy

γ-sugarak II. 17, 66
Galilei I. 24, 73
Galilei-féle relativitási elv I. 92, 301, 303
Galilei-transzformáció I. 302
Gamow II. 367
Gamow-faktor II. 367, 379
Gauss-tétel I. 233, 352
Gay—Lussac-effektus I. 630
Gay—Lussac kísérlet I. 572
Gáspár R. II. 573
Gázállandó II. 148
Gázelfajulás II. 166
Gázhőmérő I. 562
Gáz ionizációs energiája II. 168
Gázkeverékek I. 627
Gázkeverékek állapotegyenlete I. 568
Gázkeverékek kémiai egyensúlya I. 633
Gáz nyomása I. 562, 624, 639, II. 148, 166
Geiger-féle tűszámláló II. 18, 28
Geiger—Nuttal összefüggés II. 367, 370
Generátor II. 469
Geodetikus vonal I. 137
Gerjesztési energia II. 72
Gerlach II. 39
Gibbs-féle fázisszabály I. 639
Giromágneses viszony II. 293
Goldstone-formula I., II. 594, 599, 609, 613, 614
Goldstone-formula II., II. 595, 599, 609, 613
Gombás II. 572, 573, 574, 575
Gorkov II. 577
Goudsmit II. 43
Goudsmit és Uhlenbeck II. 216

Gömbfüggvények differenciálegyenlete II. 284
Gömbhullámok I. 478
Gömbi inga I. 83
Göznyomási görbe I. 640
Grammatom II. 16
Gravitációs állandó I. 71
Gráfegyszerűsítés művelete II. 610
Gráftechnika II. 580, 581
Gráfváz II. 610
Green-függvény II. 507, 578, 579, 580, 581
Green-operátor II. 579, 587, 593, 599
Green-tétel I. 352, 354
Gyémántszerkezet II. 75
Gyorsulás I. 37, 39, 41
Gyors váltakozású terek alapegyenletei üres térben I. 520
Gyűrűgráf II. 610, 622

H

de Haas II. 42
Hajócsavar I. 299
Halogén elemek II. 50
Hamilton-egyenletek II. 141, 230
Hamilton-elv I. 117
Hamilton-féle függvény I. 130, II. 240, 405, 406, 407
Hamilton-féle kanonikus egyenletek I. 130
Hamilton-féle principális függvény I. 146
Hamilton—Jacobi-féle parciális differenciálegyenlet I. 144, 145
Hamilton-operátor II. 239, 250, 407, 409, 431, 453, 455, 457, 459, 469, 479, 483, 491, 500, 509, 510, 511, 513, 514, 520, 525, 526, 529, 539, 556, 578, 581, 611
Hangkvantum II. 199
Hangszínezet I. 266
Harmonikus mozgás differenciálegyenletei I. 262
Hartree II. 545
Hartree—Fock egyenletek II. 548, 550, 551, 552, 553, 554, 560, 561, 565, 573
Hartree—Fock energia II. 560
Hartree—Fock módszer II. 545, 553, 559, 560, 572, 576, 577
Hartree—Fock operátor II. 552
Hartree-Fock táblázatok II. 553
Hasonlósági transzformáció II. 466
Hatás I. 136
Hatásfüggvény I. 136
Hálózati sík I. 514
Hármaspont I. 640
Háromdimenziós potenciálvölgy II. 295
Háromrészecske korreláció II. 577
He-atom II. 336, 340, 343, 527, 576
Heaviside-mértékrendszer I. 368, 408, 411
Heaviside-réteg I. 493
Heisenberg II. 50, 226, 227, 432, 446, 470, 490
Heisenberg-féle határozatlansági reláció II. 152, 227, 228, 264, 432, 450
Heisenberg-féle felcserélési reláció II. 445, 455, 470
Helicitás II. 420
Hellmann II. 574, 575
He^3 mag II. 576
He^4 mag II. 576
Hermite-féle polinomok II. 269
Hermitikus operátor II. 437, 453, 464, 468, 469
Hermitikus operátor spektrális dekompozíciója II. 489
Hertz, G. II. 34, 36
Hertz, H. I. 475, 478, 490
Hertz-féle megoldás I. 479
Hertz-féle vektor I. 479
Heterogén termodinamikai rendszer I. 563, 636
Héliumszerű ionok II. 336, 343
Hidrodinamika alapegyenletei I. 276
Hidrogén-atom II. 205, 208
Hidrogén-atom Stark-effektusa II. 332
Hidrogénkötésű kristályok II. 74
Hidrogénszínkép finomszerkezete II. 429
Hilbert-tér II. 579
Hiperfinom struktúra II. 217
H_2 molekula II. 576
H_2^+ molekula-ion II. 345
Holonom kényszer I. 123
Holt tér I. 292
Homogén termodinamikai rendszer I. 563, 617
Homogén vezetők I. 370
Homöopoláris kötés II. 223
Hook-törvény I. 242
Hosszkontrakció I. 314
Hőgép I. 579
Hőkapacitás I. 573
Hőkiegyenlítődés I. 561, 591
Hőmérő I. 561
Hőmérsékleti skála I. 561
Hőmérsékleti sugárzás II. 170
Hőtágulási együttható I. 566
Hugenholtz II. 576, 622

