

220 t súlyú, 6 lépesős rakétákat kíván felhasználni. Az 500 t anyag felszállítása 300 alkalommal, a számítások szerint 500 millió dollárba kerülne. (Összehasonlításként megemlítjük, hogy a Vanguard-terv összköltsége 21–28 millió dollár.)

Legújabbban a *Nemzetközi Asztronautikai Szövetség* VII. római kongresszusán foglalkoztak egy fantasztikus amerikai tervvel is, mely méreteit tekintve, minden eddigit felülmúl. A „Meteor” nevű űrváros hossza 1 km, átmérője 325 m lenne.

De a római kongresszus résztvevőit elsősorban mégis az NGÉ megvalósulás előtt álló szatellitái érdekelték. Csak ezek sikeres működése esetén, sok átmeneti forma közbeiktatásával kerülhet sor a szatelloidok, űrállomások stb. fellövésére. A további fejlődés szempontjából óriási jelentőségű, hogy a nemzetközi együttműködés ezen a téren az utóbbi másfél esztendőben jelentősen megszilárdult. A már említett barcelonai megegyezésen kívül ennek egyik eredménye volt, hogy a Szovjet Tudományos Akadémia Csillagászati Tanácsa mellett működő 26 tagú *Asztronautikai Bizottságot* teljes jogú tagként felvették a *Nemzetközi Asztronautikai Szövetségbe*, és *Szedov* akadémiakust a római kongresszus 400 résztvevője a Szövetség alelnökévé választotta. A nagyhatalmak és az egész tudományos világ együttes erőfeszítése a Nemzetközi Geofizikai Év mesterseges holdjaival az űrhajózás békés korszakát nyithatja meg az emberiség előtt.

1. *H. E. Newell*: The U. S. Rocket-Satellite Program for the IGY. Brüsszel (1955).
2. *H. E. Canney* and *F. I. Ordway III.*: The Uses of Artificial Satellite Vehicles. I. *Astronautica Acta* II/4 (1956).
3. *A. Sternfeld*: Flug ins Weltall. Neues Deutschland (1956).
4. *V. Petrov*: Televígyényie buduscsevo. Radio No 6.
5. *S. F. Singer*: Studies of a Minimum Orbital Unmanned Satellite of the Earth (MOUSE) II. *Ast. Acta* II/3 (1956).
6. *A. Stettbacher*: Chemische und matematische Grundlagen der Weltraumrakete. II. Explosivstoffe, IV. (1956).
7. *D. F. Lawden*: The Determination of Minimal Orbits. Journal of the British Interplanetary Society (1952).
8. *H. Gartmann*: Raketen. Kosmos (1956).
9. *A. Couder*: Satellites artificiels. L'Astronomie (1956).
10. *R. Tousey*: The Visibility of an Earth Satellite. *Ast. A.* II/2 (1956).
11. *F. L. Whipple* and *J. A. Hynes*: A Research Program Based on the Optical Tracking of Artificial Earth Satellites. Proceedings of the IRE (1956).
12. Bulletin for Visual Observers of Satellites No 1, 2, 3. Sky and Telescope (1956).
13. *F. J. Ordway III.*: The U. S. Satellite Vehicle Program. *Ast. Acta* II/3 (1956).
14. *K. A. Ehrlicke*: The Satelloid. *Ast. Acta* II/2 (1956).
15. *H. Mielke*: Der Weg ins All. Neues Leben (1956).

Almár Iván

MTA Csillagvizsgáló
Intézet

A kvantumfizika elemei II.

II. Az állapotfüggvény

Az állapotegyenlet

Az I. részben megismertedtünk a fizikai mennyiségek kvantummechanikai tárgyalásának módjával. A klasszikus fizika e mennyiségek leírására folytonos függvényeket használt, a kvantumfizika azonban operátorokkal dolgozik. Bármelyik fizikai mennyiséghez egy A operátort rendelünk, ez valamilyen függvényre alkalmazva azt más függvénybe viszi át.

$$A\varphi = \varphi'$$

Előfordul, hogy az így kapott φ' függvény a φ -nek állandósorozosa: $\varphi' = a\varphi$, tehát

$$A\varphi = a\varphi.$$

Az ilyen a számot az A operátor sajátértékének nevezzük. A kvantumfizika alapfeltevése az, hogy egy fizikai rendszerrel egy mennyiség (pl. energia) mérése nem vezethet más eredményre, mint a megfelelő A operátor valamelyik a sajátértékére. Ki tudjuk számítani mindazon értékeket, amelyeket egy fizikai mennyiség egyáltalán felvehet. Az operátorkalkulus lehetővé tette, hogy egységes elméleti magyarázatot adjunk a kísérleti fizika különböző területein fellépő kvantumos jelen-

ségekre. Az atom- és molekulaszínképek magyarázatánál a kvantummechanika átütő sikert aratott.

Felmerül a kérdés, hogy az I. részben leírt eredmények teljes mértékben kielégíthetnek-e bennünket? Ezt nem mondhatjuk. Ismerjük azokat a törvényeket, amelyek lehetővé teszik egy fizikai mennyiség lehetséges értékeinek kiszámítását. Nem tudjuk azonban az eddigiek alapján azt megmondani, hogy *mikor melyik* értéket kapjuk ezek közül egy elvégzett mérés eredményeként.

Mi választja ki azt a sajátértéket, amely például egy hidrogénatomnál adott pillanatban elvégzett energiamérés eredményeként kiadódik?

Hogy egy operátornak egy függvényre való hatása melyik sajátértékkel való szorzásban nyilvánul meg, attól függ, hogy az operátort a sajátfüggvények közül melyikre alkalmazzuk. Ez kézenfekvővé teszi azt a gondolatot, hogy az atom (vagy más fizikai rendszer) állapotát azzal a függvénnyel jellemezzük, amelyekre az operátorok hatnak. Ezt nevezzük *állapotfüggvénynek*. Ha például a hidrogénatom pillanatnyi állapotát leíró ψ függvény a legalsó energiaszinthez tartozik,

$$\psi = \varphi_0 \equiv A e^{-r/r_0} \quad \left(r_0 = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m e^2} \right), \quad (1)$$

akkor meg tudjuk mondani, hogy az atom alap-

állapotában mekkora az energia vagy impulzusmomentum értéke, hiszen

$$\mathbf{H}\psi = -\frac{e^2}{2r_0}\psi, \text{ tehát az energia}$$

$$-\frac{e^2}{2r_0} = -13,5 eV; \quad (\mathbf{x}p_y - y p_x)\psi = 0,$$

tehát az impulzusmomentum zérus.

Ha a $\psi = \varphi_0$ állapotban megmérjük ezeket a mennyiségeket, a sok sajátérték közül éppen ezek adódnak mérési eredményként. A kvantumfizika elméleti alapját tehát a

$$\begin{aligned} \text{fizikai mennyiség} &\rightarrow \text{operátor} \\ \text{fizikai állapot} &\rightarrow \text{állapotfüggvény} \end{aligned}$$

matematikai hozzárendelés képezi.

A következőkben válaszolunk kell arra a kérdésre, hogy miként lehet meghatározni a vizsgált rendszer ψ állapotfüggvényét.

Egy test mozgásállapotát a klasszikus mechanikában a sebesség határozza meg. Ha ezt egy pillanatban ismerjük, a jövőbeli állapotot a Newton-féle mozgástörvény alapján ki tudjuk számítani. Ugyanis

$$m \frac{dv}{dt} = F(t) \quad (2)$$

(F a ható erő), tehát $v(t)$ ismeretében a későbbi $v(t+dt)$ így adódik:

$$v(t+dt) = v(t) + \frac{dv}{dt} dt = v(t) + \frac{1}{m} F(t) dt.$$

Hasonló a helyzet az elektromágneses tér esetében. A Maxwell-egyenletek értelmében az elektromos (mágneses) tér időbeli változásának előidézői a mágneses (elektromos) tér örvényei.

