

Kvantummechanika
tankönyv fizikusoknak

További olvasnivaló a kiadó kínálatából:
Frei Zsolt – Patkós András: Inflációs kozmológia
Hraskó Péter: Relativitáselmélet
John D. Jackson: Klasszikus elektrodinamika
Patkós András – Polónyi János: Sugárzás és részecskék
Edwin F. Taylor – John A. Wheeler: Tér-időfizika

Kvantummechanika

Geszti Tamás

Eötvös Loránd Tudományegyetem,
Fizikai Intézet



A mű megjelenését támogatta . . .

© Geszti Tamás, Typotex, 2007

ISBN xxx 0000 00 0

Kedves Olvasó!

Önre gondoltunk, amikor a könyv előkészítésén munkálkodtunk. Kapcsolatunkat szorosabbra fűzhetjük, ha belép a Typoklubba, ahonnan értesülhet új kiadványainkról, akcióinkról, programjainkról, és amennyet a www.typotex.hu címen érhet el. Honlapunkon megtalálhatja az egyes könyvekhez tartozó hibajegyzéket is, mert sajnos hibák olykor előfordulnak.

Kiadja a Typotex Elektronikus Kiadó Kft., az 1795-ben alapított
Könyvkiadók és Könyvterjesztők Egyesületének tagja
<http://www.typotex.hu>
Felelős kiadó Votisky Zsuzsa

Szakmai lektor Patkós András

Felelős szerkesztő . . .
Műszaki szerkesztő . . .
A borítót tervezte . . .
Terjedelem . . . (A/5) ív
Nyomtatta és kötötte . . .
Felelős vezető . . .

Fényes Imre emlékére



TEXTS DON'T GROW ON TREES!
AUTHORS' RIGHTS AWARENESS CAMPAIGN

© Geszti Tamás

Tartalom

Előszó	13
1. A kvantumelmélet kezdetei	15
1.1. A Planck-féle sugárzási törvény és a szigetelő kristályok hőkapacitása	15
1.2. A fényelektromos jelenség: Lénárd és Einstein	19
1.3. Az atomos gázok színe: a Rutherford-modelltől a Bohr-modellig	20
1.4. De Broglie: a Bohr-formula értelmezése anyaghullámokkal	23
2. Az anyaghullámok elemi tulajdonságai	25
2.1. Interferenciakísérletek elektrontól C_{60} -ig	25
2.2. A szuperpozíció elve	26
2.3. Hullámcsomag, csoportsebesség	29
2.4. Mozgás erőterben	31
2.5. Szemiklasszikus mozgás és átmenet a klasszikus mechanikába	32
2.6. Határozatlansági reláció	33
2.7. Az alapállapot mérete és energiája	35
2.8. Véletlenszerűség és a Born-féle statisztikus értelmezés	36
2.9. Állóhullámok: anyagmegmaradás és komplex amplitúdó	37
3. Schrödinger-egyenlet egy részecskére	39
3.1. A Schrödinger-egyenlet „levezetése”	39
3.2. A kvantumállapot és a Hamilton-operátor	42
3.3. A hely és impulzus felcserélési relációja	44
3.4. Stacionárius állapotok és az időtől független Schrödinger-egyenlet	45
4. A Schrödinger-egyenlet megoldásainak tulajdonságai	47
4.1. Normálás	47
4.2. A határfeltételek és a spektrum	48
4.3. Anyagmegmaradás és komplex hullámfüggvény: a kontinuitási egyenlet	49

5.	A Schrödinger-egyenlet egyszerű megoldásai	51
5.1.	Végtelen potenciálgödör kötött állapotai	52
5.2.	Tükrözési szimmetria, páros és páratlan megoldások	54
5.3.	Véges potenciálgödör	55
5.4.	A dobozba zárt részecske, ciklikus határfeltétel, cellák a fázistérben	58
5.5.	Alagúteffektus és rezonanciaszórás	61
5.6.	A harmonikus oszcillátor stacionárius állapotai	64
6.	Az általános formalizmus	69
6.1.	Hullámfüggvény és kvantumállapot; megfigyelhető fizikai mennyiségek és operátorok	70
6.2.	A mérés statisztikája	72
6.3.	Az állapotok Hilbert-tere; teljesség; a kvantummechanikai átlag	74
6.4.	Önadjungált operátorok	78
6.5.	Operátorok és mátrixok; unitér transzformációk	79
6.6.	Folytonos mátrixok; koordináta- és impulzus-reprezentáció	83
6.7.	Sűrűségmátrix és Wigner-függvény	85
7.	Közvetlen következmények	91
7.1.	Határozatlansági relációk	91
7.2.	Variációs elv a stacionárius állapotokra	93
7.3.	Az átlagérték időderiváltja; mozgásállandók; Ehrenfest tételei	94
7.4.	Időfejlődés Schrödinger- és Heisenberg-képben	96
7.5.	A Hamilton-operátor szimmetriái és a megmaradó mennyiségek	98
7.6.	A folytonos szimmetriák generátorai	101
7.7.	Általános szimmetriaműveletek: irreducibilis ábrázolások és a spektrum	103
8.	A harmonikus oszcillátor: részletek	105
8.1.	Az algebrai módszer: keltő és eltüntető operátorok és mátrixelemeik	105
8.2.	Koherens állapotok (kvantum-hinta)	108
8.3.	Rövid kitekintés: molekula-rezgések, kristályrezgések, csapdába ejtett ion rezgései	110
8.4.	A foton	112

9.	Impulzusmomentum a kvantummechanikában	119
9.1.	A pálya-impulzusmomentum operátora; az impulzusmomentum felcserélési relációi	119
9.2.	Schrödinger-egyenlet hengerszimmetrikus potenciállal: a Bohr-féle kvantumfeltétel	121
9.3.	Schrödinger-egyenlet centrális erőterben: az energiasajátfüggvények szögfüggése	123
9.4.	Szimmetria és szimmetriasértés: paritás; mágneses kvantumszám <i>kontra</i> propellerek és dáliák	126
9.5.	Az impulzusmomentum spektruma és mátrixelemei	128
10.	A hidrogénatom	133
10.1.	A radiális Schrödinger-egyenlet megoldása Coulomb-potenciálra	133
11.	Mozgás mágneses térben	139
11.1.	Töltött részecske Lagrange-függvénye és Hamilton-operátora mágneses mező jelenlétében	139
11.2.	Szabad mozgás: a ciklotron-pályák kvantálása, Landau-szintek	144
11.3.	A mértékinvariancia és a vektorpotenciál realitása: Aharonov–Bohm-effektus, fluxuskvantálás	146
12.	Spin	151
12.1.	A feles spin kvantumelmélete: kétkomponensű spinorok és Pauli-mátrixok	151
12.2.	Spinorforgatás, kvázispin, qubit	154
12.3.	Feles spin állandó mágneses térben: Larmor- precesszió és Rabi-oszcilláció	156
12.4.	Repülő feles spin	158
12.5.	A feles spin állapotainak mérése (rekonstrukciója)	160
12.6.	Mágneses rezonancia	161
13.	Perturbációszámítás	165
13.1.	Időtől független perturbációszámítás: elfajult és el nem fajult eset	166
13.1.1.	Perturbációszámítás nem elfajult esetben	167
13.1.2.	Perturbációszámítás elfajult esetben	169
13.2.	Időtől függő perturbációk; kölcsönhatási kép; a Fermi-féle aranyszabály	170
13.2.1.	Dirac módszere	171
13.2.2.	Átmenetek a folytonos spektrumban; a Fermi-féle aranyszabály	173

13.3. Abszorpció, indukált és spontán emisszió	177
13.3.1. Félklasszikus sugárzáselmélet	179
13.3.2. Spontán emisszió	181
13.3.3. A Planck-törvény Einstein-féle levezetése	186
13.3.4. Dipólátmenetek kiválasztási szabályai	187
14. Szórási folyamatok	191
14.1. Szórás kísérletek: ütközések, reakciók, rugalmatlan és rugalmas szórás, potenciálszórás	191
14.2. Stacionárius potenciálszórás, szórási amplitúdó és hatáskeresztmetszet	192
14.3. Gyors részecske szóródása: Born-közelítés	193
14.4. Összetett tárgy szórási képe	196
14.5. Gömbszimmetrikus potenciál: kifejtés parciális hullámok szerint	197
14.6. Alacsonyenergiás határeset: s-szórás, szórási hossz	200
15. Több részecske rendszerek kvantummechanikája	203
15.1. A kölcsönható részecskék összefonódása	203
15.2. Tömegközépponti és belső mozgás; elemi és összetett „részecskék”	205
15.3. Azonos részecskék megkülönböztethetlensége	207
15.4. Kölcsönhatás nélküli azonos részecskék, egy részecske-állapotok betöltése, átlagtérközelítés	209
15.5. Atomok és a periódusos rendszer	212
15.6. Viriáltétel	214
15.7. Adiabaticus közelítés, Hellmann–Feynman tétel	216
15.8. A kémiai kötés	219
15.9. Impulzusmomentumok összeadása	221
15.10. Einstein–Podolsky–Rosen paradoxon, Bell-egyenlőtlenség	224
15.11. Környezeti kölcsönhatások, dekoherencia és komplementaritás	230
15.12. Dekoherencia és a sűrűségmátrix	232
16. A szemiklasszikus határeset	235
16.1. Hullámfüggvények WKB közelítésben	236
16.2. Egydimenziós mozgások WKB közelítésben	238
17. Kvantummérés: téma változatokkal	245
17.1. Kvantum-Zénón-effektus	247
17.2. Kölcsönhatás-mentes mérés	249
17.3. Quantum Non-Demolition	250

17.4. Kvantum-ugrások	251
17.5. Gyenge mérés utószekcióval	252
Függelékek	257
A – Feynman-féle pályaintegrál	257
B – Ion- és atomcsapdák, lézerhűtés	261
C – Műveletek koherens állapotokkal	265
D – A kölcsönhatási kép	269
E – Dekoherenca: a master-egyenlet	271
E.1. Kétállapotú rendszer oszcillátor-fürdőben: a spin-bozon modell	273
E.2. Oszcillátor oszcillátorok fürdőjében	278
E.3. Nagy molekula atomos gázban	280
F – A kvantuminformáció elemei	285
F.1. A qubitek hordozói	286
F.2. Az alapvető stratégiák	288
F.3. Kvantum-titkosírás	289
F.4. Klónozás és teleportáció	291
G – A Dirac-egyenlet	293
Irodalom	297
Tárgymutató	299



TEXTS DON'T GROW ON TREES!
AUTHORS' RIGHTS AWARENESS CAMPAIGN

© Geszti Tamás

Előszó

A kvantummechanika a huszadik század első negyedében óriási ablakot nyitott a világra, és a természettudományok művelői és kedvelői azóta sem tudnak betelni a látvánnyal. Megtanulni a kvantummechanikát része a világ megértésének, és aki jobban megtanulja, az többet ért a világból.

A kvantummechanika mint tantárgy a kezdetektől fogva része mindazok tanulmányainak, akik a fizikát szakmájuknak választották. Számukra ezzel kezdődik a fizika legaktívabb kutatási területeinek megismerése, beleértve a statisztikus fizikát, szilárdtestfizikát, magfizikát, részecskefizikát bemutató egyetemi előadásokat, amelyek mind megkerülhetetlenül a kvantummechanikára épülnek.

Néhányszor nekem is jutott abból az örömből, hogy ezt a tárgyat először geofizikus, később fizikus hallgatóknak taníthattam. Elődeim és kortársaim természetesen írtak jó magyar nyelvű tankönyveket: Marx György [1], Gombás Pál és Kisdi Dávid [2], Nagy Károly [3], Apagyi Barna [4] könyveit haszonnal forgatják a vizsgára készülő hallgatók; külön említést érdemel Nagy Károly, Pócsik György és Szépfalusy Péter alapos „Kvantumelmélet” fejezete a *Fizikai kézikönyv műszakiaknak* kötetben [5]; a népszerűsítő irodalomból ma is élvezetes olvasmány Károlyházi Frigyes zsebkönyve, az *Igaz varázslat* [6]. Az oroszból fordított remekmű, Landau és Lifsic negyedszázaddal ezelőtt magyarra lefordított Elméleti fizika sorozatának *Kvantummechanika* kötete [7] utolérhetetlen összefoglalása mindannak, amit a huszadik század egyik kiemelkedő géniusza a témában fontosnak tartott. Feynman előadásainak magyarul *Mai fizika* címen megjelent kilenc kötete [8] is széles panorámáját rajzolja fel a kvantummechanika gondolatainak és alkalmazásainak, kivételesen eredeti nézőpont szerint. Hogy érdemes ezek mellé még egy könyvet hozzátenni a választékhoz, azt az utolsó néhány évtizedben bekövetkezett viharos fejlődés indokolja: régebben elképzelhetetlen finomságú új kísérletek sokasága és a rájuk épülő alkalmazások terjedése mellett a kvantummechanika gondolatvilága és hangulata is alaposan átértékelődött. Bár a nagyenergiás fizika – a részecskegyorsítóknak vagy az ősrobbanás körülmé-

nyei között lejátszódó jelenségek fizikája – változatlanul erős érzelmi húzóerőt jelent a fizika egésze számára, ma az alacsonyenergiás kvantummechanika önálló, aktív tudományág, amelyben napról napra születnek meglepő új eredmények, és kiváló kutatók csapatai gazdag eleművek sokaságát építik itthon és a világban. Ezek fényében éreztem fontosnak egy új tankönyv megírását, amely – közhely, de igaz – akkor lesz sikeres, ha hozzá tud járulni a maga mielőbbi elavulásához.