Hugenholtz-formulák II. 597, 599, 607, 613
Hugenholtz-módszer II. 577, 622
Hull I. 533
Hullámcsoport II. 233
Hullámegyenlet I. 253, 445
Hullámforrás I. 480
Hullámhossz I. 453
Hullám intenzitása I. 473
Hullámsík I. 255, 449
Hullámszám I. 453
Hullámszámvektor II. 105
Húr I. 259
Huyghens elve I. 494
Húzófeszültség I. 233
Hűtőgép I. 580
Hylleraas II. 345

I

Ideális folyadék I. 279
Ideális gáz I. 568, 572, 624, II. 132
Ideális gáz entrópiája I. 597
Ideális gáztörvény I. 568, 572, 624, II. 162
Identikus transzformáció I. 204
Idődilatáció I. 311
Időtől független Schrödinger-egyenlet II. 240
Időtől függő Green-függvény II. 578
Időtől függő Schrödinger-egyenlet II. 240
Időtükrözés II. 415
Impedancia I. 437
Impulzus I. 44, 132
Impulzus-koordináták I. 130
Impulzus-tétel I. 46
Impulzustér II. 133, 157
Impulzusoperátor II. 509, 514
Impulzus-reprezentáció II. 481, 484, 506
Impulzusmomentum I. 55, 101
Impulzusmomentum-operátor II. 517
Impulzusmomentum-sajátfüggvények II. 516, 517
Impulzusmomentum tétele I. 101
Indukált elektromos feszültség I. 424
Indukált elektromotoros erő I. 424
Indukciófluxus I. 427
Indukciós áramlás I. 439
Indukció törvénye I. 424
Induktancia I. 437
Inerciaerő I. 109
Inerciarendszer I. 43, 92, 301
Infinitezimális Lorentz-transzformáció II. 410
Infinitezimális transzformációk I. 206, II. 469
Inhomogén termodinamikai rendszer I. 563
Inhomogén vezetők I. 370
Inkompresszibilis anyag I. 248
Instabilis magok II. 62
Instabilis rács II. 87
Instantán rendszer I. 158
Integrálható Pfaff-féle kifejezés I. 565, 569, 589, 591
Intenzív állapotjelzők I. 564
Interferencia-jelenségek I. 472
Interferometer I. 306
Ion II. 32
Ionizációs energia II. 208, 337
Ionizációs fok II. 167
Ionizációs kamra II. 34
Ionizációs munka II. 337, 344
Ionkötés II. 223
Ionos kristályok II. 74
Irreducibilis betétrész II. 596, 597, 598, 606
Irreverzibilis folyamat I. 578
Irreverzibilis körfolyamat I. 585
Ivanyenko II. 50
Ives I. 556
Izobár hőtágulási együttható I. 566
Izobár kompresszió I. 570
Izobár magok II. 51
Izomer átalakulás II. 66
Izotermák I. 599
Izoterm állapotváltozások I. 616
Izotermikus kompresszió I. 570
Izotermikus mágnesezés I. 571
Izoterm kompresszibilitás I. 566
Izotón magok II. 51
Izotóp elemek II. 33, 34
Izotópeltolódás II. 325
Izotópia II. 217
Izotrop termodinamikai rendszer I. 563
Izotrop testek I. 241

J

Jelsebesség II. 234
Jordan II. 432
Joule-féle hő I. 402
Joule-törvény I. 402, 403, 442