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \vec{H}, \quad \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -c \operatorname{rot} \vec{E}.$$

A téregyenletek lehetővé teszik azt, hogy a tér t pillanatban kialakult állapotából a későbbi $t+dt$ pillanatban kialakuló állapotra következtethessünk.

$$\vec{E}(t+dt) = \vec{E}(t) + c dt \operatorname{rot} \vec{H}(t),$$

$$\vec{H}(t+dt) = \vec{H}(t) - c dt \operatorname{rot} \vec{E}(t).$$

A példák kijelölik az utat, amelyen haladnunk kell. Szükség van a ψ állapotfüggvény időbeli változását megszabó törvény ismeretére. Azt várjuk ettől, hogy ψ -t egy t pillanatban ismerve $\partial\psi/\partial t$ értékét kiszámíthassuk és így adott kezdeti állapotból kiindulva az elektron (vagy más kvantummechanikai rendszer) későbbi állapotaira, az állapot változására, az atom mozgására következtethessünk:

$$\psi(t+dt) = \psi(t) + \frac{\partial\psi}{\partial t} dt.$$

Eddigi vizsgálatainkban az idő mint fizikai mennyiség nem szerepelt. Hogy az időbeli állapotváltozás törvényeivel megismerkedjünk, a helykoordináták operátorai után foglalkoznunk kell az időhöz tartozó operátorral is. Az eljárás menete kézenfekvő. Már a klasszikus fizikában is ismeretes volt, hogy a helykoordináták és az impulzus összefüggéséhez hasonló kapcsolatban az energia (-1 -szerese) áll az idővel. Ezért a kvantummechanika (I. 15) alatt megismert alaptörvényét kiegészítjük a t időoperátor és az E energiaoperátor közt fennálló Heisenberg-féle felcserélési törvénnyel:

$$tE - Et = \frac{h}{2\pi i}. \quad (3)$$

Könnyen találhatunk olyan operátorokat, amelyek a (3) felcserélési törvényt kielégítik. p és x min-tájára

t operátora legyen a t időparaméterrel való szorzás: $t \equiv t$,

E operátora legyen a t szerinti deriválás

$$i\hbar/2\pi\text{-szerese: } E \equiv \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t}. \quad (4)$$

Tisztáztuk az időnek mint fizikai mennyiségnek operátor-tulajdonságait. Ennek kapcsán az energiaoperátor új alakjára jutottunk. Egy másik, koordinátákkal kifejezett alakot (mely a kinetikus és potenciális energia összegeként adódott) (I. 26) alatt már megismertünk. Matematikailag elképzelhető volna, hogy az energiaoperátor H és E alakja bizonyos függvényre alkalmazva különböző eredményre vezessen. Fizikailag azonban ez elképzelhetetlen: egy atom energiája fizikai jelentéssel bíró fogalom, ezért fizikai szerepe csak az olyan ψ függvényeknek lehet, amelyekre a két operátornak azonos hatása van:

$$E\psi = H\psi, \quad (5)$$

azaz (4) és (I. 26) alapján részletezve

$$\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z)\psi. \quad (6)$$

Az (5) egyértelműségi követelmény tehát egy parciális differenciálegyenletre vezetett, amely lehetővé teszi az állapotfüggvény időbeli változásának figyelemmel kísérését. A (6) egyenletet *állapotegyenletnek* nevezzük. Az egyenlet olyan szerepet tölt be az atomok, elektronok mozgásának kvantummechanikai leírásánál, amilyent a (2) Newton-féle mozgástörvény a klasszikus mechanikában. Az egyenletet először Erwin Schrödinger állította fel 1926-ban, hullámoptikai analógiák alapján. Ez a gondolatmenet Novobátzky Károlytól származik.

Amikor az elektron az atom valamelyik E energiaszintjén (pl. alapállapotban) tartózkodik, a teljes állapotfüggvénye ilyen alakú:

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) e^{-\frac{2\pi i}{h} E t} \quad (7)$$

φ az (I. 27) sajátértékegyenlet által meghatározott energiasajátfüggvény. Egyszerű behelyettesítés és (I. 27) figyelembevétele meggyőző arról, hogy a (7) állapotfüggvény megoldása a (6) állapotegyenletnek. (7) az energia E és \mathbf{H} operátorának egyaránt E sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye és a t idő multával állandóan sajátfüggvény marad. A (7) megoldás szerint az atom tartósan az E energiaszinten marad: bármikor végzünk el energiamérést, mindig éppen ezen kiválasztott E értékre jutunk.

Megváltozik a helyzet, ha az atomot külső behatás éri, például fény világítja meg. A fényhullámot valamilyen $\vec{A}(t) = a \sin 2\pi\nu(t-x/c)$ alakú vektorpotenciál írja le. Ilyenkor a V' potenciális energiában az atommag Coulombterét leíró $U = e/r$ skalárpotenciál mellett a vektorpotenciál is szerepel:

$$V' = -eU - \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A} = V - \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}(t). \quad (8)$$

Ez azt eredményezi, hogy a hidrogénatom (26,30)-ban megadott \mathbf{H} energiaoperátora kibővül a fényhullám és atomielektron kölcsönhatását leíró taggal:

$$\mathbf{H}' = \mathbf{H} - \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}(t). \quad (9)$$

Az új

$$\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\mathbf{H} - \frac{e}{mc} \vec{p} \cdot \vec{A}(t) \right) \psi \quad (10)$$

állapotegyenletnek (7) már nem megoldása. Ez azt jelenti, hogy az atom nem marad az E energiaszinten, hanem a beeső fényhullám hatására megváltoztatja állapotát, más energiaszintre megy át. Az állapotegyenlet ilyen módon leírja az atom gerjesztődésének folyamatát. (10)-et megoldva kiszámíthatjuk pl. azt, hogy a kezdőpillanatban adott energiaszintről (pl. alapállotból) kiinduló atom t idő elteltével milyen állapotba kerül, ha adott intenzitású és rezgésszámú fénysugárral világítjuk meg. Ezáltal előreláthatjuk a megvilágítás végén elvégzett energiamérés eredményét is. Az állapotegyenlet tehát így, az atomfizikának megfelelő módon írja le az atomok állapotának időbeli változását, általános értelemben vett mozgását.

A megmaradási tétel

A (6) állapotegyenlet által meghatározott $\psi(x, y, z, t)$ állapotfüggvény adott t pillanatban különböző helyeken különféle értékeket vesz fel, akárcsak a térerősség-komponensek az elektromágneses térben. Mégsem szabad azt gondolnunk,

hogy ψ valamilyen „termenység” szerepét játssza, amelyet pontról pontra kimérhetünk. Ezt elsősorban ψ komplex jellege mutatja (lásd az állapotegyenletben szereplő i -t). Mint alább látni fogjuk, bizonyos ψ -ből lezármaztatott kifejezéseknek mégis elég szemléletes fizikai jelentése van.

A

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{4\pi m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{2\pi i}{h} V(x, y, z) \psi \quad (11)$$

állapotegyenlet egy $w = u + iv$ alakú komplex kifejezés zérus voltát fejezi ki, következésképp zérus ennek komplex konjugáltja, $w^* = u - iv$ is. Tehát

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i\hbar}{4\pi m} \left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial z^2} \right) + \frac{2\pi i}{h} V(x, y, z) \psi^*. \quad (12)$$

Szorozzuk meg a (11) egyenletet ψ^* -gal, (12)-t ψ -vel és adjuk őket össze. A szorzat differenciálási képletét felhasználva kapjuk:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} = 0,$$

azaz

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0, \quad (13)$$

ahol

$$\rho = \psi^* \psi, \quad j_x = \frac{i\hbar}{4\pi m} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \text{ stb.} \quad (14)$$

Ez olyan egyenlet, ami valamilyen mennyiség megmaradását írja le. (Hasonló egyenlet írja le az áramlástanban a tömeg, az elektromosságban a töltés megmaradását.) Integráljuk (13)-at valamilyen τ térfogatra. (F ennek határfelülete.) A vektorszámítás Gauss-tételét felhasználva kapjuk:

$$-\frac{d}{dt} \int_{\tau} \rho d\tau = \int_F \vec{j} d\vec{F}. \quad (15)$$

Látható módon $\int_{\tau} \rho d\tau$ valamilyen entitás τ térfogatban levő mennyiségét jelenti. Ez csak akkor csökken, ha a határfelületen át j sűrűségű kiáramlás történik. Ha a τ térfogatot az egész térre kiterjesztjük, ψ -nek a végtelenben való eltűnése miatt (lásd pl. az (1) alakot) j a határfelületen zérus, ezért

$$\int_{\infty} \rho d\tau = \text{const.} \quad (16)$$

Az állapotegyenletből levezetett (13) egyenletet valamiféle értelemben most is az anyagra vonatkozó megmaradási tételnek tekinthetjük. Schrödinger eredeti feltevése szerint ρ az elektron tér-

fogategységben levő „anyagmennyiségét” (mondjuk tömeg- vagy töltésmennyiségét), j pedig az 1 cm^2 felületen időegység alatt átáramló anyagmennyiséget jelenti. $\int_{-\infty}^{\infty} \rho d\tau$ az elektron teljes anyagmennyisége, ez (16) szerint állandó, amint annak lennie is kell. Ha az elektron teljes anyagmennyiségét egységnyinek választjuk,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi d\tau = 1 \quad (17)$$

lesz. Mivel a (6) állapotegyenlet ψ -ben és deriváltjaiban lineáris, a megoldásnak alkalmasan választott állandóval való végiszorzása révén elérhető, hogy a (17) normálási feltétel teljesüljön.

