A KVANTUMMECHANIKAI IMPULZUS ELTOLÁSI SZIMMETRIÁVAL TÖRTÉNŐ BEVEZETÉSÉRŐL I.

FRANCZIA TAMÁS

A cikksorozat célja az, hogy bemutasson egy módszert a kvantummechanikai impulzus eltolási szimmetriával történő bevezetésére az egyetemi oktatás szemináriumai számára. A tárgyalásmód didaktikai és terjedelmi okokból feltételezi, hogy a hallgatók már megismerkedtek a kvantummechanika alapjainak olyan, az egyetemi oktatásban leginkább elterjedt kifejtésével, mely hazánkban Marx György: Kvantummechanika c. könyve nyomán vált széles körben ismertté. Mivel a fizikai mennyiségek szimmetriákkal történő bevezetése a kvantummechanika egy másik felépítését eredményezi, célszerűnek láttuk, hogy először összefoglaljuk azon definíciókat, axiómákat és tételeket, melyeket ismerni kell ahhoz, hogy az impulzust logikailag kellően megalapozva vezethessük be eltolási szimmetriával. A nem bizonyított tételeknél Marx György már idézett művére utalunk a bizonyítást illetően. Az állapotfüggvényt a szokásostól eltérően induktív úton vezetjük be, hogy megmutassuk, miként kapcsolódik kísérletileg megfigyelhető tényekhez az állapotfüggvény már akkor, amikor bevezetjük. Jelen munkában a kvantummechanikai impulzus eltolási szimmetriával történő bevezetéséhez felhasznált axióma- és tételrendszer első részét közöljük.

A közleményben az azonos tömegű és töltésű részecskéket azonos, a különböző tömegű és töltésű részecskéket különböző típusú részecskéknek nevezzük. (A spintől eltekintünk.)

1. *Definíció:* Egy N részecskéből álló rendszerhez rendelt konfigurációs téren egy 3N dimenziós euklideszi teret értünk, melynek pontjai az (x_1, y_1, z_1, ..., x_N, y_N, z_N) valós számokból álló szám 3N-esek.

2. *Definíció:* Egyetlen részecske klasszikus tömegpontszerű, másszóval hellyel rendelkező állapotán a részecske olyan állapotát értjük, melyhez az alábbiakban kifejtett módon hozzárendelhető a 3 dimenziós euklideszi tér egy pontja. A részecske t időpontbeli helyének nevezzük a tér azon P pontját, mely körüli dv térfogatelembe ha ebben a t időpillanatban egy a klasszikus elektrodinamika alapján pontszerű

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \vec{E}(\vec{r}, \nu)\cos\,(2\pi\nu t - \vec{k}(\nu)\vec{r})d\nu$$

elektromos térerősségvektorú elektromágneses hullámcsomag érkezik, melyben a mágneses térerősségvektort is hasonló Fourier-integrál állítja elő, akkor a részecske a t időpillanatban biztosan kölcsönhatásba lép ezzel a hullámcsomaggal, megváltoztatva annak impulzusát. Lényeges, hogy e definíciónak csak abban az esetben tulajdonítunk értelmet, ha a térben csak egyetlen részecske van jelen. Ugyanakkor, ha a fenti elektromágneses hullámcsomag a tér másik pontja körüli térfogatelembe érkezik a t időpillanatban, mely térfogatelem nem tartalmazza az előbbi P pontot, akkor az elektromágneses hullámcsomag biztosan nem lép kölcsönhatásba az illető részecskével a t időpillanatban.

3. *Definíció:* A 2. definíció általánosításaként egy $N > 1$ számú részecskéből álló rendszer valamely állapotához rendeljük hozzá a t időpillanatban 3N dimenziós konfigurációs terének egy pontját, ha a rendszer a t időpillanatban olyan állapotban van, hogy létezik a háromdimenziós térben N számú olyan pont, melyek koordinátái az $x_1, y_1, z_1 \ldots x_N, y_N, z_N$ valós számok, hogy e pontok körüli egy-egy dv térfogatelembe egy-egy pontszerű elektromágneses hullámcsomag t időpontbeli érkezésekor a hullámcsomagok mindegyike szóródást szenved a rendszer egy-egy részecskéjén. Ekkor a rendszer konfigurációs térbeli P pontjának nevezzük az $(x_1, y_1, z_1 \ldots x_N, y_N, z_N)$ szám 3N-est. Ebben az esetben is feltesszük, hogy a térben csak az N számú részecske van jelen. Az N részecskéből álló rendszer tehát nem részrendszere egy olyan, nyugalmi tömeggel bíró részecskékből álló rendszernek, melynek más részrendszereivel kölcsönhatásban van.