K

Kalorikus állapotegyenlet I. 572, 594
Kanonikusan konjugált koordináták I. 142, II. 230

Kanonikus transzformáció I. 139
Kapacitás I. 382
Kapocs-gráf II. 584, 590, 592, 594, 595, 600
Katódsugár II. 21, 23, 27
K-atom II. 574
Kauzalitás elve II. 231
Kármán II. 200
K-befogás II. 65
Kellström II. 22
Kelvin-féle hőmérsékleti skála I. 562
Kepler I. 24
Kepler-mozgás I. 67, 68, 74
Kepler-törvények I. 69, 70
Keresztrács I. 509
Ket-vektor II. 485
Kémiai komponens I. 617
Kémiai potenciál I. 618, 623
Kényszer I. 107
Kényszererő I. 80
Kényszerfelület I. 80
Kétdimenziós rács I. 509
Kétkomponensű hullámfüggvény II. 399
Kétrészecske korreláció II. 578
Kétrészecske operátor II. 538, 543
Kéttest-probléma II. 314
Kicserélődési kölcsönhatás II. 335, 338
Kilépési munka II. 44
Kimenő csatorna II. 72
Kimenő vonal II. 614
Kinetikus energia I. 48
Kirchhoff I. 494
Kirchhoff-féle formula I. 497
Kirchhoff-törvény I. 404, 405
Kis sűrűségű rendszerek II, 621, 622
Kiválasztási szabályok II. 215, 259
Klasszikus Maxwell—Boltzmann statisztika II. 136, 137, 139, 151, 152, 153, 156, 158, 162, 169
Kombinációs együtthatók II. 346
Kommutátor II. 436, 445, 450, 455
Kompresszibilitás I. 248, 566, II. 617
Kompresszibilitás modulusa I. 566
Kompresszió nélküli nyíróhullámok I. 258
Kompressziós hullámok I. 258
Kondukciós áram I. 440
Konfigurációs tér II. 245, 508
Konfluens hipergeometriai sor II. 377
Kontinuitási egyenlet I. 276, II. 248
Konvekciós áram I. 440
Konverziós elektron kibocsájtás II. 66
Koordináta-reprezentáció II. 479, 481, 506, 537, 538
Kopernikus I. 24
Korpuszkuláris sugár II. 21
Korrespondencia-elv II. 214, 258, 259
Kovalens kötés II. 74
Kozmikus sebesség I. 73, 76
Kölcsönhatási reprezentáció II. 490, 491
Kölcsönös indukció I. 425
Köráramlás I. 290
Körfolyamat I. 578
Körfrekvencia I. 58
Kötési energia II. 51, 385
Kötött állapotok II. 363, 384
Kötött mozgás I. 69
Közönséges magnetosztatikai mértékrendszer I. 408
Kratzer-féle potenciál II. 309
Kritikus elektronenergiák II. 38
Kritikus hőmérséklet I. 600
Kritikus pont I. 600
Kritikus potenciálok II. 37
Kutta—Zsukovszkij effektus I. 298
Külső erő I. 97
Külső vonal II. 583, 618
Küszöbenergia II. 73
Küszöbérték-görbe I. 612
Kvantummechanikai mozgástörvény II. 454
Kvantumstatisztika II. 152, 161
Kvantumszám II. 206
Kvázikristály II. 76
Kvázilyuk II. 597, 599, 607
Kvázirészecske II. 597, 599, 600, 601, 604, 607
Kvázistacionárius terek I. 343, 423, 520

L

Labilis mozgás I. 183
Ladányi II. 572
Lagrange-féle egyenletek I. 113, 124, 127
Lagrange-féle koordináták I. 121
Laguerre-féle polinom II. 306
Landau II. 597
Landau-féle hipotézis II. 578
Landé-féle g_L-faktor II. 292, 294, 327
Lapcentrált köbös rács II. 74, 82
Laplace-egyenlet I. 284, 370
Laplace-féle kifejezés I. 353
Laplace-operátor I. 249
Latens energia I. 326
Laue I. 510, II. 19, 48
Lebedev I. 533
Legkisebb hatás elve I. 136, 137