Ha az elektron energiasajátállapotban van (pl. meghatározott atomi energiaszinten tartózkodik), (7) alapján az anyagsűrűség

$$\rho = \psi^* \psi = \varphi^* \varphi = |\varphi(x, y, z)|^2, \quad (18)$$

időtől független, stacionárius eloszlást mutat. Ez egyszersmind időben változatlan töltéssűrűséget is jelent. Mivel ilyen töltéssűrűség nem sugároz, érthetővé válik az energiasajátállapot tartós jellege.

A klasszikus mechanika, mint határeset

$|\psi|^2$ -nek az elektron anyagsűrűségével való azonosítása azt jelenti, hogy az elektront nem pontszerűnek tekintjük, hanem véges térrészben

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{x}}{dt} &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(x \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + x \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx = \frac{i\hbar}{4\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(x \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi - x \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) dx = \\ &= \frac{i\hbar}{4\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} x \psi - \psi^* \frac{\partial(x\psi)}{\partial x} \right) + 2\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] dx = \frac{-i\hbar}{2\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx. \end{aligned} \quad (20)$$

(Felhasználtuk, hogy az első tag kiintegrálható és hogy $\psi(\pm\infty) = 0$.)

Számítsuk ki az elektron tömegének és tömegközéppontja gyorsulásának szorzatát.

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t \partial x} \right) dx = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \right] dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \frac{\partial V}{\partial x} dx = \\ &= -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) dx - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V}{\partial x} \rho dx. \end{aligned}$$

Az első tag ismét kiintegrálható és zérust ad. A második tagban a potenciális energia differenciálhányadosa szerepel, ami a klasszikus mechanikából ismert módon az $F(x, t)$ erőt szolgáltatja. A második tag ennek ρ sűrűségeloszlására vett középértéke. Így a tömegközéppont mozgására a következő törvényt kapjuk:

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = \bar{F}(t); \quad \text{ahol} \quad \bar{F}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(x, t) \rho(x, t) dx. \quad (21)$$

Az elektron (vagy más atomi részecske) tömegközéppontja úgy mozog, hogy gyorsulásának a részecske tömegével való szorzata a ható erőnek az anyageloszlásra képezett középértékével egyenlő. Ez Ehrenfest tétele.

folytonosan eloszlott, „elkent” felhőszerű képződménynek. A kvantummechanika tehát nem a klasszikus tömegpont élesen meghatározott $x(t)$ koordinátaival és $v(t)$ sebességével írja le az elektront, hanem az áramlástanban is szokásos ρ anyagsűrűséggel és $v = j/\rho$ sebességeloszlással. Tudjuk azonban, hogy a klasszikus mechanika (2) mozgástörvényének is van valóságtartalma. Az elektroncsőben, katódsugárcsőben mozgó elektron esetében jó eredményekre jutunk, ha az elektront tömegpontnak tekintjük és rá Newton (2) mozgástörvényét alkalmazzuk. Tisztáznunk kell, hogy ez miként egyeztethető össze a kvantummechanikai mozgásleírással.

Az elkent elektron nem lokalizálható egy pontra, hiszen ψ véges térrészen különbözik zérustól. Bevezethetjük azonban az elektron helyzetének szummatórikus jellemzésére a tömegközéppont fogalmát. A tömegközéppont koordinátája \bar{x} sűrűségfüggvénnyel leírt anyageloszlás esetén

$$\bar{x}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} x \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx. \quad (19)$$

(Egyszerűség kedvéért egy egyenes mentén történő mozgásra korlátozódunk. Ekkor egyetlen x -koordináta használata elegendő.) Határozzuk meg az állapotegyenlet alapján a tömegközéppont mozgástörvényét. (11) és (12) felhasználásával a tömegközéppont sebessége

Tételezzük fel, hogy az elektron által elfoglalt tartományban (ott, ahol $\rho = |\psi|^2$ számottevően különbözik zérustól) az erő praktikusán állandó. Ilyenkor (21) integrandusában $F(x, t)$ a tömegközéppontban felvett $F(\bar{x}, t)$ értékkel helyettesíthető. Ez az x integrációs változótól független, az integrál elé kiemelhető. (17)-et is tekintetbe véve marad

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = F(\bar{x}, t). \quad (22)$$

Ilyenkor tehát a részecske úgy mozog, mintha egész tömege a tömegközéppontba volna lokalizálva és a tömegközéppontban érvényes erő hatására gyorsulna. *Térben lassan változó erő esetére tehát a kvantummechanikai állapotegyenletből sikerült levezetni a klasszikus mechanika, Newton-féle mozgástörvényét.* Ehrenfest tétele azt mutatja, hogy az állapotegyenlet határesetként magában foglalja az egész klasszikus mechanikát. (Érthető tehát, hogy az elektron mozgása makroszkópikus erőterben klasszikusan tárgyalható.) Egyben láthatjuk a klasszikus tárgyalás határait is. Ha az elektronra ható erő gyorsan változik azon a tartományon belül, ahol az állapotfüggvény zérustól különbözik, akkor a klasszikus mechanika használhatatlan. Ez a helyzet például a hidrogénatom esetében: a 10^{-8} cm átmérőjű térrészre elkent elektron belsejében a mag Coulomb-tere igen erősen változik.

Ehrenfest tétele azt mutatja, hogy a klasszikus mechanika és a kvantummechanika nem egymás mellett, a maguk elszigetelt területén érvényes fejezetei a fizikának (mint pl. az elektromosságtan és a hőtan). A kvantummechanika szolgáltatja a részecskék mozgásának általános törvényeit, amelyek a makro- és mikrovilágban egyaránt érvényesek. A klasszikus mechanika ennek olyan közelítése, amely bizonyos (a makrovilágban teljesülő) feltételek mellett jól használható, de máskor (a mikrovilágban) alkalmazhatatlan.

Az anyag hullámtermészete

Egy szabad részecske ($V = 0$) egyenes mentén történő mozgását a következő állapotegyenlet írja le:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{i \hbar}{4\pi m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0. \quad (23)$$

Ennek legegyszerűbb megoldása a következő:

$$\psi = K e^{\frac{2\pi i}{h}(px - Et)}, \quad \text{ahol} \quad E = p^2/2m. \quad (24)$$

(24) a p impulzusoperátornak és az E energiaoperátornak egyaránt sajátfüggvénye, p és E a megfelelő sajátértékek:

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} \psi = p \psi, \quad \frac{i \hbar}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t} \psi = E \psi.$$

A (24) állapot tehát egy jól meghatározott E energiával és p impulzussal haladó részecskét ír le. A p impulzus és így az E energia tetszőleges értékeket vehetnek fel, tehát a szabad részecske energiasajátértékei nem diszkrétnek, hanem folytonos sokaságot alkotnak.

A (24) függvény komplex alakban felírt x irányban haladó síkhullámot ír le. (24)-et valós és képzetes részre bontva

$$\psi = K \cos \frac{2\pi}{h}(px - Et) + i K \sin \frac{2\pi}{h}(px - Et).$$

Ha az x helyről átmegyünk az $x + h/p$ helyre, ψ ugyanazt az értéket veszi fel, tehát ψ a térben periodikus, a

$$\lambda = h/p = h/mv \quad (25)$$

periódust nevezzük hullámhossznak. Ha viszont a t pillanatról a $t + h/E$ pillanatra térünk át, szintén ψ azonos értékére jutunk, tehát ψ időben is periodikus. A h/E periódus a rezgésidő, ennek reciproka

$$\nu = E/h \quad (26)$$

a megfelelő rezgésszám. Azt látjuk tehát, hogy meghatározott impulzussal és energiával továbbterjedő részecske állapotfüggvénye egy síkhullám sajátosságait mutatja. A (25) és (26) összefüggések ugyanazok, mint amelyek fotonra is érvényesek. A részecskéhez tartozó λ Broglie-hullámhossz annál kisebb, minél gyorsabban mozog a részecske. Az anyagsűrűség állandó ($\rho = |\psi|^2 = |K|^2$), tehát most szó sincs kis térrészre lokalizált anyageloszlásról. (Ezért (24) esetében nem is érhető el a (17) normálási feltétel fennállása.)