Az N részecskéből álló rendszerre hathatnak erőterek, melyek nem a rendszer részecskéitől származnak. A rendszernek tehát nem kell zártnak lennie. A térből azért zártuk ki más, nyugalmi tömeggel bíró részecskék jelenlétét, hogy definíciónk egyértelműbb lehessen, másrészt a rendszer állapotfüggvényének fogalmához szeretnénk eljutni, márpedig ha a térben más részecskék jelenlétét is megengedjük, melyek nyugalmi tömeggel bírnak, akkor rendszerünk részrendszere lesz egy nagyobb rendszernek, melynek más részrendszereivel *kölcsönhatásba is léphet.* Ekkor viszont állapotát nem írhatnánk le állapotfüggvénnyel, hanem csak az ún. sűrűségmátrix felhasználásával, melyet nem akarunk bevonni tárgyalásunkba.

I. axióma: Egy N részecskéből álló rendszert úgy hozhatunk olyan állapotba, hogy az előbbiek értelmében hozzá lehessen rendelni a konfigurációs tér valamelyik pontját, hogy egy-egy monokromatikus igen nagy frekvenciájú fotont szóratunk a rendszer egy-egy részecskéjén. A fotonok frekvenciájának elvileg végtelen nagynak kellene lennie, azaz hullámhosszuknak végtelen kis értéke lehetne csak. Ezért ez az állapot a valóságban soha el nem érhető, csak tetszőlegesen (elvileg) megközelíthető.

4. *definíció:* Ha a rendszerhez annak meghatározott állapotában a t időpillanatban hozzárendelhetjük konfigurációs terének valamelyik meghatározott P pontját, akkor azt mondjuk, hogy a rendszert megtaláltuk a t időpillanatban a konfigurációs tér P pontjában.

II. axióma: Létezik az adott N számú részecskéből álló, részecsketípusonként is egyenlő számú részecskét tartalmazó rendszerek olyan végtelen elemű halmaza, mely a következő tulajdonságú részhalmazokat foglalja magába. Ezen részhalmazok mindegyike még mindig végtelen sok rendszerből áll. A rendszerek természetesen nincsenek egymással kölcsönhatásban, de külső erőtér hatását rájuk, nem zárjuk ki. A részhalmazoknak két fontos közös tulajdonsága van. Az egyik az, hogy mindegyik részhalmaz összes elemének

minden időpillanatban létezik egyértelműen meghatározott megtalálási valószínűsége a konfigurációs tér minden egyes pontjában. Másik közös tulajdonságuk az, hogy az egyes részhalmazokon belüli elemek tetszőlegesen adott konfigurációs térbeli P ponthoz tartozó megtalálási valószínűségei bármelyik időpillanatban egyenlők egymással. Ugyanakkor ha két olyan rendszert tekintünk, melyek különböző részhalmazokból származnak, akkor azok konfigurációs térbeli megtalálási valószínűségei bármelyik időpillanatban végtelen sok konfigurációs térbeli pontban eltérnek egymástól.
Azért van szükségünk részhalmazonként végtelen sok elemre, hogy megtalálási valószínűségeiket a posteriori úton hozzáférhetővé tegyük.
III. axióma: A II. axiómában létezőnek posztulált részhalmazok között vannak olyanok, melyekhez hozzárendelhető egy-egy részhalmazonként különböző, az egész 3N dimenziós konfigurációs téren és az időn értelmezett, általában komplex értékű, minden konfigurációs térbeli pontban és időpillanatban egyértékű ψ függvény, melyből képzett $\psi\psi^* \prod_{i=1}^{N} dx_i' \; dy_i' \; dz_i' = \psi\psi^* dv_{konf}$ kifejezés értéke a konfigurációs tér bármelyik $(x_1', y_1', z_1', \ldots, x_N', y_N', z_N')$ pontjában tetszőleges időpillanatban egyenlő annak a valószínűségével, hogy az adott részhalmaz bármelyik kiválasztott eleme az adott időpillanatban a konfigurációs tér szóbanforgó pontja körüli térfogatelemben lesz megtalálható. Az, hogy a rendszer a konfigurációs tér $(x_1', y_1', z_1', \ldots, x_N', y_N', z_N')$ pontja körüli dv'_{konf} térfogatelemben lett megtalálható, azt jelenti, hogy konfigurációs térbeli $(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N)$ pontja kielégíti a következő összefüggéseket:

$$\begin{aligned} &x_1' \leq x_1 \leq x_1' + dx_1', \; y_1' \leq y_1 \leq y_1' + dy_1' \\ &z_1' \leq z_1 \leq z_1' + dz_1', \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ &x_N' \leq x_N \leq x_N' + dx_N', \; y_N' \leq y_N \leq y_N' + dy_N' \\ &z_N' \leq z_N \leq z_N' + dz_N' \end{aligned}$$