Lengő mozgás I. 86
Lenz-törvény I. 425
Légcsavar I. 299
Légnemű állapot I. 269
Li-atom II. 576
Lineárisan poláros hullám I. 454
Lineáris harmonikus oszcillátor I. 493, II. 266, 470, 475, 484, 485
Lineáris ionlánc II. 81
Lineáris operátorok II. 435, 477
Lineáris vektorterek II. 432
Lineáris vezető mágneses tere I. 414
Linked-cluster-formula II. 591, 594
Liouville-tétel II. 141
Lippmann—Schwinger egyenlet II. 490, 498, 499
Logaritmikus dekrementum I. 65
Longitudinális Doppler-effektus I. 556
Longitudinális hullámok I. 258
Longitudinális rácsrezgés II. 114
Lorentz II. 13
Lorentz-erő II. 405
Lorentz-féle erőtörvény I. 442, II. 23
Lorentz-kontrakció I. 314
Lorentz-kontrakció operátora II. 401
Lorentz-transzformáció I. 309, 410
Loschmidt-szám I. 627, II. 16, 18, 19, 77, 88
Lyuk-lyuk kölcsönhatás II. 581

M

Madelung II. 77
Madelung-állandó II. 77, 80, 81, 83
Magátalakítás II. 70
Mag effektív mágneses momentuma II. 58
Mag giromágneses faktora II. 58
Mag kvadrupolmomentuma II. 58, 59, 60, 61
Mag-magneton II. 57, 294
Magnetomechanikai anomália II. 43
Magneton II. 41
Magnetosztatika alapegyenletei I. 520
Magreakciók II. 70
Magvisszalökődés II. 84
Magspin II. 56
Makroállapot II. 133
Makroállapot valószínűsége II. 133
Makroszkopikus törvények II. 133
Marsden II. 28
Matematikai inga I. 83
Maupertuis-féle elv II. 235
Maxwell I. 24, 343
Maxwell—Boltzmann-féle energiaeloszlási törvény II. 144
Maxwell-féle egyenletek I. 425, 440, 442
Maxwell-féle feszültségek I. 529
Maxwell-féle sebességeloszlási függvény II. 147, 159
Maxwell-kritérium I. 603
Mágneses indukció vektora I. 408
Mágneses kvantumszám II. 215, 329
Mágneses momentum I. 407, II. 291
Mágneses permeabilitás I. 408
Mágneses pólus I. 406
Mágneses szuszceptibilitás I. 410
Mágneses tér I. 406
Mágnesezettségi törvény I. 608
Mágnesezés vektora I. 410
Másodfajú perpetuum mobile I. 578, 580, 586
Második kvantálás II. 529, 580
Másodrendű gráf II. 582, 583, 584, 588, 589, 590
Másodszomszéd közelítés II. 112
Megfordítható körfolyamat I. 579
Meissner-effektus I. 611
Mellékkvantumszám II. 210, 307, 425
Merev test I. 23
Merev test mozgásegyenletei I. 164
Michelson—Morley kísérlet I. 305
Mikroállapot II. 133, 152, 153, 154
Millikan II. 21, 22, 77
Minkowski-erő I. 335
Moláris energia I. 623
Moláris entrópia I. 623
Moláris szabad energia I. 622, 624
Molekulakristályok II. 74
Molekulasugarak II. 21
Molekulasúly II. 14
Molekuláris erők II. 576
Momentán rendszer I. 158
Monokromatikus hullám I. 496
Moseley-törvény II. 32, 212
Mozgásállandók II. 455
Mozgásegyenletek tíz integrálja I. 105
Mozgási tömeg I. 320
Mólhő I. 574, 626
Mólszám I. 617
Móltérfogat I. 567, 641
Móltörtek I. 634
Mössbauer-effektus I. 340
Multiplett termek II. 218
Munka I. 47, 48, 49
Mutáció I. 198
Müon-atom II. 326