Az a felismerés, hogy az elektron és más atomi részecskék ugyanolyan hullámsajátosságokat mutatnak, mint a foton, a kvantumfizika olyan eredménye, mely a klasszikus tömegpont-mechanikával szöges ellentétben áll. A részecskék (24) által leírt állapotát nevezik anyaghullámnak. Louis de Broglie és Erwin Schrödinger az anyag hullámtermészetét felismerve jutottak el a kvantummechanika állapotegyenletéhez. A Broglie-Schrödinger-féle hullámmechanika és a Heisenberg Dirac-féle operátor-mechanika azonossága csak később tisztázódott.

Említettük, hogy a (6) vagy (23) állapotegyenlet lineáris. Ennek egyik fontos következménye az, hogy két megoldásnak, ψ_1 -nek és ψ_2 -nek az összege, $\psi_1 + \psi_2$ is megoldás, ez is fizikai állapotot ír le. Ezt a felismerést nevezzük a *szuperpozíció elvének*.

Az elv egyik legfontosabb folyamánya az, hogy két síkhullám összege, szuperpozíciója is fizikai megoldás. Tekintsük a következő, kísérletileg megvalósítható esetet: Adott sebességű elektronnyaláb által előállított anyaghullámot valamilyen módon kettéválasztunk, majd különböző utak megtétele után újra egyesítjük azt. A találkozó hullámok hullámhossza megegyezik, mozgá-

suk legyen azonos irányú, intenzitásuk legyen egyenlő, a létrehozott útkülönbséget jelölje d . Ekkor a két hullám szuperpozíciójából adódó megoldás

$$\psi = K e^{\frac{2\pi i}{h} [px - Et]} + K e^{\frac{2\pi i}{h} [p(x+d) - Et]}$$

Mi lesz ebben az állapotban a sűrűségeloszlás?

$$\begin{aligned} \rho &= \psi^* \psi = 2 |K|^2 \left(1 + \cos 2\pi \frac{pd}{h} \right) = \\ &= 2 |K|^2 \left(1 + \cos 2\pi \frac{d}{\lambda} \right). \end{aligned}$$

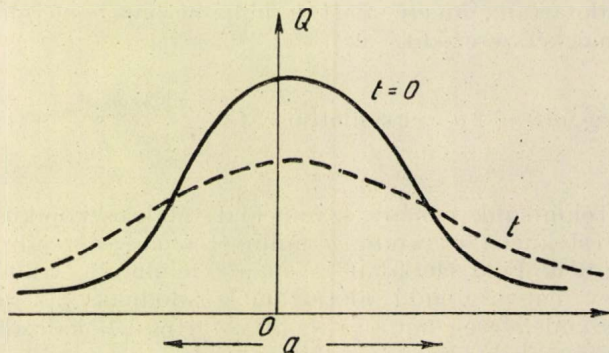
Látható ebből, hogy az eredő hullám intenzitása általában nem az összetevő intenzitások összege, $2|K|^2$, hanem annál kisebb és nagyobb egyaránt lehet: az elektronnyaláb is az *interferencia* jelenségét mutatja. Ha az útkülönbség a hullámhossz egészszámu többszöröse, az intenzitás megnégyszereződik, ha viszont az útkülönbség a hullámhossz fele, teljes kioltás következik be. *Daviss*on és *Germer* 1927-ben kísérletileg igazolta az elektronnyaláb interferenciaképességét. (Azóta más részecskék, így neutronok, sőt egész atomok esetében is kimutatták a hullámtermészetet, az interferencia felléptét.) Ez a kísérlet a klasszikus mechanikai természetleírás alapvető hiányosságaira mutatott rá és egyben a kvantummechanika döntő bizonyítékát szolgáltatta.

A kristályok a különböző hullámhosszúságú sugarakat különböző irányokba térítik el. Ezt Laue a röntgensugarak hullámtermészetének kimutatására használta fel, ma ezt a módszert alkalmazzák neutronok hullámhossz, tehát sebesség szerinti szelektálására. Megfordítva pedig a kristályok szerkezetét nemcsak röntgen-, hanem elektron- és neutron-sugarakkal is tanulmányozzák.

Az anyaghullámok (25) Broglie-féle hullámhosszképletének nagy szerepe van a mikroszkópiában. Tudjuk, hogy egy mikroszkóp a használt fény hullámhosszánál kisebb test részleteit nem képes megmutatni. Így a fénymikroszkóp felbontásának javítása elé korlátot állít az a körülmény, hogy rövid hullámhosszú elektromágneses hullámok (Röntgen-sugarak) fókuszálására egyszerű módszerek nem ismeretesek. Sokkal kedvezőbb a helyzet az anyaghullámok esetében. Elektronnyalábot elektromos és mágneses terekkel minden hullámhossz-tartományban jól tudunk fókuszálni, így az elektronnyalábbal dolgozó *elektronmikroszkóp* felbontóképességének nincs alsó határa. A hullámhossz tetszőlegesen kicsivé tehető, ehhez csak az elektronok sebességét kell a szükséges mértékben megnövelni. Elektronmikroszkóppal nemcsak baktériumok apró részleteit sikerült kinagyítani, hanem legutóbb (többszáz millió eV-os elektronnyalábot alkalmazva) a 10^{-12} cm átmérőjű atommagok is a vizsgálható tárgyak körébe kerültek (*nukleáris elektronmikroszkóp*).

A hullámfüggvény valószínűségi értelmezése

A jól meghatározott energiájú és impulzusú részecskeállapot nagy térrészre szétszórt síkhullámnak felel meg. Egyes részecskék azonban az atomfizikában is térben többé-kevésbé jól lokalizálva végzik mozgásukat. Például a ködkamrában hagyott nyom a klasszikus pálya-fogalmat állítja elé. Ezért meg kell ismerkednünk az állapotegyenlet olyan megoldásával is, amely térben lokalizált részecskeállapotot ír le.



1. ábra

Áttekinthetőség kedvéért ismét az egydimenziós mozgás esetét tárgyaljuk. Olyan koordináta-rendszert használunk, amelyben a részecske tömegközéppontja a kezdőpontban nyugszik. Ilyen állapotot ír le a (23) állapotegyenlet következő megoldása:

$$\psi(x, t) = \frac{(4/\pi)^{1/4}}{\sqrt{a + i \frac{2\hbar t}{\pi m a}}} e^{-2x^2/[a^2 + 2i\hbar t/\pi m]}. \quad (27)$$

Ez az $x = 0$ pontra valóban szimmetrikus. A megfelelő sűrűség eloszlás

$$\rho(x, t) = \frac{(4/\pi)^{1/2}}{\sqrt{a^2 + 4\hbar^2 t^2/\pi^2 m^2 a^2}} e^{-4x^2/[a^2 + 8\hbar^2 t^2/\pi^2 m^2 a^2]}. \quad (28)$$

A $t = 0$ pillanatban érvényes

$$\rho(x, 0) = \frac{2}{a\sqrt{\pi}} e^{-4x^2/a^2} \quad (29)$$

sűrűségeloszlás „haranggörbe” alakú (1. ábra kihúzott vonala). A sűrűség maximuma az $x = 0$ pontban van. A középponttól távolodva a sűrűség rohamosan csökken, az $x = \pm a/2$ koordinátájú pontokban értéke a maximum e -edrésze. Ezért az elektron által „elfoglalt” térrész hozzávetőleges átmérőjének az a távolságot tekinthetjük, a értékét elég kicsire választva elérhetjük, hogy a (27) állapot a kezdőpillanatban nagy pontossággal lokalizált legyen, így megközelítse a klasszikus mechanikai tömegpont tökéletes lokalizáltságát. Az ilyen jellegű megoldásokat szokás *hullámcsomag*nak nevezni.