Mivel $\psi\psi^*$ valószínűségi sűrűségfüggvény, mint ilyen kielégíti a következő, ún. normálási feltételt:

$$\int_{\infty} \psi^* \psi dv = 1,$$

ahol az integrálás az egész konfigurációs térre terjesztendő ki.
Ugyanakkor $\int_V \psi^* \psi \, dv$ egyenlő annak a valószínűségével, hogy a rendszer a t időpillanatban olyan konfigurációs térbeli pontban található meg, mely pont eleme V-nek, ahol V véges tartomány a konfigurációs térben, melynek határait az

$$\begin{aligned} &x_{01} \leq x_1 \leq x_{01} + \Delta x_{01}, \; y_{01} \leq y_1 \leq y_{01} + \Delta y_{01}, \\ &z_{01} \leq z_1 \leq z_{01} + \Delta z_{01}, \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots, \\ &x_{0N} \leq x_N \leq x_{0N} + \Delta x_{0N}, \; y_{0N} \leq y_N \leq y_{0N} + \Delta y_{0N}, \\ &z_{0N} \leq z_N \leq z_{0N} + \Delta z_{0N} \end{aligned}$$

relációk adják meg.

Megjegyzés: Ezen következmény már kísérletileg könnyebben hozzáférhető állítást fogalmaz meg, mint a III. axióma.
A normálási feltétel miatt ψ szükségképpen négyzetesen integrálható függvény.
IV. axióma: Ha a rendszerre nem hat külső mágneses, tér és a részecskék mágneses momentumától (mint a részecsketípusokba való besorolásnál is) eltekintünk, a ψ függvény eleme a

$$\left[\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{h^2}{2m_i}\right)\Delta_i + V(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N, t)\right]\psi = i\,h\,\frac{\partial\psi}{\partial t}\text{*} \quad (1)$$

parciális differenciálegyenlet egész konfigurációs térben és minden időpillanatban folytonos és egyértékű, valamint az $\int_{\infty}\psi^*\psi dv = 1$ normálási feltételt kielégítő megoldásai halmazának. Itt m_i az i-edik részecske tömege.

$$h \stackrel{\text{def}}{=} \frac{h}{2\pi}, \quad \Delta_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}, \quad V(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N, t)$$

pedig egy a konfigurációs téren értelmezett és esetleg időfüggő, valós és egyértékű függvény, mely additíve két jellegzetes részre bontható. Az első rész a részecskék egymással való kölcsönhatását írja le és $V_I(x_i - x_k,\ y_i - y_k,\ z_i - z_k)$ alakú, ahol i, k = 1, 2, ..., N, valamint $i \neq k$. A második rész

$$\sum_{j=1}^{N} V_j(x_j, y_j, z_j, t)$$

alakú, és az első résszel ellentétben legfeljebb explicite függhet az időtől is, míg az első rész sem explicite, sem pedig implicite nem függ az időtől. A második rész a rendszer részecskéitől függetlenül létező külső erőtérnek a rendszer részecskéire gyakorolt hatása miatt lép fel. A külső erőtér miatt fellépő tag eleve adott hely- és időfüggésű, nem befolyásolja azt a vizsgált rendszer állapota, vagy a rendszer elemei között fellépő kölcsönhatás. A V függvényhez mindig hozzárendelhető olyan klasszikus mechanikai rendszer, melynek potenciális energiafüggvénye éppen V.

5. definíció: A $\sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{h^2}{2m_i}\right)\Delta_i + V(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_N, y_N, z_N, t)$ operátort a rendszer Hamilton-operátorának nevezzük.

6. definíció: Ha a Hamilton-operátor V függvényében a $\sum_{j=1}^{N} V_j(x_j, y_j, z_j, t)$ összeg tagjai azonosan zérusok, a rendszert zártnak nevezzük.

---

* Megfelelő jel hiányában itt is és a továbbiakban is h = h vonás.

IRODALOMJEGYZÉK a I. részhez

1. Marx György: Kvantummechanika Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1971.
2. Franczia Tamás: Kvázíszabad és kvázikötött elektronállapotok szilárd testekben Egyetemi szakdolgozat, Debrecen, 1980.

SUMMARY

On the Introduction of the Quantum-Mechanical Momentum with the Method of Moving Symmetry

I.

The purpose of this study, consists of several parts, is to show a method to define the quantum-mechanical momentum with a moving symmetry in the education of quantum mechanics at universities. In consequence of some methodological points of view and for the sake of the less size of the article the discussion supposes the students to have got acquainted with the principles of quantum-mechanics can be found in George Marx's book on quantum-mechanics. In this part of the study we introduce the wave-function with an inductive axiomatic method deviates from the usual way.