N, Ny

Nagy szabadsági fokú rendszerek elmélete II. 576
Negatív Carnot-körfolyamat I. 579
Nehéz pörgettyű I. 198
Nehézségi erő I. 54, 72
Nehézségi gyorsulás I. 73
Nehézségi hullám I. 258
Nemesgáz-konfiguráció II. 561
Nemesgázok II. 50
Nem holonom kényszer I. 123
Nem integrálható Pfaff-féle kifejezés I. 565, 572, 573
Nernst I. 592
Neumann-függvény II. 296
Neutrino II. 64, 417, 419, 422, 423
Neutrino Dirac-egyenlete II. 417
Neutron II. 50
Newton I. 24
Newton-axiomák I. 42
Newton-féle tömegvonzási törvény I. 71
Négyesáram I. 544
Négyes-áramsűrűség II. 403
Négyes-impulzus I. 334
Négyespotenciál I. 544, II. 410
Négyestenzor I. 543, 545
Négyesvektor I. 331
Nichols I. 533
Nicol-féle prizma I. 468
Nívógörbék I. 572
Normálállapot I. 567
Normálfeszültségek I. 248, 270
Normális kapcsolás II. 218
Normális nyomás I. 270
Normális Zeeman-effektus II. 329
Normál rendszerek II. 577, 594
Nukleon II. 50
Nukleon giromágneses faktora II. 57
Nullarendű gráf II. 587, 592
Nyírási modulus I. 247
Nyírófeszültség I. 233
Nyugalmi energia I. 326
Nyugalmi energia operátora II. 399
Nyugalmi tömeg I. 319
Nyúlás I. 211

O

Ohm-törvény I. 397, 399, 442
Olvadási görbe I. 640
Operátorok II. 435
Operátorok csoporttulajdonsága II. 452
Operátorműveletek II. 436
Operátorok közös sajátvektorrendszere II. 450
Operátor várható értéke II. 509
Optikai rács II. 19
Optikai rezgések II. 100
Optikai tétel II. 355, 498, 505
Orto-hélium II. 340
Ortonormált bázis II. 460, 475
Oszcillációs energia II. 224
Oszcillációs kvantumszám II. 224
Oszcillátor-probléma II. 557, 558

Ö

Önadjungált operátor II. 437
Önindukció I. 426
Örvényes áramlás I. 278
Összefüggő gráf II. 583, 590, 593, 596, 600

P

Ψ-függvény értelmezése II. 245
Para-hélium II. 340
Para-hélium állapot II. 628
Parallelogramma-szerkesztés I. 27
Paramágneses gázok szuszceptibilitása I. 608
Paramágneses közeg I. 408, 410, 607
Parciális hullám II. 356, 373, 503
Parciális hullámok módszere II. 352, 376
Parciális nyomás I. 568
Passzív kölcsönhatás II. 583
Pauli II. 64
Pauli-elv II. 153, 219, 519, 523, 525, 572, 573, 587, 604
Pauli-elv kvantummechanikai megfogalmazása II. 340
Pauli-mátrixok II. 254
Pauli-operátorok II. 255, 400
Pauli-spinor II. 253, 404, 420
Pályaimpulzusmomentum II. 425
Pályaimpulzusmomentum operátora II. 431
Párolgási hő II. 616
Peierls II. 490
Perihélium mozgás I. 340
Periodikus potenciál II. 278
Periodikus rendszer II. 32, 49
Permanens mágnes I. 406, 410
Permutációs operátorok II. 520
Perpetuum mobile I. 578
Pfaff-féle formula I. 123, 564
Pion II. 176

Placzek II. 490
Planck I. 578, II. 13, 171
Planck-féle állandó II. 38, 171, 175, 231, 236, 578
Planck-féle sugárzási törvény II. 171
Plazma II. 166
Poincaré I. 309
Poinsot I. 174
Poisson-egyenlet I. 370, 523
Poisson-féle rugalmassági állandó I. 242
Polarizáció I. 388
Polarizációs kötés II. 223
Polarizációs momentum II. 44
Polarizálhatóság I. 391
Polározási sík I. 467
Polározás szöge I. 468
Polhodia I. 186
Polinom-módszer II. 269, 298, 427
Politrop állapotegyenlet II. 187
Pontrendszer egyensúlya I. 110
Pontrendszer mozgásegyenletei I. 113
Ponttranszformáció I. 139
Potenciál I. 49
Potenciálgát II. 368
Potenciálgödör II. 368
Potenciális energia I. 51
Potenciál létezésének feltétele I. 52
Potenciálvölgy II. 270
Poynting-féle vektor I. 443
Pozitív Carnot-körfolyamat I. 579
Pozitron II. 416
Pozitronsugárzás II. 63
Precesszió I. 190, 196
Primitív (eltolási) vektor II. 103, 106
Projekciós operátorok II. 436, 447, 463, 486, 489
Propagátor II. 580, 581, 586, 587, 588, 602, 607, 609, 615, 618
Proton II. 27, 50
Protoneloszlás dipolmomentuma II. 59
Proton-emisszió II. 66
Prout II. 33, 34
Pszeudopotenciál II. 574
Pszeudo-sajátfüggvények II. 575