Vizsgáljuk meg, miként változik a hullámcsomag-állapot az idő múlásával. A későbbi t pillanatban érvényes sűrűségeloszlás a kezdeti (29)-től csak abban különbözik, hogy az átmérő a helyett

$$a(t) = \sqrt{a^2 + 4h^2 t^2 / \pi^2 m^2 a^2}. \quad (30)$$

Az eloszlás tehát haranggörbe alakú maradt, csak átmérője állandóan nő: a hullámcsomag ellaposodik, szétfolyik (1. ábra szaggatott vonala). Az az időtartam, amely alatt a hullámcsomag mérete megkétszereződik, az

$$a(t) = 2a \quad \text{egyenletből} \quad t = \frac{\pi\sqrt{3}}{2} \frac{ma^2}{h}. \quad (31)$$

Tekintsünk néhány számpéldát. Makroszkópikus testeknél (m gramm, a milliméter nagyságrendű) t -re a Föld életkorát is messze felülmúló, trillió év nagyságrendű időtartamok adódnak. Ez is szemléletesen mutatja, hogy a tartósan lokalizált részecskék létezését feltételező klasszikus mechanika makroszkópikus tárgyak esetében teljesen kielégítő leírást ad. Tekintsünk azonban egy atomon belül lokalizált elektront. Ez legalábbis $a = 10^{-9}$ cm kezdeti pontosságot kíván meg. $m = 10^{-27}$ g, ami behelyettesítés után szétfolyási időre 10^{-18} sec-nál rövidebb értéket ad. A szubatomi méretekben lokalizált elektron tehát észrevehetetlenül rövid idő alatt szétfolyik, elkentsége eléri az atomátmérőt. Ekkor pedig a Coulomb-erőtér olyan nagy mértékben változik a hullámcsomag belsejében, hogy a klasszikus mozgástörvények, klasszikus pálya-fogalom teljesen csődöt mondanak.

A hullámcsomag szétfolyása a kvantummechanika jellegzetes és érdekes eredménye, amelynek meglepő következményei vannak. Végezzünk el egy gondolatkísérletet. Helyezzünk egy jól lokalizált elektront merevfalú doboz közepére. Az idő multával a hullámcsomag egyre jobban szétfolyik, eléri a doboz falait. Válasszuk ezután a dobozt középen behelyezett merev fallal két részre. Ezáltal elértük azt, hogy két doboz jött létre, mindegyikbe az elektron anyagának fele jutott, hiszen bármelyik doboz térfogatra képezzük az $\int \rho d\tau$ integrált, a szimmetria folytán $1/2$ -et kapunk. Az egyik dobozt akár el is távolíthatjuk. A visszamaradt dobozról, azt kellene mondanunk, hogy benne $m/2$ tömeget és $-e/2$ töltést kell találnunk.

Természetesen ilyen eredményre semmiféle kísérlet, semmilyen mérés nem vezethet. Az elektron oszthatatlan elemi részecske, tömegénél kisebb tömeget, töltésénél kisebb töltést soha nem észlelünk, eltekintve a zérus értéktől. Az elektront éppen azért nevezzük *elemi* részecskének, mert oszthatatlanságát kívánjuk hangsúlyozni. A ρ sűrűségfüggvénnyel leírt „elkent elektron” fogal-

ma összeütkezésbe került az elektron oszthatatlanságával.¹

Az elkent részecske-felfogásnak és az elemi részecskék oszthatatlanságának alapvető ellentmondása szükségessé tette a *Broglie-Schrödinger*-féle anyag-hullám-értelemezés módosítását. Az állapotfüggvénynek azt a fizikai értelmezését, amely figyelembe veszi az oszthatatlanságot *Max Born, Pascual Jordan és Niels Bohr* adták meg.

A gondolatkísérlet magyarázatánál nyilvánvalóan helytelen az az értelmezés, hogy $\int |\psi|^2 d\tau$ az

elektron τ térfogatú dobozba jutó anyagmennyiségét írja le, hiszen vagy megtaláljuk a dobozban az egész elektront vagy nem. Ellenben értelmes eredményre jutunk, ha a következőt mondjuk:

$\int |\psi|^2 d\tau$ annak a valószínűsége, hogy az (oszthatatlan) elektront a kiszemelt τ térfogatban megtaláljuk. Ez az állapotfüggvény valószínűségi értelmezése. A valószínűségi értelmezés szerint $|\psi|^2$ nem anyagsűrűséget jelent a klasszikus értelemben, hanem valószínűségi sűrűséget, a térfogategységben való tartózkodás valószínűségének mérőszámát.

Felvetődik a kérdés, mi értelme lehet valószínűségi eloszlásról beszélni akkor, ha az állapotfüggvény egy részecskét ír le, pl. a hidrogénatom esetében vagy a hullámcsomag-megoldásnál? Egy részecskére valóban nem alkalmazható a valószínűségi számítás. Megtehetjük azonban azt, hogy sok hidrogénatomot, sok azonos állapotú elektront tekintünk. Valamilyen módon mindegyik helyét meghatározzuk. A különböző elektronokon elvégzett helymérések eredményei különbözni fognak egymástól, de a mérési eredményeket összevetve kiadódik a $|\psi|^2$ valószínűségi sűrűségeloszlás. Lényegében ezt a kísérletet végezte el *Davissón és Germer*. Ugyanazon elektronforrásból kilépő, ugyanolyan gyorsítóterén áthaladt elektronok estek a kristályra. A külső feltételek azonos volta biztosította, hogy az egyes elektronok ψ állapotfüggvényei egyező alakúak voltak. A felfogó ernyő fényképlemez volt, a beeső elektronok egyes ezüstbromid-molekulákat ionizáltak. A sok elektron által együttesen kialakított feketedés azután azt az interferenciaképet mutatta, ami pontosan $|\psi|^2$ -nek felel meg.

A valószínűségi felfogás alapján érthetjük meg azt is, amit az állapotfüggvény az atomban kötött elektron helyzetéről mond. A hidrogénatom alapállapotában (1) és (7) szerint

$$\psi = A e^{-r/r_0} e^{-\frac{i\pi e}{hr_0} t}, \quad (r_0 = h^2/4\pi^2 m e^2), \quad (32)$$

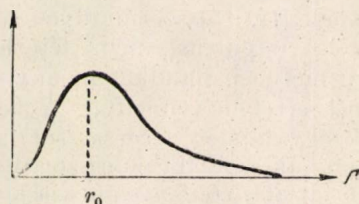
¹Hogy az ellentmondást felismerjük, nem kell a fenti, kissé mesterkélt gondolatkísérlethez ragaszkodnunk. Ejtsünk gyenge elektronnyalábot kristályra. Elhajlási jelenség jön létre. Ha megadott irányban, szűk térszög alatt észleljük az elektronok érkezését, mindig az elektron anyagának (tömegének, töltésének) tört-részt kellene várnunk, hiszen az egyes elektronokat leíró anyaghullám részei különböző irányokba térülnek el. Fél, harmad, negyed elektronokat azonban még soha nem jelzett egy részecskeszámláló sem.

tehát $\varrho = |A|^2 e^{-2r/r_0}$.

Annak valószínűsége, hogy az elektron és mag távolsága r és $r + dr$ közé essen, ϱ -nak és a dr vastagságú gömbhéj térfogatának szorzata:

$$W(r) dr = \varrho \cdot 4\pi r^2 dr = 4\pi |A|^2 e^{-2r/r_0} r^2 dr.$$

A $W(r)$ radiális sűrűségeloszlás menetét a 2. ábra tünteti fel. A függvény maximuma r_0 távolságban van, r_0 pontosan megegyezik a legbelső Bohr-pálya sugarával. Látható tehát, hogy a Bohr-modell tájékoztató közelítést jelent: a Bohr-féle pályák nem pontos pályák a klasszikus értelemben,



2. ábra

hanem csak a legvalószínűbb tartózkodási távolságot adják meg. Az atomok elektron eloszlásának kísérleti tanulmányozása röntgenelhajlási képek segítségével elvégezhető. Az így kapott eredmények összhangban állnak a kvantummechanikailag kiszámított állapotfüggvény által leírt sűrűségeloszlással.