Megérdemel egy bekezdést a magyar szaknyelv kérdése. A kvantummechanika elterjedésének időszaka egybeesett azzal az idővel, amikor az angol szaknyelv uralkodóvá vált a fizikában. Ez maga után vonhatta volna azt, hogy az új fogalmak angol nevükön terjednek el. Szerencse, hogy ez csak egy esetben történt meg: a lassan fél évszázados „observable” szónak máig sem alakult ki jó magyar megfelelője. Nem vettem a bátorságot, hogy a számos változat közül egyet ráerőltessek olvasóimra; a döntést a következő tankönyv írójára hagyom. A „tér” és „mező” szavaknak még a közelmúltban is erős érzelmeket kiváltott vetélkedésében, amely nem korlátozódik a kvantummechanikára, bár tanulmányaim során a „tér” változat ivódott az idegembe, igyekeztem a „mező” szót is sűrűn használni, mert azóta megtanultam, hogy ez lenne az igazabb változat: Maxwell, aki a „field” szót megalkotta, gazdag skót földbirtokosként azt akarta kifejezni vele, hogy a valóságos dolgok nem a kastélyban történnek, ahol a gazda lakik, hanem kint a mezőn.

A megírásban nagy segítséget nyújtottak azok a kritikai megjegyzések, amelyeket a könyv hivatalos szakmai lektorától, Patkós Andrásától, valamint nemhivatalos baráti szolgálatként a kézirat nagy részét alaposan elolvasó Frenkel Andortól és Diósi Lajostól kaptam. Köszönet illeti feleségemet azért a türelmes segítségért, amelyet a feszített tempójú könyvírás nem könnyű időszakában nyújtott.

A könyv ajánlása Fényes Imre emlékének szól. Tőle tanultam, hogy a kvantummechanika a legfontosabb dolgok közé tartozik.

2007. március 31.

Geszti Tamás

1. fejezet

A kvantumelmélet kezdetei

1.1. A Planck-féle sugárzási törvény és a szigetelő kristályok hőkapacitása

A 19. század végére kiteljesedett a fizikának az az épülete, melyet ma klasszikus fizikának nevezünk. Faraday és Maxwell munkái nyomán megszületett az elektrodinamika, benne az elektromágneses hullámok kisugárzásának és terjedésének elméletével, amit Hertz kísérletei támasztottak alá, és nyilvánvalóvá vált, hogy a fény és a hősugárzás is ezeknek a hullámoknak a családjába tartozik. Ezzel párhuzamosan megszületett a termodinamika és háttértudománya, a statisztikus fizika, amely óvatosan, egyelőre kevés konkrét ismeret alapján, megindult az anyag mikroszkópikus szerkezetének feltárása felé. Ebbe az irányba mutatott a kémia nagyjainak, Daltonnak és Avogadrónak néhány drámai felismerése is.

Valószínűtlenül termékeny szintézishez vezetett a hősugárzás és a termodinamika összekapcsolódása, amit Kirchhoff elméleti vizsgálata indított meg. Addigra Bunsen és mások kísérletei nyomán ismerni lehetett sokféle anyag hősugárzásának spektrális szerkezetét, vagyis a T abszolút hőmérsékleten tartott anyagok által, egy adott ν frekvencia körüli $d\nu$ frekvencia-intervallumba kisugárzott $e(\nu, T)d\nu$ energiaáramot, amelyből az anyagról anyagra változó $e(\nu, T)$ *emissziós spektrumok* nagy mérési táblázatai születtek meg. Azt is lehetett tudni, hogy az anyagok a rájuk eső sugárzásból minden $d\nu$ frekvenciaintervallumban a jelenlevő $u(\nu, T)d\nu$ sugárzási energiasűrűséggel arányos, $a(\nu, T)u(\nu, T)d\nu$ sebességgel nyelik el az energiát, és az $a(\nu, T)$ együttható, az ún. *abszorpciós spektrum* minden anyagra más és más. A mérési eredmények feltűnő tulajdonsága, hogy ez a két függvény, az anyagra jellemző emissziós és abszorpciós spektrum nem látszik függetlennek egymástól: amilyen színben (frekvencián) egy adott T hőmérsékleten egy anyag erősen sugároz, ugyanazt a színt ugyanez az anyag erősen el is nyeli.

Kirchhoff arra jött rá, hogy ez nem véletlen egybeesés, hanem annak szükséges feltétele, hogy egy T hőmérsékletű falakkal körbezárt, ugyanilyen hő-

mérsékletű testeket tartalmazó üregben a hőszugárzás termikus egyensúlyba juthasson a sugárzó-elnyelő testekkel: ha az emisszió és abszorpció aránya anyagról-anyagra változna, akkor a sugárzó energia folyamatosan áramlana az erősebben emittáló anyagok felől az erősebben abszorbeáló anyagok felé, ami stacionárius állapot lehet, de nem termikus egyensúly. A következtetés:

$$\frac{e(\nu, T)}{a(\nu, T)} = u(\nu, T) \text{ univerzális függvény.} \quad (1.1)$$

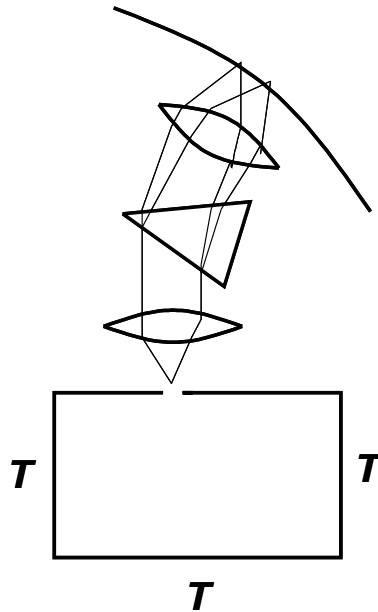
Az $u(\nu, T)$ univerzális (minden anyagra azonos) függvény jelentése is nyilvánvaló: $u(\nu, T)d\nu$ a T hőmérsékletű üregben levő sugárzó energia sűrűsége a $d\nu$ intervallumban.

Ennek a függvénynek a meghatározására élénk kísérleti munka kezdődött el, ami azon az észrevételen alapult, hogy ha az üreg falán egy kicsiny lyukat nyitunk, az nem zavarja meg lényegesen a sugárzás és a falak termikus egyensúlyát, így a lyukra irányított spektroszkóp az üregbeli egyensúlyi sugárzás spektrális összetételét fogja mutatni. A kicsiny lyukra kívülről eső fény az üreg belsejében többször visszaverődve elnyelődik, mielőtt alkalma lenne a lyukat újra eltalálva kiszökni, ezért kapta ez a termikus sugárforrás az *abszolút fekete test* nevet: a lyuk mindent elnyel; rajta nem jön ki más, mint a termikus egyensúlyba jutott sugárzás (1.1 ábra).

A kijövő energiasűrűség spektrális eloszlását a spektroszkóp ernyőjén végigvezetett hőmérő (bolométer) melegedéséből lehet mérni. Ilyen vizsgálatokat a színek különböző tartományaiban – az infravörös hőszugárzástól a látható fényen keresztül az ultraibolyáig – különböző laboratóriumok sokaságában végeztek; a mérések a 19–20. század fordulójára összeértek, és széles frekvencia- és hőmérséklet-tartományt lefedő $u(\nu, T)$ spektrális függvényt produkáltak.

Készen állott egy elméleti jóslat is: eszerint a szóhajóható hullámhosszaknál sokkal nagyobb kiterjedésű, V térfogatú üregben a c fénysebességgel terjedő elektromágneses sugárzásnak egy $d\nu$ intervallumban $V(8\pi/c^3) \nu^2 d\nu$ független *módusa* (határozott ν frekvenciájú, az üreg határának megfelelő határfeltételeket kielégítő rezgési formája) van.¹ Ezek mindegyike egy harmonikus oszcillátornak felel meg, amelyekre az *ekvipartíció tétele* szerint

¹ Állóhullám módusok frekvenciáit számoljuk össze, amelyekre $2\pi\nu = \omega = ck$, ahol $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ a hullámvektor hossza ($k_x = 2\pi/\lambda_x$ stb.) Legyen az üreg az x, y, z tengelyek irányában a, b, c kiterjedésű; $V = abc$ az üreg térfogata. Akármilyen fizikailag értelmes határfeltétel szerint a független módusok félhullámhossza x irányban $\lambda_x/2 \approx a/n_x$, y irányban $\lambda_y/2 \approx a/n_y$, z irányban $\lambda_z/2 \approx a/n_z$, ahol n_x, n_y és n_z nagy egész számok. Ennek megfelelően a hullámvektor végpontja $(\pi/a)n_x, (\pi/b)n_y, (\pi/c)n_z$; ezek a pontok a \vec{k} -térben V/π^3 sűrűségű rácsot alkotnak. Egy ν frekvencia körüli $d\nu$ intervallumban azoknak a hul-



1.1. ábra. Az abszolút fekete test kísérletben megvalósítható modellje: egy körül állandó T hőmérsékleten tartott zárt doboz, amelyben termikus egyensúlyi sugárzás alakul ki, amit egy kis lyukon át spektroszkóppal meg lehet figyelni.

egyenként $k_B T$ energia jut, ahol $k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ a Boltzmann-állandó. Eszerint (*Rayleigh–Jeans törvény*) a térfogategységre vonatkoztatott energiasűrűség $u(\nu, T) = (8\pi/c^3) k_B \nu^2 T$.

Ez a jóslat szinte azonnal finomításra szorult. Az elmélet oldaláról, a fenti formula a 0-tól ∞ -ig terjedő frekvenciaintervallumra integrálva végtelen sugárzási energiát ad, ami lehetetlen (a végtelen megjelenése a nagy frekvenciák járulékából ered, ezért hívják „ibolyántúli katasztrófának”). A megoldást a kísérleti eredmények kínálják: az $u(\nu, T)$ függvény levág egy $\nu_{max} = B T$ frekvencia fölött (*Wien-féle eltolódási törvény*, mert a maximum helye T növelésével arányosan eltolódik), így a frekvenciára integrált sugárzási energia véges lesz: $U(T) \approx V (AB/3) T^4$, összhangban a Stefan–Boltzmann törvénnyel, amely szerint a T^4 függés a fénynyomás tulajdonságainak általános termodinamikai következménye.

lámoknak a frekvenciája található, amelyeknek hullámvektora a megfelelő dk vastagságú, $4\pi k^2 dk/8$ térfogatú nyolcad gömbhéjba esik (nyolcad, mert az állólámokra minden k komponens pozitív). Ezek száma, a kétféle transzverzális polarizációt is figyelembe véve, $2 \times (V/\pi^3) \times 4\pi k^2 dk/8 = V(8\pi/c^3) \nu^2 d\nu$.

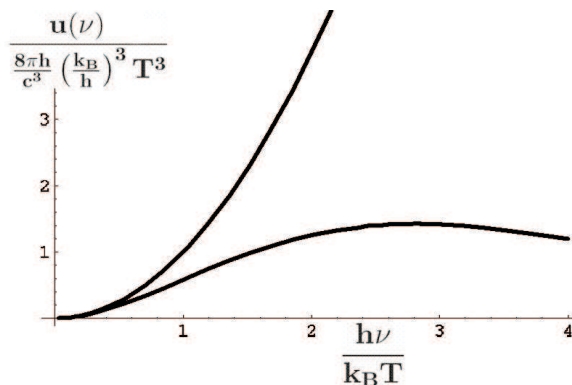
A történet csattanóját Max Planck írta meg, aki rájött a B együttható fizikai jelentésére, és ebből született meg a kvantumelmélet. Planck magyarázata szerint minden harmonikus oszcillátor, így egy elektromágneses sugárzási módus is, csak a ν frekvenciájával arányos $h\nu$ adagokban, *kvantumokban* tud energiát felvenni, ahol

$$h = 6,6 \times 10^{-34} \text{ J s} \quad (1.2)$$

a *Planck-állandó*. Amelyik módus frekvenciája olyan nagy, hogy az ekvipartíció törvényének megfelelő $k_B T$ energia nem éri el a $h\nu$ energiakvantumot, az a módus nem veszi fel az energiát. Adott T hőmérsékleten, kvázifolytonos frekvenciaeloszlású hullámmódusok közül tehát csak azok vesznek részt a termikus gerjesztésben, amelyekre $h\nu < h\nu_{max} = k_B T$, amiből a frekvencialevágás helyének együtthatója $B \approx k_B/h$.