Q

Q-értékek II. 73

R

Racah II. 415
Radiális Hartree—Fock egyenletek II. 566
Radiális hullámfüggvény II. 282, 299, 507
Radiális kvantumszám II. 210, 296, 298, 307
Radiális Schrödinger-egyenlet II. 283
Rakétamozgás I. 78, 322
Rácsállandó II. 76, 278
Rácsenergia II. 77
Rács feloldóképessége I. 509
Rácsfrekvenciák II. 89
Rácspont I. 512
Rácsrezgés hullámszáma II. 91
Rádióaktív anyag aktivitása II. 67
Rádióaktív befogás II. 71
Rádióaktív bomlás II. 66
Rádióaktivitás egységei II. 67, 68
Rádióaktív sugarak II. 17
Reakciócsatornák II. 72
Reakcióegyenletek I. 632
Reakcióenergia II. 72
Reakcióhő I. 636
Reakciómátrix II. 497, 608
Reakció-operátor II. 592, 594, 599, 600, 602
Reciprok rácsvektorok II. 106
Redukált tömeg II. 315
Regge-pólusok II. 490
Relatív energiakorrekció II. 325, 333
Relativisztikusan elfajult elektrongáz II. 194
Relativisztikus dinamika mozgásegyenletei I. 337, 339
Relativisztikus tömegnövekedési formula I. 319, 431
Relativitás elve I. 301
Relatív koordináták II. 315
Rendszám II. 32
Retardált potenciálok I. 525
Retardált tér I. 485
Reverzibilis folyamat I. 577
Rezgésidő I. 57
Rezgőkör I. 437
Rezonancia szélessége II. 367
Rezonanciaszórás hatáskeresztmetszete II. 366
Rezonanciák II. 276
Részecskefluxus II. 126
Részecskék megkülönböztethetetlensége II. 153
Riemann-geometria I. 340
Ritka földfémek II. 50
Ritz II. 213
Ritz-eljárás II. 341
Ritz-féle korrekció II. 213
Rotáció I. 52, 357
Rotációs energia II. 151, 244
Rotációs kvantumszám II. 224, 314

Rotációs nívók II. 317
Röntgensugarak II. 84
Röntgen-színkép II. 211, 212
Rugalmas deformáció I. 241
Rugalmas szórás II. 72
Rugalmatlan szórás II. 72
Russel—Saunders kapcsolás II. 218
Rutgers-formula I. 614
Rutherford II. 28, 52, 70
Rutherford-féle atommodel II. 205
Rutherford-féle hatáskeresztmetszet II. 378, 394, 396
Rydberg II. 213
Rydberg-állandó II. 208, 209
Rydberg-féle korrekció II. 213