A kvantummechanika az elektronok és más atomi részek mozgását nem a pontos lokalizációt feltételező pálya-fogalommal írja le, hanem csak valószínűségi kijelentéseket tesz a térbeli helyzetre vonatkozóan. Ez azonban nem jelenti azt, hogy az így szerzett ismeretek nem olyan objektívek, amilyeneket a klasszikus fizikában megszoktunk. Az elektronnalábbal létesített interferenciaképet, az atomok töltésfelhőjének sűrűségeloszlását először elméletileg határozták meg, csak ezután végezték el azokat a kísérleteket, amelyek az elmélet következtetéseit igazolták. Ez is azt mutatja, hogy a bizonyos esetekben valószínűségi törvényekkel dolgozó kvantummechanika éppúgy a természet objektív törvényeit fejezi ki, mint a klasszikus mechanika, sőt annál tökéletesebb leírást ad, hiszen a jelenségek szélesebb körét öleli fel. (Nem szabad azt gondolnunk, hogy a kvantummechanika kijelentései mind statisztikus jellegűek, amelyek csak sok elektronon elvégzett mérés-sorozattal ellenőrizhetők. A kvantummechanika megadja a hidrogénatom energiájának lehetséges értékeit is. Hogy az atom egyetlen elektronjának energiája mindig ezen értékek egyikével egyezik meg, hogy az alapállapotú atom ionizációs energiája mindig $-13,5$ eV, az egyetlen elektronra vonatkozó törvényszerűség leszögezése.)

A fizikai mennyiségek mérése

Hajtsunk végre a ψ állapotban levő rendszeren valamilyen fizikai mérést. Az eredmény feltétlenül a megmért mennyiség (energia, impulzus,

impulzusmomentum stb.) valamelyik sajátértéke lesz. Ha a ψ állapotfüggvény történetesen az A operátor által reprezentált mennyiség valamelyik sajátfüggvényével egyezik meg, $\psi(t) = \varphi_n$, az elvégzett mérés biztosan a megfelelő k_n sajátértékre vezet.

$$A \varphi_n = k_n \varphi_n.$$

Előfordulhat azonban, hogy ψ nem egyezik meg egyik sajátértékkel sem. Ez a helyzet pl. a (27) hullámsomag-megoldásnál: az sem az impulzusnak, sem az energiának nem sajátfüggvénye. Kérdés, mit lehet mondani ekkor ψ ismeretében a mérés kimenetelére vonatkozólag?

Bármely ψ állapotfüggvény előállítható a sajátfüggvények szuperpozíciójaként.²

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n. \quad (33)$$

Ha a ψ sajátállapot, a (33) kifejtésben szereplő együtthatók közül csak egy, mondjuk c_n különböző zérustól: $c_n = 1$, $\psi = \varphi_n$. Ekkor biztosan tudjuk, hogy a mérés a k_n eredményre vezet. Kevert állapotban (így nevezzük azokat, amelyek nem sajátállapotok) ilyen egyértelmű kijelentés nem tehető, csak a következőt mondhatjuk: A ψ állapotban az a φ_n sajátállapot van „erősebben” képviselve, amelynek kifejtési együtthatójából képezett $|c_n|^2$ kifejezés nagyobb. Fel kell tételeznünk, hogy az ennek megfelelő k_n sajátérték mérési eredményként való nyerése is valószínűbb. Ezekután annak valószínűségüül, hogy a rendszeren elvégzett mérés a lehetséges sajátértékek közül éppen k_n -et szolgáltatja, a

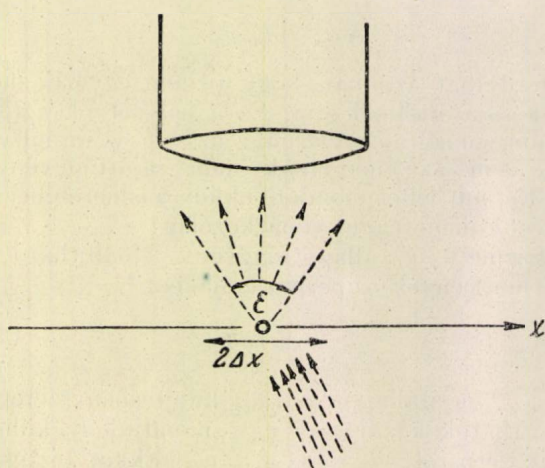
$$W(k_n) = |c_n|^2$$

kifejezést fogadjuk el. Ez a kvantummechanika *fizikai mérésekre vonatkozó alaptörvénye*. A törvény a ψ állapotfüggvény centrális jelentőségét mutatja: az nemcsak a részecske helyére vonatkozó ismereteket nyújt, hanem felvilágosítással szolgál a részecske minden jellemző adatára, a ψ állapotban levő fizikai rendszeren elvégzett bármely mérés várható eredményére vonatkozóan is. *A ψ állapotfüggvény kvantummechanikai értelemben teljes állapotleírást ad.* Az elmélet a fizikai mérések várható eredményére vonatkozólag csak valószínűségi kijelentéseket tesz. (Ezt az előző szakaszban a helymeghatározás speciális példáján láttuk.) Egyedüli kivétel az, amikor a rendszer állapota sajátállapot. Ekkor a mérés eredménye biztosan a megfelelő sajátérték.

Kevert állapotban levő atomnál nem beszélhetünk az energia vagy más mennyiség pontos értékéről, mert a mérés eredménye többféle lehet. Kérdezhetjük azonban, hogy mekkora a kérdéses mennyiség középértéke? Ez alatt a következőt értjük: Sok egymástól független, de azonos ψ állapotban levő rendszeren elvégezzük a mérést

² Ez azon tétel következménye, hogy egy hermitikus operátor sajátfüggvényei teljes függvényrendszert alkotnak.

és a kapott eredmények számtani közepét képezzük. A kérdéses mennyiség ψ állapotban vett értéke alatt értjük ezen számtani közép határértékét, ha a mérések számát minden határon túl növeljük.



3. ábra

Tételezzük fel, hogy N számú mérés közül N_n alkalommal adódik ki a k_n érték. Ekkor \bar{A} középértéke

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum_n k_n N_n}{N} = \sum_n k_n \lim \frac{N_n}{N} = \\ &= \sum_n k_n W(k_n) = \sum_n k_n |c_n|^2. \end{aligned} \quad (34)$$

Sajátállapotban $c_n = 1$, $c_m = 0$ ($m \neq n$), tehát $\bar{A} = k_n$. Kevert állapotban azonban a mérési eredmények az \bar{A} középérték körül szóródnak. A mérési szórás jellemzésére vezessük be a középhibát, mely a $(k_n - \bar{A})^2$ szórásnégyzet átlagának négyzetgyöke:

$$(\Delta A)^2 = \sum_n (k_n - \bar{A})^2 W(k_n) = \overline{(A - \bar{A})^2}. \quad (35)$$

Sajátállapotban a ΔA középhiba zérus, kevert állapotban zérustól különbözik. Minél távolabb vagyunk a sajátállapotoktól, annál nagyobb a mérési középhiba, annál bizonytalanabb a mérés várható eredménye.

A határozatlansági összefüggés

A hidrogénatom (32) alapállapota az energiának sajátállapota, de az impulzusnak már nem. Az elektronon elvégzett energiamérés egyértelmű eredményre vezet, de az impulzus a zérus érték körül szórást mutat. Olyan állapotok nem léteznek, amelynél egyidejűleg minden fizikai mennyiség

pontos értéket vesz fel, amelynél az összes mérés középhibája zérus lenne. Ennek oka abban rejlik, hogy közös sajátállapotai csak egymással felcserélhető operátoroknak vannak. Legyen ugyanis φ az \mathbf{A} -nak és \mathbf{B} -nek egyaránt sajátfüggvénye. Ekkor

$$\mathbf{A} \varphi = a \varphi, \quad \mathbf{B} \varphi = b \varphi,$$

tehát

$$(\mathbf{A} \mathbf{B} - \mathbf{B} \mathbf{A}) \varphi = (ab - ba) \varphi = 0.$$

A mondottakból következik, hogy egymással fel nem cserélhető operátorok által leírt fizikai mennyiségeknek [(I. 15) szerint ilyen pl. a helykoordináta és impulzus] nem létezhet közös sajátállapota, melyben mindkét mennyiség élesen meghatározott értéket venne fel. A középhibák nem tehetők egyidejűleg zérussá, sőt igaz az is, hogy a középhibák szorzata nem szorítható le egy adott alsó korlát alá. Heisenbergnek a koordináta- és impulzus középhibájának szorzatára a következő egyenlőtlenséget sikerült levezetnie az (I. 15) felcserélési törvény alapján:³