A pontos eredmény, amely a Rayleigh–Jeans törvény helyére lép, a híres *Planck-törvény*:²

$$u(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h \nu^3}{\left(\exp \frac{h\nu}{k_B T} - 1\right)}. \quad (1.3)$$



1.2. ábra. A felfelé tartó görbe: a klasszikus Rayleigh–Jeans jóslat; a visszahajló: a Planck-függvény (dimenziótlan egységekben).

Ugyanez a mechanizmus okozza a szigetelő kristályok belső energiájának T^4 -es, tehát fajhőjének T^3 -ös hőmérsékletfüggését alacsony hőmérsékleten,

² A statisztikus fizika szerint ha egy módus $n h \nu$ energiát vehet fel, ahol $n = 0, 1, 2, \dots$, akkor a felvett energia átlaga $\sum_n n h \nu \exp(-n h \nu / k_B T) / \sum_n \exp(-n h \nu / k_B T) = h \nu / (\exp(h \nu / k_B T) - 1)$ (a nevezőben geometriai sor összegét, a számlálóban ennek $1/k_B T$ szerinti deriváltját kellett kiszámítani). Ennek az eredménynek a $(8\pi/c^3) \nu^2$ módussűrűséggel való szorzata a Planck-függvény; ezt mutatja be a (1.2) ábra is.

amit Einstein korai munkái nyomán Debye tisztázott, a finom kristályfizikai részleteket pedig Max Born és Kármán Tódor tette hozzá. A szigetelőkben, amelyekben az elektronok nem mozoghatnak szabadon, az alacsony hőmérsékleten is elérhető gerjesztés egyetlen módja a kristály hanghullám-szerű mozgása, amely az elektromágneses hullámokhoz hasonló haladó hullámmódusokból tevődik össze, és hasonlóan veszi fel az energiát: alacsony T hőmérsékleteken nagyjából csak egy $\nu_{max} = k_B T / h$ határfrekvenciáig, amely fölötti módusok fokozatosan „kifagynak”. A kristályban azonban a hullámhossznak van egy természetes alsó határa: a rácsállandó. Ennek felel meg a frekvencia felső határa: a ν_D Debye-frekvencia és a hozzá tartozó, 100K nagyságrendű $T_D = h\nu_D/k_B$ Debye-hőmérséklet; ennél magasabb hőmérsékleten már nincs több „kiolvasztható” oszcillátor-módus, és a fajhőt az ekvipartíció tétele határozza meg.

1.2. A fényelektromos jelenség: Lénárd és Einstein

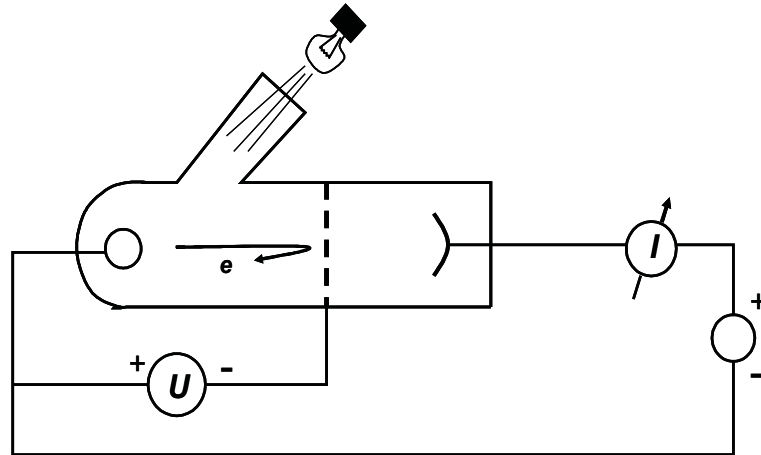
A h Planck-állandó következő megjelenése a pozsonyi Lénárd Fülöp Nobel-díjjal jutalmazott kísérletéhez kapcsolódik, az összefüggést Einstein fedezte fel. A vákuumban repülő elektronok által szállított elektromos áram 19. századvégi felfedezésének egy érdekes elágazása volt, hogy egy fémelektrodból többek között megvilágítással is lehet elektronokat kiszabadítani. Lénárd kísérletében megmérte a kiszabadított elektronok E_{fotoel} energiáját (1.3. ábra), és rájött, hogy az a beeső fény intenzitásától nem függ, csak a fény *színétől*. A színt a fény frekvenciájával kifejezve, Einstein (1905) ilyen alakba írta az összefüggést:

$$E_{fotoel} = h\nu - W, \quad (1.4)$$

ahol h a már megismert Planck-állandó, W neve pedig *kilépési munka*, ez a mennyiség a megvilágított fémelektrod anyagára jellemző.

Einstein magyarázata, amit Lénárd Fülöp hosszú élete végéig sem hitt el, de Einstein számára Nobel-díjának hivatkozásául szolgált, a következő: a beeső fény $h\nu$ energiájú „energiakvantumokból”, később született szóval: *fononokból* áll; egy elektron emissziójához pontosan egy foton energiája használandó el, amelyből W fordítódik a fémből való kiszakadásra. A fennmaradó $E_{fotoel} = h\nu - W$ a kilépő elektron kinetikus energiája, ezt mérjük a Lénárd-féle kísérletben.

A kvantummechanika tanulása során az olvasó meg fogja látni, hogy létezik az (1.4) egyenletnek egy másfajta értelmezése is, ami erős fényforrások esetén közelebb áll az igazsághoz: az elektron átmenete két olyan állapot kö-



1.3. ábra. Lénárd Fülöp kísérlete: a megvilágított katódról kilépő elektron energiája $E_{fotoe} = eU_0$, ahol e az elektron töltése, U_0 pedig a rácstra adott fékező feszültségnek az az értéke, amelynél megszűnik az átfolyó áram.

zött³, amelyek energiája egymástól ΔE értékkel különbözik, $\nu = \Delta E/h$ frekvenciájú töltésozcillációval jár; erre rezonál a beeső fény oszcilláló elektromos térerőssége. Einstein csodálatos intuíciója mégis helyes volt, a fotonok léteznek, de ennek közvetlen bizonyítékait a fény emissziójának és abszorpciójának finomabb törvényszerűségei adták meg, amelyek felismerésében Einsteinnek ismételten döntő szerep jutott. A részleteket a 13.3 pontban beszéljük meg.

1.3. Az atomos gázok színe: a Rutherford-modelltől a Bohr-modellig

Rutherford kísérlete, amelyben nagyenergiájú, pozitív töltésű α -részecskék visszapatánását figyelte meg elektromosan semleges anyagról (1911), bizonyította, hogy a körülöttünk levő anyagok tömegének döntő része a pozitív töltésű, kicsiny kiterjedésű atommagokba tömörül, amelyek között helyezkednek el a könnyű, negatív töltésű elektronok. Hogy az utóbbiak miért nem zuhannak bele a magokba, arra Rutherford szerint nyilvánvaló magyarázatul szolgál, hogy az atom olyan, mint egy apró naprendszer: a negatív töltésű elektronok bolygóként keringenek az őket vonzó pozitív magok körül, és a centrifugális erő tart egyensúlyt a Coulomb-vonzással. Ezt nevezik

³ itt: a fémbe kötött állapotból szabadon mozgó állapotba

Rutherford-féle atommodellnek, ami szép, de van egy hibája: a mag és a körülötte keringő elektron együtt egy forgó (oldalról nézve: rezgő) elektromos dipólust alkotnak, amely elektromágneses hullámokat sugározva mégiscsak gyorsan elveszíti forgási energiáját, így az elektronnak spirálpályán bele kell(ene) zuhannia a magba.

A bonyodalmak kibogozásához, akárcsak a fotoelektromos effektusnál, az elektronok és a fény kölcsönhatásának vizsgálatán keresztül vezetett az út, mégpedig a legegyszerűbb anyag, az egyatomos hidrogéngáz színeképe megfigyelésével.⁴

A mérések szerint az atomos gázok spektruma éles vonalakkból áll, amelyek frekvenciáinak sokasága leegyszerűsödik, ha két tag különbségének írjuk őket:⁵

$$\nu_{mn} = A_m - A_n. \quad (1.5)$$

Niels Bohr volt az, akinek erről 1913-ban Planck kvantumhipotézise és Einstein fotonhipotézise jutott eszébe: szorozzuk meg az egyenletet a h Planck-állandóval, és vezessük be a beszédes $h A_n = E_n$ jelölést:

$$h\nu_{mn} = E_m - E_n, \quad (1.6)$$

aminek ezekután kézenfekvő az értelmezése: az atom egyes, élesen meghatározott E_m , E_n energiájú „stacionárius” elektronpályái valamilyen rejtélyes okból elkerülik a folytonos dipólsugárzás csapdáját. Néha, ugrásszerűen az atom mégis kisugároz vagy elnyel egy $h\nu_{mn}$ energiájú fotont; ilyenkor az elektron átugrik az egyik stacionárius pályáról a másikra. Hogy kisugárzás vagy elnyelés történik-e, az azon múlik, hogy a kezdeti vagy a végső pályán nagyobb az elektron energiája; az (1.6) egyenlet az energia megmaradását fejezi ki a kvantumugrás folyamatában.

A diszkrét (vagyis nem folytonos) energiaértékekkel megkülönböztethető, stabil elektronpályák létezését meggyőzően bizonyította a *Franck–Hertz kísérlet* (1914). Ebben gázkisülést hoztak létre atomos higanygőzben, és mérték az átfolyó elektronok áramát, egy gyorsító rácstól felvett energia függvényében. Az áram rezonanciaszerű csökkenését figyelték meg, ha ez az energia megegyezett a színeképből meghatározott energiaértékekkel, annak megfelelően, hogy a higanyatomokkal ütközve az elektronok éppen ekkora energiát tudtak leadni.

⁴ Atomos hidrogén egyes kémiai reakciókban születik, és hamarosan H_2 molekulákká egyesül, de nem olyan gyorsan, hogy ne lenne idő felvenni az emissziós vagy abszorpciós spektrumát.

⁵ Ezt a felismerést hívják Rydberg–Ritz kombinációs elvnek.

Az eddigiek minden egyatomos gázra érvényesek; a hidrogénatom esetében ennél tovább lehet menni: Rydberg empirikus formulája szerint⁶

$$E_n = -Ry/n^2, \quad (1.7)$$

ahol Ry neve Rydberg-állandó. Bohr értelmezésében ez a formula levezethető, ha az elektron körpályákon kering, és a folytonos sugárzást elkerülő, stacionárius körpályák r sugarát az $L = pr = M_e v r$ impulzusmomentumra (perdületre) vonatkozó

$$L = n \frac{h}{2\pi} \equiv n\hbar \quad (1.8)$$

„kvantumfeltétel” választja ki a klasszikus mechanika által megengedett (de a sugárzást is tartalmazó elektrodinamika által összeomlásra ítélt) pályák sokaságából. Itt bevezettük a kvantummechanikában általánosan használt $\hbar = h/2\pi$ jelölést; jegyezzük meg az értékét is: $\hbar = 1,03 \times 10^{-34} \text{ Js}$. A számításból az $n = 1$ pálya sugarára (*Bohr-sugár*) az

$$r_B = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{M_e e^2} = 5,3 \times 10^{-11} \text{ m} \quad (1.9)$$

értéket kapjuk, ahol $M_e = 0,91 \times 10^{-30} \text{ kg}$ az elektron tömege, $e = -1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$ az elektron töltése, és ϵ_0 a vákuum dielektromos permeabilitása, amelynek értéke SI egységekben $8,85 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Jm}$. Végül az (1.7) formulában szereplő Ry együtthatóra az

$$Ry = \frac{e^4 M_e}{(4\pi \epsilon_0)^2 2\hbar^2} \approx 2,18 \times 10^{-18} \text{ J} \approx 13,6 \text{ eV} \quad (1.10)$$

érték adódik,⁷ amely a bemenő adatok pontos mért értékeit behelyettesítve, sok tizedesjegy pontossággal visszaadja az atomos hidrogén színképvonalainak frekvenciáját.⁸ A fizika hagyományai szerint az ilyen pontos egyezés azt

⁶ A hidrogénatom színképvonalainak egy sorozatára Balmer adott meg egy empirikus formulát; ezt írta át Rydberg a (1.5) kombinációs elv szerint, ekkor jelent meg a (1.7) alak.

⁷ Az e töltésű elektron és $-e$ töltésű proton vonzó potenciális energiája $V(r) = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$, ahol ϵ_0 az SI mértékrendszerben a vákuum dielektromos állandóját jelöli. Az ennek megfelelő Coulomb-erő tart egyensúlyt a centrifugális erővel: $e^2/(4\pi\epsilon_0 r^2) = M_e v^2/r = (M_e v r)^2/(M_e r^3) = n^2 \hbar^2/(M_e r^3)$, ahol használtuk az (1.8) kvantumfeltételt. Innen kifejezhetjük az r pályasugár értékét, és újra használva a kvantumfeltételt, a v keringési sebességet is. Az energiát végül $V(r) + M_e v^2/2$ alakban számoljuk ki, ahonnan leolvashatjuk a Ry együttható (1.10) formulában leírt kifejezését.