S, Sz

Saha-képlet II. 169
Sajátérték I. 269, II. 244
Sajátfüggvény I. 269, II. 245
Sajátidő-tartam I. 337
Sajátvektorok II. 438
Salam-paritás II. 417
Salam-transzformáció II. 417
Scherrer I. 516
Schmidt-féle g_s faktor II. 294
Schrödinger II. 226, 245, 432, 445, 446, 456, 470, 479
Schrödinger-egyenlet II. 480, 484, 485, 490, 491, 500
Sebesség I. 36, 38, 41, 42
Sebességvektor operátora II. 400, 405
Self-consistent field módszer II. 549, 573
Sessler II. 577
Síkáramlás I. 284
Síkbeli rotátor II. 264
Síkhullám I. 255, 449, II. 419
Síkinga I. 83
Skaláris mennyiség I. 26
Skaláris potenciál I. 522
Skalártér I. 344
Slater II. 573
Slater-determináns II. 530, 540
S-mátrix formalizmus II. 490
Smoluchowszki—Einstein formula II. 16
Soddy-törvény II. 62
Sokszoros súlyviszonyok törvénye II. 14
Sommerfeld II. 209, 211, 429
S-operátor II. 492, 498
Spektrum finom struktúrája II. 210
Spektrum rendszáma I. 508
Spektrumvonalak multiplicitása II. 217
Spin II. 43
Spinfüggvények II. 554, 562, 565
Spinkoordináták II. 553
Spinkvantumszám II. 217, 329, 562
Spin-operátor II. 400, 404, 409, 412
Spinor II. 253, 433
Spin-pálya kölcsönhatás II. 326, 431
Spin-valenciaelmélet II. 223
Stabilis mozgás I. 182
Stabilis rács II. 87
Stacionárius állapot II. 459
Stacionárius áramlás I. 274
Stacionárius terek I. 343, 368, 397
Stacionárius terek alapegyenletei I. 520
Standard Hartree—Fock egyenletek II. 552, 560
Stark-effektus II. 215
Stefan—Boltzmann állandó II. 174
Stefan—Boltzmann-féle törvény I. 533, II. 173
Steiner-tétel I. 169
Stern II. 39, 49
Stern—Gerlach kísérlet II. 39
Stokes-tétel I. 354
Stokes-törvény II. 21
Stoner-táblázat II. 222
Stöchiometria I. 633
Sugárnyomás II. 176, I. 533
Sugárvektor I. 443, 553
Sugárzási ellenállás I. 492
Súlypont I. 100
Súlyponti koordinátarendszer II. 515
Súlypont koordinátái II. 315
Súlypont mozgása II. 510, 556
Súrlódási hő I. 578
Sűrűség I. 100
Szabad elektrongáz II. 573
Szabad energia I. 616, II. 144
Szabad entalpia I. 617
Szabadsági fokok száma II. 149
Szabad tengely I. 181
Szabad úthossz II. 21
Szcintilláció II. 18
Szekuláris egyenlet II. 322, 330, 466
Szekunder hullámok I. 510
Szerieszek II. 208
Szépfalusy II. 575
Széteső gráf II. 583, 587, 590
Szigetelők I. 370
Szilárd testek fajhője II. 198
Szimmetriatranszformáció II. 469, 470
Szinglett term II. 339

Szinguláris kölcsönhatás II. 577
Szondy II. 575
Szórásamplitúdó II. 354, 377, 391, 392, 393, 394, 395, 396, 503
Szórás differenciális hatáskeresztmetszete II. 350
Szórási állapot II. 362
Szórási formula II. 31
Szórási hossz II. 383, 387, 389, 390
Szórási rezonancia II. 358, 388
Szórásmátrix II. 604, 605
Szórásoperátor II. 498
Szórás teljes hatáskeresztmetszete II. 350
Sztatika I. 23
Szublimációs energia II. 80
Szublimációs görbe I. 640
Szuperpozíció elve I. 277
Szupravezetés I. 610
Szupravezető anyagok II. 577

T

Target II. 70
Távolhatás elmélet I. 391
Tehetetlenségi ellipszoid I. 174
Tehetetlenségi momentum I. 171
Telített kölcsönhatás II. 616, 617
Telitetlen kölcsönhatás II. 617
Teljes impulzusmomentum sajátfüggvényei II. 327, 424
Teljes visszaverődés I. 471
Tenzor invariánsa I. 244
Termek II. 208, 213
Termek felhasadása II. 329
Természetes α-bomlás II. 367
Termikus állapotegyenlet I. 572, 594
Termodinamikai egyensúly I. 615, II. 167
Termodinamika első főtétele I. 559, 569
Termodinamika második főtétele I. 578, 590
Termodinamika harmadik főtétele I. 592, 598
Termodinamikai hőmérsékleti skála I. 562, 585
Termodinamikai rendszer I. 563
Termodinamikai szabadsági fok I. 639
Területi sebesség I. 65
Tetraéderes kötés II. 74
Tércentrált köbös rács II. 74, 83
Térfogati erők I. 229
Térbeli oszcillátor II. 297
Térbeli rács I. 510
Térbeli rotátor I. 266, 313
Téridőtükrözés II. 415
Tértükrözés II. 414, 425
Thibaud II. 19, 48
Thomas II. 326, 568
Thomas—Fermi modell II. 568, 569, 571
Thomson II. 33
Thomson-formula I. 438
Thomson módszere II. 26, 33
Thomson-tétel I. 372
Tiltott átmenetek II. 215
Tiltott zónák II. 281
T^3 mag II. 576
Torzulás tenzora I. 228
Többcsatornás szóráselmélet II. 490
Töltésáramsűrűség II. 401
Töltéskvantumszám II. 293
Töltésparitás II. 417
Töltésrendszerek potenciálja I. 374
Töltéssűrűség II. 401, 404
Töltéstükrözés II. 415
Tömeg I. 44
Tömegerők I. 229
Tömeghatás törvénye I. 634
Tömeghiány II. 35, 36
Tömegközéppont I. 98
Tömegközéppont tétele I. 99
Tömegspektrográf II. 33
Törési szög I. 460
Trajektória I. 53, 346
Transzformáció generátora II. 469
Transzformáció mátrixa II. 464, 468
Tranzláció I. 149
Tranzlációs energia II. 151
Tranzmissziós együttható II. 274
Tranzverzális Doppler-effektus I. 556
Tranzverzális hullámok I. 257, 450
Tranzverzális rácsrezgés II. 114
Triplett term II. 339
Tükörmagok II. 54