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h/4\pi. \quad (37)$$

Ez a Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés. Figyelemre méltó körülmény, hogy a jobboldalon a részecske állapotától független univerzális állandó szerepel, tehát a koordináta és impulzus egyidejű mérésénél a középhibák szorzatának abszolút alsó korlátja van. A makrofizikában ez az elvi határozatlanság mérhetetlenül kicsiny. Ha pl. egy 5 g tömegű golyó helyét 1 mikron = 10^{-4} cm pontossággal megadtuk, a sebesség határozatlansága $\Delta v \geq h/4\pi m \Delta x = 10^{-24}$ cm sec⁻¹. Az elvi határozatlanságot a mérések gyakorlati pontatlansága messze felülmúlja. Más a helyzet az atomfizikában. Ha egy elektront próbálunk az atom belsejében lokalizálni, $\Delta x < 10^{-8}$ cm hibát engedhetünk csak meg. Ez viszont $\Delta v \geq 500$ km/sec⁻¹ sebességhatározatlanságot von maga után. Ha az elektron helyét egy pillanatban mérésel meg is határoztuk, mégis igen rövid időn belül elveszítjük a részecskét szemünk elől, ezért nem lehet szó atomon belüli mozgásának nyomonkövetéséről. Ugyanezt az eredményt fejezte ki a hullámcsoveg szétfolyása, amiről az előző szakaszban volt szó.

A határozatlansági összefüggés alapján több elméleti számítással nyert eredményünket új oldalról világíthatjuk meg. Az (I. 25) képletben figyelemre méltónak találtuk azt a következtetést, hogy a rezgő részecske energiája nem lehet $h\nu/2$ -nél kisebb. Az

$$E = \frac{p^2}{2m} + 2\pi^2 \nu^2 x^2$$

oszcillátor-energia zérus csak akkor lehetne, ha $p = 0$ és $x = 0$ volna, ez ellentétben áll a hatá-

³ A levezetést a Függelékben ismertetjük.

rozatatlansági összefüggéssel. Ha $\bar{p} = 0$ és $\bar{x} = 0$ középtérteket tételezünk is fel, e körül az impulzus- és helykoordináta értékek szórnak. A minimális energia kifejezése tehát

$$E_0 = \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 + 2\pi^2 \nu^2 (\Delta x)^2. \quad (38)$$

Harmonikus rezgőmozgásnál klasszikusan $x = a \sin 2\pi \nu t$, $p = m \dot{x}/dt = 2\pi \nu m a \cos 2\pi \nu t$, tehát $\bar{p}^2 = (2\pi \nu m)^2 \bar{x}^2$ és $\Delta p = 2\pi \nu m \Delta x$. Ezt a határozatlansági összefüggés által adott optimális $\Delta p \cdot \Delta x = h/4\pi$ esettel összevetve kapjuk:

$$\Delta x = \sqrt{h/8\pi^2 \nu m}, \quad \Delta p = \sqrt{m h/2}, \quad (39)$$

amit (38)-ba írva valóban a minimális energia $h\nu/2$ értékére vezetnek. Az E_0 zéruspontenergia tehát a határozatlansági összefüggéssel kapcsolatos: a (39) koordináta- és impulzus-bizonytalansággal jellemzett állapot jelenti az oszcillátornál a „nyugalom” kvantummechanika által megengedett legjobb közelítését. A zéruspontenergiát létrehozó zéruspontrezgés kísérleti kimutatása lehetséges. A fahő tárgyalásánál láttuk, hogy a szilárd anyag kristályrácsában kötött atomok oszcillátornak tekinthetők. A határozatlansági összefüggés szerint ezek az atomok még alacsony hőmérsékleten sem lehetnek teljes nyugalomban, hanem a (39) által jellemzett zéruspontrezgést végzik. A rezgést a röntgen-sugárral végzett elhajlási kísérletek igazolták: az elhajlási kép mély hőmérsékleten is bizonyos mértékig rendezetlen, elmosódott, rezgő atomokból álló rácstra jellemző jelet mutatott.⁴

Hasonló ok akadályozza meg a hidrogénatomban nagyon kis magtávolságú, nagy negatív energiájú elektronpályák kialakulását. r csökkenésével Δx csökken, így Δp és vele a kinetikus energia középtérteke olyan erősen nő, hogy ellensúlyozza a negatív Coulomb-potenciál összehúzó hatását.

Heisenberg a határozatlansági összefüggést több gyakorlati példával illusztrálta. Ezek alkalmasak arra, hogy jobban rávilágítsanak az összefüggés fizikai tartalmára. Legismertebb a mikroszkóp-példa. Említettük, hogy a mikroszkóp felbontóképesége elé a használt fény λ hullámhossza elvi határt állít. Két pont akkor választható szét, ha távolságuk,

$$\Delta x \geq \frac{\lambda}{\sin \varepsilon/2}. \quad (40)$$

ε a használt fénysugár nyílásszöge. λ csökkentésével a felbontóképeség javítható, miként arról az anyaghullámokkal kapcsolatban beszéltünk. A hullámhossz csökkentése viszont a vizsgált tárgy mérés utáni impulzusát teszi határozatlanná. Ahhoz, hogy a tárgyról fény jusson a mikroszkópba, legalább egy foton szükséges. A tárgy-

lencsét a foton akkor éri el, ha iránya a lencse tengelyétől $\varepsilon/2$ szögnél jobban nem tér el. A foton impulzusa h/λ , tehát a tárgyon szórt foton impulzusának x -komponense

$$-\frac{h}{\lambda} \sin \frac{\varepsilon}{2} \leq p_x \leq \frac{h}{\lambda} \sin \frac{\varepsilon}{2}$$

határok közé esik. A foton beesési iránya adott volt, ezért a szórt foton impulzusának határozatlansága a szóró tárgy impulzusának ugyanilyen mértékű határozatlanságát eredményezi:

$$\Delta p_x = \frac{h}{\lambda} \sin \frac{\varepsilon}{2}. \quad (41)$$

(40) és (41) egybevetéséből:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h.$$

Hasonló elemzés elvégezhető minden hely- és sebességmérésnél. A két mennyiség mérése szükségszerűen zavarja egymást, oly módon, hogy a középhibák szorzata feltétlenül a (37) által megadott korlát felett marad.⁵

A Függelékben adott levezetés mutatja, hogy a (37) határozatlansági összefüggés az (I. 15) felcserélési törvény közvetlen következménye. Az impulzus és helykoordináta operátorának fel nem cserélhető voltáról származó Heisenberg-féle felcserélési törvény tehát azt a kvantumfizikára jellemző szoros korrelációt fejezi ki, amely atomi részecskék mozgásánál a helykoordináta és impulzus közt fennáll, és amely többek közt korlátot állít e két mennyiség egyidejűen végrehajtható pontos meghatározása elé.

A határozatlansági összefüggés megengedi a helymérés pontosságának fokozását. Minél rövidebb a használt fény (vagy elektronmikroszkópban az elektronnaláb) hullámhossza, annál pontosabban határozható meg a vizsgált tárgy helye. Mérés után a tárgy állapotát kis kiterjedésű (27) hullámcsomag fogja leírni, az ilyen állapot jól megközelíti a klasszikus részecske-fogalmat. A lokalizáció pontosságát természetesen az impulzus pontatlanná válásával kell megfizetnünk. (Látuk, hogy minél szűkebb a hullámcsomag, annál sebesebb annak szétfolyása.)

Használhatunk olyan mérőberendezéseket, amelyek az impulzus pontos meghatározására alkalmasak (pl. nagyhullámhosszú fényvel, azaz kisimpulzusú fotonnal dolgozik). Mérés után a tárgy állapota impulzus-sajátállapot lehet, amelynek a (24) sfkhullám-megoldás felel meg: a hullám-sajátságok kerülnek előtérbe. Egyidejűleg eltűnik a térbeli lokalizáltság, háttérbe szorulnak a részecske-tulajdonságok.

Hogy a mérés után a tárgy állapota a klasszikus részecske-fogalomhoz vagy a klasszikus hullámfogalomhoz áll-e közelebb, attól függ, hogy a kérdéses állapotban a helykoordináta vagy az

⁴ A zéruspont-energia létezését a molekulák rezgési színképe is alátámasztja.