⁸ A spektroszkópiai mérések már Bohr idejében is 8-9 jegyre pontosak voltak, de a négy jegynél pontosabb egyezéshez figyelembe kell még venni, hogy a proton is mozog; lásd a 15.2 pontban.

jelzi, hogy Bohr kvantumfeltétele a fizikai valóság valamilyen fontos tulajdonságát ragadta meg. A (1.8) formulában az önkényesnek látszó 2π beírása, mint egy páncélszekrényt nyitó kód, ennek a numerikus egyezésnek a kulcsát adta Bohr kezébe.

Már csak annak megértésével vagyunk adósak, hogy hogyan és miért.

1.4. De Broglie: a Bohr-formula értelmezése anyaghullámokkal

Már Einstein megjegyezte, hogy mivel az elektromágneses hullámok E energiájához a maxwelli elektrodinamika szerint E/c impulzus (lendület) tartozik, a $h\nu$ energiájú fotonnak is van $p = h\nu/c = h/\lambda$ impulzusa. Einstein szemében ez lényeges lépés volt ahhoz, hogy a fotont teljes jogú elemi részecskének tekinthessük.

Louis de Broglie fedezte fel 1924-ben, hogy ha fordítva, a $p = M_e v$ impulzussal mozgó elektronhoz is hozzárendelhető valamiféle *anyaghullám* mozgása, és ha erre is teljesül az Einstein-féle összefüggés:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (1.11)$$

akkor ez tüneményes egyszerűséggel megmagyarázza a Bohr-féle kvantumfeltételt! Valóban, ha az (1.8) egyenletet egy kicsit más alakba írjuk:

$$2\pi r = n \frac{h}{p} = n\lambda, \quad (1.12)$$

akkor n egész szám volta azt jelenti, hogy a körbefutó hullám önmagába záródva, határozott (matematikai nyelven: *egyértékű*) fázissal, bármeddig zavartalanul folytathatja stacionárius (állandósult) hullámmozgását. Ez választja ki a Bohr-féle stacionárius körpályákat.

Az (1.11) De Broglie-reláció, amely a hullámként mozgó elektron hullámhosszát kapcsolja össze a repülő golyóként mozgó elektron impulzusával, a kvantummechanika egyik alapvető összefüggése. Ez nem csak a fotonra és az elektronra, hanem minden kvantumos mozgásra vonatkozik. Azt az apróságot, hogy az impulzus nem skalár, hanem vektor, könnyű figyelembe venni, csak be kell vezetni a \vec{k} hullámvektort, amelynek nagysága $k = 2\pi/\lambda$, iránya pedig merőleges a hullámfrontra; ezzel (1.11) így finomítható:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad (1.13)$$

De Broglie többféle érvelést is talált, amelyek plauzibilissé tehetik az anyaghullámok feltevését. A legközvetlenebb az, hogy ha a fényhullám bizonyos körülmények között részecske (foton) módjára viselkedik, akkor nem

annyira meglepő, hogy az elektron, amire mint a katódsugárcsőben repülő részecskére szoktunk gondolni, más körülmények között (pl. egy atomba zárva) inkább hullámként mozog. Ennél jóval intellektuálisabb, a fizikában művelt közönségnek szóló érvelés az, hogy ha Planck nyomán egy rezgés frekvenciájához az $E = h\nu = \hbar\omega$ összefüggés szerint egy rezgési kvantum energiája kapcsolódik, akkor jusson eszünkbe, hogy a relativitás elmélete szerint az E energia és a \vec{p} impulzus együtt négyesvektort alkotnak, akár csak az ω körfrekvencia és a \vec{k} hullámvektor együttese: a relativitás szimmetriavilága is megköveteli az anyaghullámok létezését. Ez az érvelés első hallásra szokatlan, de roppant hatékony: a modern fizikának máig is tartó, kedvelt játéka szimmetriák alapján megjósolni valaminek a létezését, azután megkeresni azt a valamit. A relativitás elméletének óriási heurisztikus ereje különösen sokszor lendítette tovább a kvantumelmélet fejlődését.

Úgy látszik, mintha sok alapvető kérdést söpörtünk volna a szőnyeg alá:

- Ha valami hullám, akkor miképpen mozoghat golyócska módjára?
- Akármi legyen is az elektron, elektromos töltése biztosan van, akkor pedig körmozgása közben sugározni kellene; miképpen biztosítja a Bohr – de Broglie kvantumfeltétel azt, hogy az elektron ne sugározza ki azonnal a körbemozgás energiáját?
- Mi hullámszik?

Ezek a fontos kérdések meglepő könnyedséggel hárultak el, és az 1920-as évek második felében megszületett a kvantummechanika. A következő fejezetben ezeket a kérdéseket beszéljük meg, azokkal az alapvető kísérletekkel együtt, amelyek bizonyították az anyaghullámok létezését.

2. fejezet

Az anyaghullámok elemi tulajdonságai

2.1. Interferenciakísérletek elektrontól C_{60} -ig

A hullámjelenségek leglátványosabbika az interferencia: az, hogy a hullám szétsztható részhullámokra, amelyek térben és/vagy időben szétválva külön haladnak, de őrzik a közös eredetből származó rezgési fázist, majd összetalálkozva erősítik vagy gyengítik egymást aszerint, hogy az elkülönült terjedés közben milyen fáziskülönbséget vettek fel.

Az interferencia megfigyeléséhez kell:

- *egy hullámforrás*: fény esetében lámpa, lézer, anyaghullámok esetén többnyire valami forró anyag: izzószálból és gyorsító elektródból álló elektronágyú, atomokat vagy molekulákat elpárologtató kályha, neutronokat kibocsátó reaktor vagy protongyorsítóra telepített „spallációs” neutronforrás; mindez geometriailag lehatárolva („leblendézve”), hogy jól meghatározott útkülönbségeket kapjunk;
- *egy nyalábosztó*: ernyő két réssel, optikai rács, féligáteresztő tükör;
- *elegendő hely* a részhullámok fázisát és amplitúdóját befolyásoló tárgyak beillesztésére;
- esetleg *egy nyalábegyészítő*, ami ugyanolyan, mint a nyalábosztó;
- *egy detektor* vagy detektorok rendszere, amely az interferenciaképet észleli.

Fény interferenciáját kétszáz éve sikerült először megfigyelni; ehhez a 20. század tette hozzá, mint új felfedezést, a nehezen szétválasztható fénykvantumok létezését. Az anyaghullámok viszont elektrónként, atomként, molekulaként azonosítható, elemi vagy összetett anyagrészcsekék interferenciájában mutatkoznak meg, ami a maga idején sokkoló meglepetés erejével hatott. Az interferenciakép olyan kis intenzitásoknál is változatlan mintázattal rajzolódik ki, ahol már nyilvánvaló, hogy nem sok részecske kollektív mozgása

veti a hullámokat, hanem egyetlen részecske terjed hullámszerűen, válik szét réseken – rácson – nyalábosztón, majd interferál önmagával.¹

Először elektronok interferenciáját sikerült megfigyelnie a Davisson–Germer kettősnek. Ez a maga idején, 1927-ben Nobel-díjas kísérlet volt; manapság az elektronmikroszkópok rutinszerű tartozéka: egy átkapcsolóval, amely megváltoztatja a szemlencse fókusz távolságát, átállhatunk a tárgy képeről a tárgy mint optikai rács által létrehozott interferenciakép (diffrakciós kép) megjelenítésére.

Neutronok interferenciája az 1970-es években vált bár nem könnyű, de rutinszerűen művelhető kísérleti technikává. A fő nehézséget a fénynél sokkal rövidebb hullámhosszak által megkövetelt stabilitás jelenti: az egész interferométert, amely féligáteresztő neutrontükrökre épül, egyetlen szilíciumkristályként kell növesztetni. A féligáteresztő tükröben a bejövő neutronhullám a kristály atomsíkjai két irány között tükröződik oda-vissza. Ahol éppen fele előre, fele a visszatükrözött irányba halad, ott kell a kristályt elvágni, hogy kettéosztott neutronhullám jöjjön ki belőle.

Atomoknál és molekuláknál a forrás készítése és a detektálás is nehéz feladat. Molekuláknál külön nehézséget jelent a molekula rezgéseinek és forgásainak az interferenciát elmosó hatása. A 20. század végének óvatos előrehaladása után 1999-ben igazi szenzációként jött a bécsi Zeilinger–Arndt kutatócsoport kísérlete, akik először C_{60} , majd C_{70} fullerén-molekulával és néhány hasonló méretű szerves molekulával² végeztek interferenciakísérletet. A legnagyobb molekuláknak, amelyekkel sikerült interferenciakísérletet végezni, a tömege 3×10^{-24} kg körül van, ami egyelőre nehezen meghaladható határnak tűnik: ennél nehezebb molekulákból álló anyagok már kályhában nem párologtathatók el, emiatt az ismert módokon nem lehet belőlük interferométerben használható hullámforrást készíteni.

2.2. A szuperpozíció elve

A fényhullám amplitúdójának a helytől és időtől függő elektromos térerősséget tekinthetjük. A víz hullám amplitúdója a hullámzó víz felületének változó magassága, a nyugvó víz szintjéhez viszonyítva. Az anyaghullámok ampli-

¹ Ennek statisztikai igazolása nem könnyű: a Poisson-eloszlásban kis intenzitásnál sem elhanyagolható több részecske találkozása, de a gondosan végrehajtott kísérletek teljes elméleti analízise meggyőzően tudja azonosítani az egyrészecske-interferenciát.

² Ne bűvölje el az olvasót az, hogy szerves molekulákról is van szó: az, hogy szerves, és mindaz, aminek ebből az élethez köze lehet, a molekula belső szerkezetére és belső mozgásaira vonatkozik, az interferencia viszont csak a molekula egészének tömegközépponti hullámmozgását érinti. A kettő különbségéről szól a 15.2. pont.

túdóját hagyományosan – Schrödinger nyomán – $\psi(\vec{r}, t)$ -vel jelöljük, és a kvantummechanikától többek között azt várjuk, hogy világítsa meg ennek a függvénynek a fizikai tartalmát.

Az interferenciajelenségekben a rész hullámok amplitúdói összeadódnak, ami – előjeles, esetleg vektori mennyiségekről lévén szó – az eredő hullámnak hol erősödését, hol gyengülését váltja ki; ennek a kétféle hatásnak helyről helyre, esetleg időről időre való váltakozása eredményezi a jellegzetes interferenciacsíkokat, időbeli interferencia esetén a lebegés jelenségét. A detektorok mindezt a hullám *intenzitásán* észlelik, ami – legalábbis elektromágneses vagy mechanikai hullámoknál – tipikusan az amplitúdó abszolút értékének négyzete. Ha ezt próbaképpen elfogadjuk anyaghullámokra is, akkor a $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ mennyiséget kell a hullám intenzitásának tekintenünk. Ezzel két rész hullám interferenciáját így írhatjuk le:

$$|\alpha \psi_1(\vec{r}, t) + \beta \psi_2(\vec{r}, t)|^2 = |\alpha|^2 |\psi_1(\vec{r}, t)|^2 + |\beta|^2 |\psi_2(\vec{r}, t)|^2 + \alpha^* \beta \psi_1^*(\vec{r}, t) \psi_2(\vec{r}, t) + \alpha \beta^* \psi_1(\vec{r}, t) \psi_2^*(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

ahol a későbbiek kedvéért megengedtük, hogy ψ komplex szám is lehessen, így került a formulába a komplex konjugáltat jelző csillag. Azt a lehetőséget is lényeges volt belevenni a formulákba, hogy a két rész hullám különböző mértékben vehessen részt az interferenciában; ezt jellemzik a létrejövő $\alpha \psi_1(\vec{r}, t) + \beta \psi_2(\vec{r}, t)$ *lineáris kombináció* α és β együtthatói.

A fenti egyenletben a jobboldal első két tagja a két rész hullám intenzitásainak a lineáris kombináció szerint súlyozott összege. Az interferenciát a két utolsó tag jelzi: a vegyesszorzatok, amelyek negatív számot eredményeznek ott és akkor, ahol és amikor a két rész hullám ellentétes fázisban rezeg (*destruktív*, vagyis „romboló” interferencia), és pozitív számot (*konstruktív*, vagyis „építő” interferencia), ha éppen azonos fázisban rezegnek. Vegyük észre, hogy mivel α és β általában komplex számok, a maguk komplex fázisával eltolhatják az interferenciaképet.

Az, hogy két rész hullámot lineárisan összekombinálva, az időbeli fejlődés során az eredő hullám ugyanolyan arányú lineáris kombinációja marad annak, amivé a két rész hullám külön-külön fejlődne, a *vákuumban* terjedő elektromágneses hullámokra nagy pontosságú kísérletek által igazolt tény. Ezt a tapasztalatot tükrözi vissza matematikai formában a Maxwell-egyenletek linearitása. Különböző anyagokban terjedő elektromágneses hullámok ettől már többé-kevésbé eltérnek, az ebből eredő jelenségekkel foglalkozik a nemlineáris optika. Vízhullámokra a lineáris kombináció csak durva közelítésként használható. Ezért roppant meglepő, hogy az anyaghullámok lineáris kombinációja (*szuperpozíciója*: változtatás nélküli egymásra

helyezése) óriási pontossággal megőrződik az időbeli fejlődés során. Ezt a tapasztalatot fejezi ki a *szuperpozíció elve*, ami a kvantummechanika egyik alaptörvénye. Matematikai kifejezése az, hogy ha az anyaghullámok terjedését valamilyen hullámeqyenlettel akarjuk leírni, annak az egyenletnek mindenekelőtt *lineárisnak* kell lennie.