U

Uhlenbeck II. 43
U^{238} mag II. 576
Uniter operátor II. 437, 452, 464
Uniter transzformáció II. 491, 550

Ü

Üregbe zárt elektromágneses sugárzás II. 156
Ütközési hatáskeresztmetszet II. 124

V, W

Valenciaelektron II. 213, 574
Valencia-kötés II. 223
Valódi sűrűség I. 384
Valódi töltés I. 384
Valószínűségi amplitúdó II. 446
Vandermonde-féle determináns I. 190
Várható érték II. 248
Vektordiagram I. 504
Vektoriális szorzat I. 33
Vektorok I. 27, 28, 29, 30, 31, 32, 35
Vektorpotenciál I. 412, 522
Vektortér II. 433
Vetületkvantumszám II. 339
Variációszámítás I. 113
Vegyérték-elektronok II. 74, 76
Vezetési áram I. 440
Vezetési elektronok II. 76, 278
Vezetők I. 370
Végtelen maganyag II. 577
Vibrációs nívók II. 317
Vibrációs színkép II. 317
Virtuális állapot II. 363
Virtuális elmozdulás I. 107
Virtuális munka elve I. 108
Visszaverődés határszöge I. 471
Visszaverődési szög I. 460
Vitorla I. 300
Vonalas rács I. 507
Vörös eltolódás I. 340
van der Waals I. 599
van der Waals állapotegyenlet I. 599
van der Waals izoterma I. 600
van der Waals konstansok I. 599
van der Waals kölcsönhatás II. 76
van der Waals kötés II. 76
van der Waals kristály II. 76
Wheeler II. 490
Wick II. 587
Wien-féle eltolódási törvény II. 172
Wigner II. 490
Wilson-féle kísérlet II. 17, 21, 28

Z

Zeeman-effektus II. 215, 328, 410

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Fülöp Antal Burkoló és kötés: Rudas Klára munkája

71.70484 Akadémiai Nyomda, Budapest — Felelős vezető: Bernát György

Ára: I-II. 226,— Ft

Gombás Pál

FIZIKA MÉRNÖKÖK SZÁMÁRA

Ez a kötet mérnökök számára ad bevezetést a fizika alapjaiba. Azokat a fizikai alapismereteket, törvényeket tartalmazza, amelyekre a műszaki egyetemek hallgatói — a felsőoktatási reform kívánalmainak megfelelően — további tanulmányaik során támaszkodhatnak, és amely ismeretanyag felelevenítése a már működő mérnökök és más szakemberek számára is hasznos.

Több, egymástól függetlenül is tanulmányozható részből áll, melyek a következők: mechanika, relativitáselmélet, hangtan, hőtan, elektromosságtan, fénytan és atomfizika. A könyv végén található függelék egyrészt néhány alkalmazott matematikai tételt foglal össze a vektoranalízis köréből, másrészt áttekintést ad a gyakorlatban legelterjedtebb mértékrendszerekről.

A terjedelem korlátozása érdekében a mű tömör fogalmazású. A szerző főcélja volt, hogy a legfontosabb alapfogalmakat és törvényeket minél egyszerűbben, de teljes precizitással ismertesse.

A fizika egyes fejezeteinek feldolgozásában a szerző minden esetben a tapasztalatból indul ki, így módszere logikai szempontból az egyesről az általánosra való következtetés, tehát az indukció.

Szerves kiegészítője lesz a könyvnek a szerzőnek a jelen művel párhuzamosan megjelenő Bevezetés az elméleti fizikába c. munkája.

AKADÉMIAI KIADÓ
BUDAPEST