⁵ Teljesen hasonló eredmény vezethető le az energia és idő mérésére is, ui. ezek azonos (3) felcserélési törvényeket elgigítenek ki.

Függelék

A határozatlansági összefüggés levezetése

Fejtsünk ki egy tetszőleges ψ állapotfüggvényt a sajátfüggvények szerint:

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n, \quad (42)$$

ahol a φ_n sajátfüggvények

$$\text{normáltak: } \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^* \varphi_n dx = 1; \quad (43)$$

$$\text{és ortogonálisak: } \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^* \varphi_n dx = 0, \text{ ha } n \neq m.$$

(Egyszerűség kedvéért megint egy szabadsági fokú mozgást tekintünk.) Szorozzuk (42)-t φ_n^* -gal és integráljunk az egész tartományra. (43) figyelembevételével kapjuk:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^* \psi dx. \quad (44)$$

Ezt felhasználva a (35) középérték ilyen alakban is felírható:

$$\bar{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \mathbf{A} \psi dx. \quad (45)$$

Ez könnyen igazolható, ui. ha φ_n -ek az \mathbf{A} sajátfüggvényei, $\mathbf{A} \varphi_n = k_n \varphi_n$, (42)-nek (43)-ba való behelyettesítésével kapjuk:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \mathbf{A} \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_m c_m^* \varphi_m^* \cdot \mathbf{A} \sum_n c_n \varphi_n dx = \sum_m \sum_n c_m^* c_n k_n \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^* \varphi_n dx = \sum_n c_n^* c_n k_n = \bar{A}.$$

A koordináta és impulzus középhibájának négyzete (35) szerint az $(\mathbf{x} - \bar{x})^2$ és $(\mathbf{p} - \bar{p})^2$ négyzetes eltérések középértéke, tehát a középértékképzés (45) szabálya szerint

$$(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (x - \bar{x})^2 \psi dx, \quad (\Delta p)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dx} - \bar{p} \right)^2 \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{h^2}{4\pi^2} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - \frac{2\bar{p}h}{2\pi i} \frac{d\psi}{dx} + \bar{p}^2 \psi \right) dx. \quad (46)$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$u = x - \bar{x}, \quad \chi(u) = e^{-\frac{2\pi i}{h} \bar{p} u} \psi(\bar{x} + u). \quad (47)$$

Ha ψ abszolút négyzetének integrálja egy volt, χ -é is az lesz (és így a végtelenben minden eltűnik). (47)-ből kapjuk:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{du} \frac{du}{dx} = \frac{d}{du} \left(e^{\frac{2\pi i}{h} \bar{p} u} \chi \right) = \left(\frac{2\pi i}{h} \bar{p} \chi + \frac{d\chi}{du} \right) e^{\frac{2\pi i}{h} \bar{p} u}, \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = \left(-\frac{4\pi^2}{h^2} \bar{p}^2 \chi + \frac{4\pi i}{h} \bar{p} \frac{d\chi}{du} + \frac{d^2 \chi}{du^2} \right) e^{\frac{2\pi i}{h} \bar{p} u}.$$

Ezt és a (47) kifejezéseket (46)-ba helyettesítve, a következő egyszerű alakra jutunk:

$$(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* u^2 \chi du, \quad (\Delta p)^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* \frac{d^2 \chi}{du^2} du = \frac{h^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\chi^*}{du} \frac{d\chi}{du} du. \quad (48)$$

⁶ Tudjuk, hogy a múlt században az elektromágneses tér fizikai mibenlétének felfogása okozott hasonló nehézségeket. Még Faraday és Maxwell is csak mechanisztikus modellekkel tudta magára elképzelhetővé tenni az erőteret. Ma azonban már tisztán áll előttünk, hogy az elektromágneses tér megértéséhez nem a fizika korábban megismert fejezetéből átvett és ezért szemléletesebbnek látszó mechanikai modellek vezetnek el, hanem a tér saját önálló, másra vissza nem vezethető belső törvényeinek megismerése.

(Parciális integrálást hajtottunk végre és figyelembe vettük, hogy $\chi(\pm\infty) = 0$). Nyilvánvalóan fennáll a következő egyenlőtlenség:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\xi(u) - a\eta(u)|^2 du \geq 0.$$

Mivel egy kifejezés abszolút értékének négyzete a kifejezésnek és komplex konjugáltjának szorzatával egyezik meg,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\xi - a\eta|^2 du = \int_{-\infty}^{\infty} \xi^* \xi du + |a|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \eta^* \eta du - a \int_{-\infty}^{\infty} \xi^* \eta du - a^* \int_{-\infty}^{\infty} \xi \eta^* du. \quad (49)$$

Válasszuk $a = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \xi \eta^* du}{\int_{-\infty}^{\infty} \eta^* \eta du}$ és szorozzuk végig (49)-et $\int_{-\infty}^{\infty} \eta^* \eta du$ -val. Kapjuk:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi^* \xi du \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \eta^* \eta du \geq \left| \int_{-\infty}^{\infty} \xi \eta^* du \right|^2.$$

Mivel egy szám abszolút értéke nem lehet kisebb, mint valós részéé és mivel w valós része $(w + w^*)/2$, még inkább igaz, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi^* \xi du \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \eta^* \eta du \geq \left| \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\xi \eta^* + \xi^* \eta) du \right|^2. \quad (50)$$

Legyen $\xi = u\chi$, $\eta = d\chi/du$, ekkor a baloldal $(2\pi\Delta x \cdot \Delta p/\hbar)^2$. Mi lesz a jobboldalon? A két tag összevonása után parciálisan integrálunk:

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(u\chi \frac{d\chi^*}{du} + u\chi^* \frac{d\chi}{du} \right) du = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} u \frac{d}{du} (\chi^* \chi) du = \frac{1}{2} [u\chi^* \chi]_{-\infty}^{+\infty} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^* \chi du = -\frac{1}{2}.$$

Az utolsó lépésben felhasználtuk, hogy χ egyre normált és a végtelenben eltűnik. Mindezt (50)-ben figyelembe véve a

$$\frac{4\pi^2}{\hbar^2} (\Delta x)^2 \cdot (\Delta p)^2 \geq \frac{1}{4}$$

egyenlőtlenségre jutunk, amiből nyomban következik a (37) határozatlansági összefüggés.

Marx György
Egyetemi Elméleti Fizikai Intézet
KFKI Atomfizikai Osztály

Új energiaforrás?

Minekutána a Föld-Hold Egyesült Uránbányászati Vállalat hivatalos jelentése alapján nyilvánvalóvá vált, hogy az energiatermelés céljaira rendelkezésre álló urán- és tóriumkészletek kimerülöben vannak, a Nemzetközi Tudományos Akadémia új energiaforrás feltárására irányuló kutatásokat kezdett. Úgy látszik, hogy a munka eredménnyel kecsegtet és a 6-os rendszámú atomok esetleg szintén felhasználhatók lesznek energiaszabaddításra. Az alábbiakban ismertetjük a hivatalos okmányt, amelyet az Akadémia megbízásából O. R. Frisch professzor (Cambridge), a Harwelli Atomkutató Központ munkatársa tett közzé. A közlemény a Chemical and Engineering News folyóiratban (32. kötet 3400. oldalán) látott napvilágot, (2)954. április 1-én.

Nemrég a Föld számos helyén karbon-előfordulásokat (fekete, megkövült növénymaradványokat) fedeztek fel. Ezzel a felfedezéssel egy érdekes energia-termelési lehetőség adódott a maghasadásokon kívül.

Néhány karbon-előfordulási helyen olyan jeleket találtak, melyek azt bizonyítják, hogy a történelem előtti, prehisztorikus emberfajok már ismerték és használták ezt az elemet. Ezek a karbon valószínűleg ékszertárgyak előállítására használták és a vallásos ceremóniáknál ezzel festették feketére ábrázataikat.

Az energiaelőállítás lehetősége azon a tényen alapszik, hogy a karbon viszonylag könnyen oxidálódik, miközben magas hőmérséklet áll elő és egyúttal energia is szabadul fel, megközelítőleg 0,0000001 MW grammonként és naponként. Ez magától értetődően nagyon kevés. Azonban nagy karbonkészletek (talán sok millió tonna) lesznek esetleg a közeljövőben feltárhatók.