Az elektromágneses hullámok amplitúdója, az elektromos térerősség nem csak a helytől és az időtől függő szám, hanem vektor, amelynek iránya a hullám polarizációját fejezi ki. A kvantummechanikában óriási változatosságát ismerhetjük meg az egyszerű hely- és időfüggésen túlmenő *belső szabadságfokoknak*. Itt van mindenekelőtt a *spin*, amely még erősen emlékeztet a fény polarizációjára: ahogy két kiválasztott polarizációs irány „bázisából” lineáris összeadással (szuperpozícióval) akármilyen polarizációs irányt ki lehet keverni, úgy két spin-irányból (egy adott irányhoz képest „felfelé” és „lefelé” álló spin) is komplex együtthatókkal kikeverhető minden más irány, összhangban a szuperpozíció elvével.³ Hasonló precizitással érvényesül a szuperpozíció elve a repülő atomok magjainak lehetséges állapotaira, sőt a nagyenergiájú fizika körülményei között egymásba átalakuló részecskék állapotaira is: a nyolcvanéves szuperpozíció-elvet azóta sem, a legegzetikusabb körülmények között sem sikerült a mikrovilágban pontatlanságon kapni.

Ugyanakkor a makroszkopikus testek, amelynek mi magunk is vagyunk, sohasem jelennek meg különböző helyek, különböző állapotok szuperpozíciójában. Pedig ha a kvantummechanika ránk is vonatkozna, elég lenne kölcsönhatásba kerülnünk egy szuperponált állapotú mikrorészecskével, és ettől magunk is szuperpozícióba kerülnénk. Ennek abszurditására utal Schrödinger híres macska-hasonlata: egy radioaktív atomból kisugárzott α -részecske beérkezését észlelő detektor vezérel egy olyan eszközt, amely a vele összezárt macskát megöli. A lineáris kvantummechanika szerint amíg az α -részecske a „még nem jött ki” és „már kijött” állapotok szuperpozíciójában van, addig a detektor – macskagyilkos szerszám – macska kölcsönhatás következtében a macska is szuperpozíciójába kerül az „élő” és „dőglött” állapotoknak.

Ilyet senki sem látott. A tanulság nyilvánvaló: macskákra, emberekre, makroszkopikus testekre nem vonatkoznak a lineáris kvantummechanika törvényei. Hogy a makro- és mikrovilág között van-e folytonos átjárás, az nyitott kérdés, amire még többször vissza fogunk térni. Nagyon fontos tudni azonban, hogy az összes eddig ismert fizikai rendszerek a makro-mikro szakadék egyik vagy másik partján vannak, sohasem benne a szakadékban. A

³ Ezt ennyiből nem kell érteni; a levezetések a 12.1. pontban találhatóak.

kvantummechanika tökéletesen működő szabályokkal írja le a két világ közötti kölcsönhatásokat, amelyeknek tipikus esete egy mikrorendszer mérése makroszkopikus detektorok segítségével.

2.3. Hullámcsomag, csoportsebesség

A hullámmozgás, akár csak a vízhullám taraja, képes magát repülő részecske mozgásának mutatni. A szuperpozíció-elv birtokában ezt úgy fejezhetjük ki, hogy különböző hullámhosszú hullámok szuperpozíciójából *hullámcsomag* alakul ki; ez mozog részecskére emlékeztető módon. Az analógia precíz és messzire ható.

A különböző hullámhosszú hullámok egy véletlenszerűen összerakott szuperpozícióban a legtöbb helyen kioltják egymást; a hullámcsomag olyan helyeken alakulhat ki, ahol a részhullámok fázisai egybeesnek. Mivel a részhullámok általában más és más *fázissebességgel* haladnak, a hullámcsomag helye is elmozdul; ennek az elmozdulásnak a sebességét hívjuk *csoportsebességnek*.

A fogalom matematikája nagyon egyszerű. Induljunk ki egyetlen, a koordináta-rendszer x -tengelye mentén haladó, $k = 2\pi/\lambda$ hullámszámú síkhullámból: ennek megfelelő matematikai leírása nyilván

$$\Psi_k(x, t) = \sin(\varphi_k(x, t)) = \sin(kx - \omega t), \quad (2.2)$$

amelyből leolvasható, hogy az azonos φ fázisú helyek $v_{\text{fázis}} = \omega/k$ sebességgel terjednek.

Rakjunk most össze (szuperponáljunk) különböző, folytonosan változó k hullámszámú síkhullámokat, amelyek frekvenciája adott $\omega = \omega(k)$ módon függ a hullámszámtól. A különböző komponenseket valamilyen $c(k)$ valószínűségi súlyokkal összeintegrálva egy Fourier integrál alakjában kapjuk meg az eredő hullámamplitúdót:

$$\Psi(x, t) = \int c(k) \sin[kx - \omega(k) t] dk. \quad (2.3)$$

Most jön a matematikai csattanó. Ahogy már mondtuk, a különböző hullámhosszú, k függvényében pozitív és negatív értékek között oszcilláló komponensek összeintegrálva, a legtöbb x helyen és t időben közel 0-vá adódnak össze. Kivételt azok az összetartozó (x, t) párok jelentenek, ahol és amikor a szinusz k függvényében éppen *nem* oszcillál: ahol és amikor a fázis k szerinti deriváltja eltűnik, vagyis

$$\frac{\partial}{\partial k} [kx - \omega(k) t] = x - \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} t = 0. \quad (2.4)$$

A formulából látjuk, hogy ezek az időtől függő kitüntetett helyek

$$v_{\text{csop}} = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} \quad (2.5)$$

sebességgel mozognak; ennek a sebességnek a neve *csoportssebesség*.⁴

Könnyű megszabadulni az x tengely irányába való mozgás megszorításától: egy síkhullám bármilyen \vec{k} hullámvektor irányába terjedhet, ekkor az $\omega(\vec{k})$ *diszperziós függvénynek* megfelelő csoportsebesség vektora:

$$\vec{v}_{\text{csop}} = \frac{\partial \omega(\vec{k})}{\partial \vec{k}}. \quad (2.6)$$

Már csak egy lépés hiányzik, hogy elhiessük, a hullámcsomag mozgásának van valami köze a pontszerűnek tekinthető részecskék klasszikus mechanikával leírható mozgásához. Emlékezzünk vissza a hullám – részecske megfeleltetés Bohr–de Broglie szabályaira: $\hbar\omega = E$, $\hbar\vec{k} = \vec{p}$. Ezekkel az (2.6) egyenlet így is írható:

$$\vec{v}_{\text{csop}} = \frac{\partial E(\vec{p}, \vec{r})}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) = \frac{\vec{p}}{m}, \quad (2.7)$$

ami megegyezik a részecske klasszikus mechanika szerinti sebességével!

Remélem, hogy ennek a megrendítően szép és egyszerű összefüggésnek a hatására az eddig még kételkedő olvasó is kezdi elhinni, hogy itt tényleg arról van szó, hogy milyen körülöttünk a világ. Aki már tanult elméleti mechanikát, az azt is vegye észre, hogy az utóbbi egyenlet Hamilton egyik kanonikus egyenlete, csak a részecske $E(\vec{p}, \vec{r})$ energiája helyett kellett volna $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{r})$ Hamilton-függvényét írni; általában ez vezérli az időfüggést (gondoljunk a Hamilton–Jacobi egyenletre). Ennek a függvénynek a „természetes változói” a hely és a hozzá konjugált kanonikus impulzus, amelyet az $\mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}})$ Lagrange-függvényből kapunk $\dot{\vec{r}}$ szerinti deriválással.

Egyszerű esetekben a Hamilton-függvény megegyezik az energiával, de sok nagyon fontos esetben nem, ilyen pl. egy töltött részecske mozgása mágneses térben. Ilyenkor a $\hbar\vec{k} = \vec{p}$ összefüggésben is a kanonikus impulzus jelenik meg, és $\vec{p} \neq m\vec{v}$.

A hullámcsomag-képnek korlátai vannak: a mikrovilágban egy hullámcsomag tisztavirág-életű alakzat, keletkezik és szétfolyik. Kivételes körülmények között, pl. harmonikus rezgőmozgás esetében, létrejöhetnek szét

⁴ Akkor alakul ki jól definiált hullámcsomag, ha a (2.5) derivált egy elég széles k -intervallumon belül közel állandó, máskülönben a csoportsebesség nem jól definiált mennyiség, ami annak a matematikai jelzése, hogy a hullámcsomag hamar szétfolyik.

nem folyó, stabilan hintázó hullámcsomagok is; ezeket koherens állapotoknak hívjuk, és a 8.2. pontban közelebbről is megismerjük őket.

2.4. Mozgás erőterben

Nem sokat érne a kvantummechanika, ha lebénelna ott, ahol a klasszikus mechanika a legjobban teljesít: a $V(\vec{r})$ potenciállal jellemezhető erőterben való mozgás leírásánál. A klasszikus mechanikából tudjuk, hogy ilyenkor a $-\vec{\nabla}V$ erővel arányos gyorsulás lép fel, miközben az $E = p^2/2m + V(\vec{r})$ energia megmarad. Ha a mozgó test olyan helyre téved, ahol a $V(\vec{r})$ potenciál eléri a teljes E energiát, vagyis a test nekimegy a potenciálfalnak, ott visszapattan.

A hullámok világában is van energiamegmaradás (ezt később részletesen megbeszéljük), de amúgy a mozgás a klasszikusnál sokkal gazdagabb változatosságot mutat. Először is, az (1.11) egyenletnek megfelelően, adott E energia mellett ahol $V(\vec{r})$ változik, ott változik a hullámhossz is. A hullám számmal kifejezve:

$$k(\vec{r}) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V(\vec{r}))}. \quad (2.8)$$

Lokalizált hullámcsomagnak tehát, ha a potenciális energia csökkenése – az erő – irányába mozdul el, nő a hullámszáma, vagyis impulzusa is nő, összhangban a newtoni mechanikával.

Ha nem lokalizált hullámcsomagot, hanem egy zárt pálya mentén szétfolyó, önmagába záródó hullámot akarunk vizsgálni erőter hatása alatt, a Bohr-féle kvantumfeltétel szép általánosításával találjuk szembe magunkat: hogy egy q koordináta mentén körbefutó mozgásnak állóhullám vagy akármennyi ideig változatlanul körbefutó hullám feleljen meg, a teljes zárt pályára a változó $\lambda(q)$ hullámhosszból egész számú darabnak kell ráférnie. Egy adott q helyen egy dq szakaszra a hullámhossz $dq/\lambda(q)$ hányada fér rá, tehát a stationárius mozgás feltétele, hogy $\oint dq/\lambda(q) = n$ egész szám legyen, vagyis hogy

$$\oint p(q) dq = n h, \quad (2.9)$$

teljesüljön. Hogy ez a feltétel helyes lehet, azt Sommerfeld még de Broglie hullámképe előtt megsejtette, ezért Bohr–Sommerfeld kvantumfeltételnek hívjuk.

Az eddigieknél sokkal megdöbbentőbb, hogy a potenciálfalról való visszapattanás sem úgy igaz hullámokra, mint a klasszikus mechanika szerint röpködő golyókra. Ezt már a klasszikus optikából is tudjuk: teljes visszaverődéskor a fény *evaneszcens* (a mélységgel legyengülő) hullám alakjá-

ban valamennyire behatol a visszaverő közegbe. Ez történik itt is: ahol $V(\vec{r}) > E$, ott a $(\hbar k)^2/2m$ kinetikus energia negatív, de ez hullámok esetén nem baj, csak annyit jelent, hogy a k hullámszám *imaginárius*, vagyis így írható: $k = i\kappa$, ahol κ valós szám. Ilyenkor a hullám amplitúdójának függése a behatolás z mélységétől $e^{ikz} = e^{-\kappa z}$ alakú, vagyis nem oszcilláló, hanem exponenciálisan csökkenő.

Első ránézésre úgy tűnhet, hogy túlhajtottuk a matematikai formalizmust, pedig amit kaptunk, az az igazság: ha a „tiltott” $V > E$ tartomány elég vékony (konkrétan: nem sokkal vastagabb, mint $1/\kappa$), akkor az anyaghullámnak csak egy része verődik vissza a potenciálfalról, egy kis része áthalad. Ezt hívják *alagúteffektusnak*, és számos megjelenési formája van: így jut ki többek között az α -részecske a bomló radioaktív atommagból, de így jut át az elektromos áram is a villanykapcsoló oxidált fémfelületein. Fontos szerep jut a protonok alagutazásának a biológiai mutációban és fontos enzimreakciókban: nélküle mi sem jöhettünk volna létre.

Az alagúteffektus elméletére a későbbiekben még kétszer is visszatérünk: az 5.5. és a 16.2. pontban.

2.5. Szemiklasszikus mozgás és átmenet a klasszikus mechanikába

Egy hullámcsomag általában kiterjedt és bonyolult lehet; ilyenkor az alakját részletesen kell ismernünk, hogy a viselkedésére következtethessünk. Ha azonban olyan határesetben vagyunk, hogy a mozgás kiterjedéséhez képest a hullámcsomag kicsi, ami azt is jelenti, hogy rövid hullámokból kevertük ki, a hullámcsomag mozgását klasszikus mechanikai egyenletekből ki tudjuk számítani. Ilyenkor azt mondjuk, hogy a kvantummechanika *szemiklasszikus* (félig klasszikus) közelítést használjuk.⁵ Fontos, kísérletileg jól vizsgálható rendszerek tartoznak ebbe a határesetbe; ezek tipikusan *mezoszkopikusak*, vagyis a mikroszkopikus és a makroszkopikus mérettartomány közé esnek; ilyenek pl. a legkisebb, nagyon tiszta anyagokból gyártott és nagyon alacsony hőmérsékletre lehűtött félvezető szerkezetekben mozgó elektronok.

A kvantummechanika kezdeteinél úgy látszott, hogy ezzel meg is értettük a kvantummechanika és a klasszikus mechanika kapcsolatát: a kvantummechanika bizonyos határesetben (rövid hullámhossz, magasan gerjesztett állapotok) egyszerűen átmegy a klasszikus mechanikába. Ezt nevezte Bohr *a korrespondencia elvének* (korrespondencia = megfelelés: egy magasan gerjesztett kvantum hullámnak megfelel egy klasszikus állapot).

⁵ Ezzel foglalkozik részletesebben a 16. fejezet

Formálisan az elv működik,⁶ de a tartalmi egyszerűségbe vetett kezdeti hit mára eltűnt. Amíg a hullámcsomagnak hullámtulajdonságai vannak, vagyis amíg interferenciára képes, addig az ebből eredő jelenségeket kvantummechanikával kell leírni; attól, hogy a hullámcsomag mozgása közelítőleg követi a klasszikus mechanika törvényeit, még távolról sem mondhatjuk, hogy a kvantumelmélet oldaláról megértettük a klasszikus mechanika létezését.

Az igazán klasszikus fizika megértéséhez további nehéz lépéseket kell megtennünk. Ezek egyikén a 20. század utolsó negyedében, Zeh és Zurek úttörő munkái nyomán túljutott a fizika: elég részletesen megértettük, miként vész el az anyaghullámok koherenciája, amint a mikrovilágból át-lépünk a makroszkopikus világba; a kulcs a környezettel való kölcsönhatás kvantummechanikai leírása, amelyről az E. függelékben adunk áttekintést.

Hullámok azonban koherencia nélkül is szét tudnának folyni, ami makroszkopikus testekkel sohase történik meg. Ez már egy további fontos lépés irányába mutat, ahol a kvantummechanikai mérés folyamatával fémjelzett jelenségek esetleg rejtett részletei várhatnak ránk; az idevágó kérdések tisztázása az új évezredre maradt.

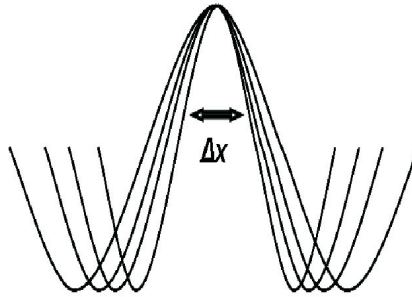
2.6. Határozatlansági reláció

A hullámcsomag csak korlátozottan hasonlít egy repülő részecskére. A részecskének határozott helye és impulzusa lenne, a hullámcsomag helye és impulzusa csak korlátozottan határozható meg. Valóban, a hullámcsomagnak van valamilyen Δx szélessége,⁷ ezt tekintjük a helymeghatározás bizonytalanságának (az egyszerűség kedvéért beszéljünk megint egydimenziós, x irányú mozgásról). Ugyanakkor a hullámcsomagot a (2.3) egyenlet szerint síkhullámokból keverjük ki, amelyeket egy Δk széles hullámszám-intervallumból válogatunk össze; ennek megfelel egy $\Delta p = \hbar \Delta k$ impulzus-határozatlanság.

A két határozatlanság nem független egymástól, hanem egymással nagyjából fordítva arányosak; az általános matematikai tárgyalást később ismerjük meg. A dolog tartalma azonban egyszerű: ha egy átlagosan nyugvó hullámcsomagot 0 és $k_{max} \equiv \Delta k$ közötti hullámszámú síkhullámokból raktam össze (2.1. ábra), akkor a felhasznált *legrövidebb* hullámhossznak kb. a fele,

⁶ Valójában még formálisan sem egészen: a klasszikus mozgás nem a magasan gerjesztett állapotokhoz, hanem az ún. *koherens állapotokhoz* áll közel, amelyek végtelen sok gerjesztett állapot koherens szuperpozíciójából létrejövő, stabil hullámcsomagok: lásd a 8. fejezetet.

⁷ Ezt pontos számításnál az átlagtól való négyzetes átlageltérés négyzetgyökeként definiálhatjuk.



2.1. ábra. Az egy helyen fázisban összeillesztett, különböző hullámhosszú összetevők egy Δx szélességen kívül kioltják egymást; ez a Δx a hullámcsomag mérete.

$\lambda_{min}/2 = \pi/k_{max}$ szabja meg a hullámcsomag méretét, vagyis

$$\Delta x \approx \lambda_{min}/2 = \pi/k_{max}. \quad (2.10)$$

Hasonlóan, az impulzus szórása

$$\Delta p \approx \hbar k_{max}/2. \quad (2.11)$$

A kettő szorzata:

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar\pi/2. \quad (2.12)$$

A pontos eredmény, amit ismeretekben megerősödve a 7.1. pontban fogunk levezetni, a durva számfaktor helyett pontos korlátot mond:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2. \quad (2.13)$$

Ez a *Heisenberg-féle határozatlansági reláció*, amit sokáig a kvantumelmélet legfontosabb eredményének tartottak. Mára hozzászoktunk és rutinszerűen használjuk, az analóg összefüggések sokaságával együtt. Ezek közül említsük meg az idő és energia bizonytalansága közötti összefüggést: ha egy esemény időpontját Δt pontosan akarjuk körülhatárolni, ehhez $\Delta\omega \geq 1/(2\Delta t)$ frekvenciaintervallumból kell periodikus rezgéseket egy Δt hosszú impulzussá összerakni. Ha a kvantummechanika értelmében az ω frekvenciájú rezgésnek $E = \hbar\omega$ energia felel meg, akkor a határozatlansági reláció így szól:

$$\Delta t \Delta E \geq \hbar/2, \quad (2.14)$$

ami többek között azt mondja, hogy egy véges idő után elbomló részecske energiája nem lehet teljesen határozott.

Jegyezzük meg, hogy a határozatlansági relációk szabta korlátok eltűnnének a $\hbar \rightarrow 0$ határesetben, ami a korrespondencia elvének egyik kifejezése. Természetesen \hbar akkora amekkora, és nem tart 0-hoz, de neki fizikai dimenziója van ($J s$), ennek megfelelően egy konkrét rendszerben \hbar -sal arányos dimenziótlan kombinációk valóban elenyészően kicsi értéket vehetnek fel, ami bár jelzi, de mint már mondtuk, nem garantálja a klasszikus viselkedést.

2.7. Az alapállapot mérete és energiája

Miért olyan nagyok az atomok? Az atommagok és elektronok elférnének sokkal kisebb helyen is, amihez a Coulomb-vonzás miatt alacsonyabb potenciális energia tartozna, de akkor a határozatlansági reláció miatt megnőne a kinetikus energiájuk. Van egy legstabilabb méret, ahol a kinetikus és potenciális energia összege a legkisebb; ez a kvantummechanikai *alapállapot*.

Pontosabban az impulzusnak a 0 átlagtól való négyzetes átlageltérése az, ami Δx méretre való összeszorításkor a határozatlansági reláció szerint $\hbar^2/(2 \Delta x)^2$ -re nő, amihez átlagosan $\hbar^2/8m(\Delta x)^2$ kinetikus energia tartozik. Hogy mekkora a stabil méret és a hozzá tartozó alapállapot energiája, azt az

$$E(\Delta x) \approx V(\Delta x) + \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} \quad (2.15)$$

teljes energia minimuma határozza meg; az eredmény az összetartó $V(x)$ potenciálon múlik. Tegyük egy-két próbát!

Harmonikus oszcillátor esetén $V(x) = (m/2)\omega^2 x^2$, amiből a minimális energiához tartozó méretre $\Delta x = \sqrt{\hbar/2m\omega}$, magára az alapállapot energiára („zéruspont-rezgés”) $E_{min} = \hbar\omega/2$ adódik. Az eredmény túl szép: a harmonikus oszcillátor Schrödinger-egyenletének megoldásakor látni fogjuk, hogy durva becslésünkkel az egzakt értékeket kaptuk meg.

Másik próbául válasszuk a hidrogénatomot! Amint már a Bohr-modellnél megbeszéltük, a proton és az elektron közötti vonzás potenciálja $V(r) = -e^2/4\pi\epsilon_0 r$. Az energiában Δx helyett r -et írva, a minimum helye $r = \hbar 2\pi\epsilon_0/e 2m$, az energia pedig $-e^4 m/8\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2$, ami a Bohr-modellből ismert alapállapot ($n = 1$ -hez tartozó) energiánál négyszer nagyobb, de akkor is nagyságrendre helyes eredmény.

Egy közelítő energiaformulát a benne levő szabad paraméterek (itt: Δx ill. r) szerint minimalizálva, becslést kapni az alapállapot energiára: ez a stratégia később még elő fog jönni, mint *variációs elv*. Az elmúlt nyolcvan évben felhalmozott fizikai tudásunk jelentős részét variációs elvek egyre kifinomultabb alkalmazásával szereztük. Az itt bemutatott, primitív változatot nevezhetnénk úgy is: szegény ember variációs elve.

2.8. Véletlenszerűség és a Born-féle statisztikus értelmezés

Egy fontos lépés még hátra van: mit is jelent a hullám intenzitása? A közvetlen válasz: azt, amit az interferencia-kísérletekben mérünk, detektorokkal, fényképezéssel vagy egy fluoreszkáló ernyő megfigyelésével.

A finomabb válasz akkor derül ki, ha az anyaghullám olyan kis intenzitással érkezik be, hogy egyszerre általában csak egy részecskényi anyaghullám van a berendezésben, vagy annyi sem.

A kísérlet ilyenkor drámai képet mutat: egyszerre csak egy detektor szólal meg, az ernyő csak egy helyen villan fel, a film csak egy pontban feketedik meg, és ha a részecske túléli a detektálást, a megfigyelés után az egész anyaghullám onnan indul további mozgására.

Hogy hol van az a hely, az a véletlenül múlik. A véletlen eseményekből azonban idővel kirajzolódik az interferenciakép! Ezt fejezi ki matematikai formában a *Born-szabály*:

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \quad (2.16)$$

annak a valószínűsége, hogy a $\psi(\vec{r}, t)$ amplitúdójú anyaghullámnak megfelelő részecskét egy detektor az \vec{r} hely körüli kicsiny d^3r térfogatban találja meg. Más szóval: $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ a részecske *meztalálási valószínűség-sűrűsége*.

Az, hogy a láthatatlanul kicsi elektron nem valami sárga golyócska, hanem hullám, végül is megszokható. A kvantummechanika furcsább tulajdonságai a detektálás véletlenszerűségével kezdődnek. Az anyaghullámhoz egyetlen kísérleti hozzáférési lehetőségünket a detektorok jelentik, azok pedig véletlenszerű jelet adnak. Ez a tulajdonság elválaszthatatlanul hozzákötődik a hullámfüggvényhez, amit emiatt így is neveznek: *valószínűségi amplitúdó*.

Hogy egyszerre csak egyetlen detektor szólal meg, az igazán rejtélyes! Honnan tudja az egyik detektor, hogy a másik szólal meg, és akkor neki hallgatnia kell? Ezt először Einstein jegyezte meg egy konferencián; néhány évvel később ebből a megjegyzésből nőtt ki az Einstein–Podolsky–Rosen korrelációk témaköre, amit a 15.8. pontban fogunk megismerni.

Akárcsak a szuperpozíció elve, a Born-szabály is nagyon nagy pontossággal teljesül minden olyan esetben, amikor ellenőrizni lehet, bár maga a detektálás folyamata általában túl bonyolult ahhoz, hogy a szigorú négyzetes arányosság közvetlenül teljesülhessen. A valószínűség és az amplitúdó közötti négyzetes kapcsolat mindenesetre a kvantummechanika óriási matematikai szerencséje; más függvénykapcsolat esetén nem működne a „Hilbert-térnek” nevezett fogalom, ami nélkül az elmélet sokkal bonyolultabb lenne. Ezzel foglalkozik a 6. fejezet.

Ha már a matematikai tulajdonságoknál tartunk, a (2.16) formulában egy *komplex* szám abszolút értékének négyzete szerepel. Ha a hullámfüggvényt megszorozzuk egy egységnyi abszolút értékű $e^{i\chi}$ komplex számmal, az az abszolút érték négyzetét nem változtatja meg. Ez a tulajdonság minden mérhető kombináció esetén megmarad, ezért a $\phi(x)$ és $\phi(x)e^{i\chi}$ hullámfüggvényeket fizikai szempontból egyenértékűnek tekintjük. Ez emlékeztet arra, ahogyan az elektrodinamikában a vektorpotenciálhoz is hozzáadhatunk valamit (egy skalár függvény gradiensét), ettől a vektorpotenciál matematikailag megváltozik, de fizikai következményeiben nem. Ott az ilyen fizikailag következmény nélkül való változtatást mértéktranszformációnak nevezzük, és azt, hogy nincs fizikai következménye, mérték-invarianciának. Ennek mintájára a hullámfüggvénynek egy $e^{i\chi}$ fázistényezővel való szorzását is úgy nevezzük, hogy *mértéktranszformáció*, és hogy ettől semmi mérhető mennyiség nem változik, az a kvantummechanikai *mérték-invariancia*.

Az csak hab a tortán, hogy az elektrodinamikai és kvantummechanikai mérték-invariancia nem független egymástól: ha χ nem konstans, hanem a hely skalár függvénye, akkor ez lényegében (értelemszerű szorzóktól eltekintve) megegyezik a vektorpotenciál mértéktranszformációjában szereplő skalár függvényvel. Ezen alapul az „Aharonov–Bohm-effektus”, amit részletesen a 11.3. pontban fogunk megismerni.

2.9. Állóhullámok: anyagmegmaradás és komplex amplitúdó

A szuperpozíció elve jó kis csapdahelyzetet teremthet. Hogy kell leírunk azt az anyaghullámot, amely akkor jön létre, ha egy elektron éppen visszaverődik egy tükröző felületről, és egyszerre van jelen a beeső és a visszavert hullám?

Adjunk össze egy jobbra haladó és egy balra haladó síkhullámot: az eredő

$$\sin(kx - \omega t) + \sin(-kx - \omega t) = -2\sin(\omega t)\cos(kx). \quad (2.17)$$

Ez *állóhullámot* ír le, amely periódusonként kétszer eltűnik. Kérdés: mi van ilyenkor az anyagmegmaradás törvényével, hol van az elektron az eltűnések pillanataiban?

A kérdésre az eddigi játékszabályok betartása mellett nincs jó válasz. A megoldás, amire Schrödinger jött rá, az, hogy a hullámamplitúdót *komplex* függvény alakjában kell írni. Hullámok, rezgések leírásában ez gyakran használt matematikai trükk: komplex számokat könnyebb összeadogatni, mint trigonometrikus függvényeket, de olyankor az ember észben tartja, hogy a valóság a komplex függvények valós része. Most azonban a trükk

valósággá lép elő: egy megmaradó részecskét mint anyaghullámot valóban komplex függvénnyel kell leírni, és ennek nem csak a valós része, hanem az egésze hordozza a fizikai tartalmat.⁸

Hogy is működik ez? Egy jobbra haladó síkhullám amplitúdója most $e^{ikx-i\omega t}$. A jobbra és balra haladó síkhullám szuperpozíciója

$$e^{ikx-i\omega t} + e^{-ikx-i\omega t} = 2e^{-i\omega t} \cos(kx). \quad (2.18)$$

Ez már sohasem tűnik el, csak forog a komplex síkon. A komplex szám abszolút értékének négyzete, a hullám intenzitása, más szóval: a megtalálási valószínűségi sűrűség az ilyen alakú függvényre időben nem is változik, hiszen $|e^{-i\omega t}|^2 = 1$: nincs többé bajunk az anyagmegmaradással.

Ez a kulcsa a nemsugárzás paradoxonjának is, ami a Bohr-féle atommodell idejében még feloldhatatlannak tűnt: a stacionárius elektronpályák valójában $e^{-i\omega t} \phi(\vec{r})$ amplitúdójú állóhullámok, amelyekben az elektromos töltéssűrűség eloszlása időben állandó marad, ezért nem is sugároznak elektromágneses hullámokat.

Amikor viszont az elektron éppen átmenőben van két stacionárius elektronpálya között, az a hullámok nyelvén egy $c_1 e^{-i\omega_1 t} \phi_1(\vec{r}) + c_2 e^{-i\omega_2 t} \phi_2(\vec{r})$ szuperpozíciót jelent. Eközben az elektron megtalálási valószínűségi sűrűsége, és ezzel az elektromos töltéssűrűség eloszlása is így változik:

$$\begin{aligned} |c_1 e^{-i\omega_1 t} \phi_1(\vec{r}) + c_2 e^{-i\omega_2 t} \phi_2(\vec{r})|^2 &= |c_1|^2 |\phi_1(\vec{r})|^2 + |c_2|^2 |\phi_2(\vec{r})|^2 + \\ &2\Re [c_1 c_2^* \phi_1(\vec{r}) \phi_2^*(\vec{r})] \cos(\omega_{12} t) + 2\Im [c_1 c_2^* \phi_1(\vec{r}) \phi_2^*(\vec{r})] \sin(\omega_{12} t), \end{aligned} \quad (2.19)$$

ami a Bohr-feltételnek megfelelő $\omega_{12} \equiv \omega_1 - \omega_2 = (E_1 - E_2)/\hbar$ körfrekvenciával oszcillál.⁹ Ha a $\phi_1(\vec{r})$ és $\phi_2(\vec{r})$ függvények olyanok, hogy ennek a töltésozcillációnak rezgő dipólmomentuma van, akkor az elektron erősen sugározza ki vagy nyeli el az elektromágneses hullámokat; ha nincs dipólmomentuma, akkor gyengén. Az első esetben beszélünk megengedett átmenetről az 1 és 2 állapotok között, a második eset neve tiltott átmenet. A kettő közötti különbségtételt nevezik kiválasztási szabálynak, és az egészről részletesebben fogunk beszélni a 13.3. pont végén.

⁸ A fizikában megesik néha, hogy egy matematikai „segédmenyiségről” kiderül, több a valóságtartalma, mint először gondolták. Nevezetes példája ennek az elektromágneses vektorpotenciál, amelyről az előző pontban már említett nevezetes kvantumjelenség: az Aharonov–Bohm-effektus kapcsán derült ki, hogy döntő és közvetlen szerepe van a kvantummechanikai interferenciakép kialakításában, lásd a 11.3. pontot.

⁹ A töltött részecske megtalálási valószínűségi sűrűsége csak oda-vissza jár, miközben térfo-gati integrálja időben állandó marad, lásd a 4.3. pontot.

3. fejezet

Schrödinger-egyenlet egy részecskére

Egy repülő részecske akármilyen bonyolult mozgást végez, egy adott pillanatban jól meghatározott helyen van. A hullámok mintázata ennél sokszorosan gazdagabb: a hullámok terjedésük közben akadályokba ütköznek, azokról akárhányszor visszaverődnek, és a szuperpozíció elve azt mondja, hogy a beeső és visszavert hullámok egyre bonyolultabb összeggé tevődnek össze. Hogy lehet egy ilyen hullámalakzatot elméletileg leírni?

Az optika tudománya ezt a kérdést már a 19. században megválaszolta: hagyjuk a sokszoros visszaverődések szorgos könyvelgetését, inkább keressünk egy *hullámegyenletet*: olyan lineáris parciális differenciálegyenletet, amit bármelyik síkhullám külön-külön kielégít, a linearitás miatt tehát ezek bármilyen szuperpozíciója is! Ha megvan az egyenlet, oldjuk meg adott kezdeti és határfeltételek (peremfeltételek) mellett. Ezt a programot jelölte ki és valósította meg a kvantummechanikában Schrödinger (1926), aki ezáltal de Broglie játékos fantáziálásait az anyaghullámokról az elméleti fizika teljes értékű és hihetetlenül hatékony részévé tette.

3.1. A Schrödinger-egyenlet „levezetése”

Ismerjük meg a Schrödinger-egyenlethez vezető lépéseket! Már tudjuk, hogy egy \vec{k} hullámvektorú és ω körfrekvenciájú síkhullám a $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ impulzusú és $E = \hbar\omega$ energiájú részecskemozgás kvantummechanikai megfelelője. Ezért a síkhullám amplitúdóját, amit Schrödinger nyomán *hullámfüggvénynek* nevezünk, így is írhatjuk:

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} = e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)}. \quad (3.1)$$

Erőmentes térben mozgó, m tömegű részecske energiája kizárólag a kinetikus energiából áll:

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (3.2)$$

Ez a feltétel korlátozza a (3.1) síkhullám alakját. A feltételt úgy ellenőrizhetjük, hogy egy megfelelő matematikai művelettel *leolvassuk* a (3.1) síkhul-

lámhoz tartozó energiát és impulzust, és behelyettesítjük őket a (3.2) egyenletbe. Mivel a szuperpozíció elvébe sűrített tapasztalatoknak megfelelően most is lineáris egyenletet akarunk levezetni, a leolvasás műveletének is lineárisnak kell lennie.

Mivel a (3.1) formulában az energia és az impulzus a kitevőben szerepel, nem kell sokáig gondolkoznunk, hogy mi a megfelelő művelet: deriválni kell a $\psi(\vec{r}, t)$ hullámfüggvényt egyszer az idő, egyszer a helyvektor szerint (az utóbbi a vektoranalízisből ismert *gradiens* képzését jelenti, és a $\vec{\nabla}$ („nabla”) műveleti jellel jelöljük); mivel a (3.2) egyenletben p^2 szerepel, ez utóbbi műveletet kétszer kell elvégeznünk:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\psi &= -\frac{i}{\hbar}E\psi; \\ \vec{\nabla}\psi &= \frac{i}{\hbar}\vec{p}\psi; \\ (\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla})\psi &\equiv \Delta\psi = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 (\vec{p} \cdot \vec{p})\psi = -\frac{1}{\hbar^2} p^2\psi,\end{aligned}\tag{3.3}$$

ahol $\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$ a Laplace-operátor. Rendezzük az eredményeket:

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi &= E\psi; \\ -i\hbar\vec{\nabla}\psi &= \vec{p}\psi; \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi &= \frac{p^2}{2m}\psi.\end{aligned}\tag{3.4}$$

Az utóbbi írásmóddal a matematikailag elég művelt olvasó számára a „leolvasás” művelete nevet kapott: a fenti egyenletek lineáris operátorok – konkrétan: differenciáloperátorok – *sajátérték-egyenletei*. Az E energia az $i\hbar(\partial/\partial t)$ operátornak, a \vec{p} impulzus a $-i\hbar\vec{\nabla}$ (vektor-)operátornak, a $p^2/2m$ kinetikus energia a $-(\hbar^2/2m)\Delta$ operátornak a sajátértékeként olvasható le. A (3.1) síkhullámról kiderült, hogy mindezen operátorok közös sajátfüggvénye.¹

Most már készen állunk a (3.2) feltétel felhasználására:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi,\tag{3.5}$$

¹ Vegyük észre, hogy az impulzus operátora, amelyet eredetileg arra találtunk ki, hogy leolvassuk a komplex hullámfüggvény fázisának térbeli tekeredését, nem tesz különbséget, és megderiválja a hullámfüggvény abszolút értékének inhomogenitását is. A kinetikus energia ebből eredő részét nevezik néha „kvantumpotenciálnak”.

és ezzel döntő lépést tettünk meg: elérkeztünk a szabad (erőmentes) mozgás *Schrödinger-egyenletéhez!* Ebben a pillanatban megszabadultunk a síkhullámtól, nem vagyunk tovább kötve se az impulzus, se az energia sajátfüggvényeikhez, hanem azok tetszőleges szuperpozícióit kereshetjük a kezdeti és határfeltételeknek megfelelően.

Vegyük észre, hogy bár a levezetésben az idő és a helyvektor szerinti deriválás hasonlóképpen működött, az eredményben szerepük egyáltalán nem szimmetrikus: az idő szerinti derivált azt jelzi, hogy *mozgásegyenletet* kapunk, amely a hullámfüggvény pillanatnyi mintázatából meghatározza a következő időfejlődést. A hely szerinti deriváltak éppen ezt a mintázatot értékelik minden pillanatban. Ilyen értelemben a következőkben a ∂_t művelet sohasem az energia operátorának, hanem a mozgásegyenlet részének tekintjük. Lényeges az is, hogy időben csak *elsőrendű* derivált jelenik meg az egyenletben: $\psi(\vec{r}, 0)$ teljesen meghatározza a kezdeti feltételt, nem kell megadni időderiváltak kezdeti értékeit. Ez fontos eltérés a newtoni klasszikus mechanikától: itt a kezdeti sebesség a *helyfüggésbe* van belekódolva, az impulzust a hullámvektorral összekapcsoló (1.13) egyenleten keresztül.

Még egy fontos lépés hátra van: meg kell szabadulnunk az erőmentes eset megszorításától, és meg kell engednünk erőterek jelenlétét. A legegyszerűbb, leggyakoribb eset egy $V(\vec{r})$ helyfüggő potenciális energia jelenléte. Ekkor a (3.2) egyenlet helyére a klasszikus fizika logikája szerint ez kerül:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) = \mathcal{H}(\vec{p}, \vec{r}), \quad (3.6)$$

ahol felismertük, hogy a jobboldalon a klasszikus mechanikából ismert *Hamilton-függvény* áll, ami egyszerű (skalár potenciális) mozgás esetén a hely és az impulzus függvényében megadott energiával egyezik. A baloldalon álló energia a (3.1) síkhullám időfüggéséből került az egyenletbe, és a klasszikus mechanikában az időfüggést általában is a Hamilton-függvény vezérli, így megjelenése itt nem matematikai véletlen.

Látjuk, hogy most állandó E energia esetén az impulzus helyfüggő lesz. Amíg $V(\vec{r})$ sima függvény (a hullámhosszon belül keveset változik), addig könnyű kitalálni a következményeket: fenntarthatjuk az eddigi $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ kapcsolatot, de a hullám már nem síkhullám lesz, hanem helyről helyre változó hullámhosszú hullámmozgás, összhangban a (2.8) egyenlettel. A hullámvektor értékét helyről helyre leolvashatjuk a $-i\vec{\nabla}$ operátor segítségével. Mind-ebből a következő hullámeqyenlet adódik:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{r}) \psi. \quad (3.7)$$

Tulajdonképpen örületes bátorság, de próbáljuk meg, mint afféle durva matematikai modellt, hogyan működik ez az egyenlet akkor, ha $V(\vec{r})$ nem sima függvény, hanem meredeken változik a hullámhosszon belül is, mint pl. a hidrogénatomban a protontól eredő Coulomb-potenciál az $n = 1, 2, 3$ belső Bohr-pályák vidékén. Az eredmény döbbenetes: az egyenlet megoldásai sok számjegyre pontosan megadják a stacionárius elektronpályák energiáját és mindazokat a finomabb tulajdonságokat, amelyek kiszámításának módszerét a továbbiakban meg fogjuk ismerni.

A (3.7) egyenlet tehát nem durva modell, hanem a természet fizikai leírásának egy új, alapvető egyenlete. Ez egy m tömegű, $V(\vec{r})$ potenciállal jellemzett erőterben mozgó részecske *Schrödinger-egyenlete*.

3.2. A kvantumállapot és a Hamilton-operátor

Amit kaptunk, az messzebbre vezet, mint egyetlen részecske hullámegyenletéig. Mindenekelőtt, a „részecske” mozgását a klasszikus mechanika képénél végtelenül változatosabb hullámmozgásként ismerjük meg. A részecske pillanatnyi *kvantumállapotát* a $\psi(\vec{r}, t)$ komplex függvény megadásával tudjuk leírni.

A (3.7) Schrödinger-egyenlet a kvantumállapot időbeli fejlődését írja le. Ha az egyenletre messzebről, hunyorítva nézünk rá, a következő szerkezetet fedezhetjük fel rajta:

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi, \quad (3.8)$$

ahol az adott konkrét esetben

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \quad (3.9)$$

a *Hamilton-operátor*. Ez a következőképpen épül fel: vegyük a vizsgált rendszer $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{r})$ Hamilton-függvényét (egyszerűbb esetekben: energiáját impulzusokkal és koordinátákkal kifejezve), és az impulzust helyettesítsük a (3.4) egyenletben megismert *impulzusoperátorral*:

$$\vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}. \quad (3.10)$$

A továbbiakban is a „klasszikus” jelölésre tett kalappal jelöljük azt az operátort, amely egy klasszikus fizikai mennyiség kvantummechanikai megfelelője.

Kezd kirajzolódni az operátorok szerepe a leírásban. Az impulzus konkrét eseténél maradva, a gazdagon mintázott hullámok általában sokféle irányba

futó síkhullámokból szuperponálódnak össze, ezért az ilyen mozgásban általában nincs is határozott értéke az impulzusnak: a síkhullámok, az impulzusoperátor sajátfüggvényei – a fizikai tartalomra utaló kifejezéssel: az impulzus *sajátállapotai* – csak mint egyfajta referencia szerepelnek. Ez a referencia azonban döntő szerephez jut az impulzus mérésénél: a mérés úgy kezdődik, hogy a hullámfüggvényt térben szétválogatjuk oldalirányból lehatárolt, de síkhullámokat közelítő módusok szerint, vagy általában: a mérendő mennyiség közelítő sajátállapotai szerint (impulzus esetén ezt egy optikai rács végzi el). A detektorok a szétválasztott részhullámokból választanak egyet; az ennek megfelelő sajátértéket tekintjük a mérés eredményének.

A 6. fejezetben részletesen megismerjük a kísérleti szétválasztás matematikai megfelelőjét: ki lehet fejteni bármilyen bonyolultabb hullámfüggvényt a mérendő mennyiség sajátfüggvényei szerint (az impulzus esetén ez a kifejtés éppen a Fourier-sor), és a kifejtés együtthatóiból kiszámítható az illető mennyiség mérésének statisztikája.

A Hamilton-operátor fenti konstrukciója még féloldalasnak látszik: nem világos, hogy miért helyettesítettük egy operátorral az impulzust, és miért nem tettünk hasonlót a helykoordinátával. Az igazság az, hogy tettünk, csak az nem tűnt fel, mert *a hely operátora a helyvektorral való szorzás*, ami minden helyfüggvényre, így a potenciálra is kiterjed: $V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t)$ éppen a helyes operátorkombináció.

Ennek a rejtélyesnek látszó állításnak az a magyarázata, hogy a helyoperátor sajátfüggvényei azok a függvények, amelyek meghatározott helyen vannak lokalizálva. Ezek prototípusa a Dirac-féle deltafüggvény: egy végtelenül magas és keskeny, egységnyi térfogatú tüske, valamilyen \vec{r}_0 helyen lokalizálva: $\int \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) d^3r = 1$; $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = 0$, ha $\vec{r} \neq \vec{r}_0$. Egy ilyen függvényre hatva a fenti módon definiált helyoperátorral,

$$\hat{r} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \vec{r} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \vec{r}_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \quad (3.11)$$

vagyis úgy működik, ahogy az egy operátortól elvárható: sajátfüggvényét megszorozza a sajátértékével.

A Hamilton-operátornak a Hamilton-függvényen keresztül való bevezetéséhez még két megjegyzést kell tennünk:

- amikor a Hamilton-függvény *nem* egyezik az energiával, aminek leghétköznapibb példája egy töltött részecske mozgása mágneses térben, akkor vissza kell mennünk a klasszikus fizikából ismert konstrukcióhoz: ismert mozgásegyenletekből, ezek híján esetleg fizikai intuíciónál megalkotjuk az $\mathcal{L}(q, \dot{q})$ Lagrange-függvényt, ebből megkapjuk a q ko-

ordinátá(k)hoz konjugált $p = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{q}$ impulzust, végül a $\mathcal{H} = \dot{q}p - \mathcal{L}$ Hamilton-függvényt;

- amikor az impulzust operátorával helyettesítjük, nem mindegy, milyen sorrendben írjuk egy szorzatban a helykoordináta és az impulzus operátorait; ezt a kérdéskört a következő pontban mutatjuk be, és a későbbiekben még többször visszatérünk rá.

3.3. A hely és impulzus felcserélési relációja

A hely és az impulzus operátorának ismeretében egy alapvetően fontos matematikai tulajdonságra derül fény, amely önmagában is felhasználható sok kvantummechanikai feladat algebrai megoldására a Schrödinger-féle differenciálegyenlet megoldása nélkül is, és heurisztikus irányítúként használható sok olyan esetben, amikor még a részletes törvényszerűségeket nem ismerjük. Ez a tulajdonság az, hogy ha két operátor egymás után hat egy függvényre, az eredmény szempontjából nem mindegy, milyen sorrendben hatnak: az operátorok általában *felcserélhetetlenek*.

Nézzünk először egyetlen x koordinátától függő $f(x)$ függvényeket. Ha ezekre egymás után hatnak operátorok, az írásmód nyilvánvaló: az egymásutánt az operátorok *szorzataként* jelöljük, amelyben jobbra írjuk azt az operátort, amelyik először hat a függvényre, balra azt, amelyik másodsor.

A fentiek szerint $x(\partial/\partial x)f(x) = xf'(x)$; $(\partial/\partial x)xf(x) = f(x) + xf'(x)$. A kettő különbsége $f(x)$. Szimbolikusan ezt így írhatjuk: $(\partial/\partial x)x - x(\partial/\partial x) = \mathbb{1}$.

Használjuk fel ezt arra, hogy kiszámítsuk a $\hat{p}_x = -i\hbar(\partial/\partial x)$ és $\hat{x} = x$ operátorok felcserélésének hatását. Mindenekelőtt egy általánosan használt jelölés: vezessük be két operátor, \hat{A} és \hat{B} *kommutátorát* az

$$[\hat{A}, \hat{B}] =: \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (3.12)$$

definícióval. Akkor a fentiekből

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar. \quad (3.13)$$

Természetesen ugyanez a *felcserélési reláció* vonatkozik az y és a z irányú koordináta- és impulzusoperátorokra is. Ezzel szemben pl. p_x felcserélhető y -nal, mert x szerinti deriválásnál y konstansként viselkedik. Mindez így foglalható össze:

$$[\hat{p}_i, \hat{r}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad (3.14)$$

ahol $i, j = x, y, z$, és $\delta_{ij} = 1$ ha $i = j$, különben $= 0$ („Kronecker-delta”). Ezeket a felcserélési relációkat először Heisenberg vezette le, a Schrödinger-egyenlettől független, elvontabb algebrai formalizmuson keresztül.

A fenti eredmény magától értetődő általánosítása a „kanonikus kvantálás” néven ismert szabály: kanonikusan konjugált impulzus – koordináta párok között általában ugyanilyen felcserélési relációk állnak fenn. Ez alól azonban számos kivétel van,² emiatt célszerű az egyes kommutátorokat az operátorok konkrét alakjából közvetlenül kiszámolni.

3.4. Stacionárius állapotok és az időtől független Schrödinger-egyenlet

Most már könnyű pontosan megfogalmazni a stacionárius, nem sugárzó Bohr-féle elektronpályák kvantummechanikai megfelelőjét. A 2.6. pont végén mondottakkal összhangban, ezek a kvantumállapotok a (3.8) Schrödinger-egyenlet olyan megoldásai, amelyekben az idő- és helyfüggés szorzat alakban szétválik, és az időfüggés egy meghatározott frekvenciának, vagy ami ugyanazt jelenti, meghatározott energiának felel meg. Ezek a hullámfüggvények tehát az egyenlet

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-i\omega t} \phi(\vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \phi(\vec{r}) \quad (3.15)$$

alakú megoldásai. Behelyettesítve ezt a (3.8) egyenletbe, majd $e^{-i\omega t}$ -vel egyszerűsítve, ezt az egyenletet kapjuk:

$$\hat{H}\phi = E\phi, \quad (3.16)$$

ami roppant szemléletes: a komplex hullámfüggvény ω oszcillációs frekvenciáját megszabó $E = \hbar\omega$ energiaérték a \hat{H} Hamilton-operátor egyik sajátértéke. A *stacionárius állapotok* tehát *energia-sajátállapotok*, és élesen meghatározott energiáik meghatározására a Hamilton-operátorhoz tartozó sajátérték-problémát kell megoldani. A (3.16) egyenlet neve: *időtől független Schrödinger-egyenlet*, vagy *energiasajátérték-egyenlet*.

Amint már a 2.6. pontban említettük, a (3.15) alakú hullámfüggvényekhez tartozó $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ valószínűsűrűség időben nem változik, és vele együtt időben állandó az elektron töltésseloszlásának sűrűsége is. Hogy miért és hogyan sugároznak azok az állapotok, amelyek nem (3.15) alakúak, ahhoz a következőkben még többször visszatérünk.

A Hamilton-operátor, amint az konkrét (3.9) alakjából is látszik, általában differenciáloperátor. Ebből az következik, hogy a hozzá tartozó sajátérték-probléma, mint parciális differenciálegyenlet, határozatlan marad, amíg a sajátfüggvényekre vonatkozó határfeltételeket ki nem kötjük. Valóban, bármekkora E energiaértékre léteznek megoldásai az egyenletnek, csak azok

² Lásd Patkós – Polónyi: *Sugárzás és részecskék*. Typotex, Budapest, 2000. E. függelék.

a határfeltételeknek általában nem tesznek eleget.³ A fizika követelményei pedig éppen a határfeltételek alakjában kerülnek bele a matematikai eszköztárba. Ezt részletesen a következő fejezetben beszéljük meg, a későbbiekben pedig bőségesen láthatunk rá példákat.

³ A differenciálegyenletek határfeltételei által definiált sajátértékproblémákat nevezik *Sturm–Liouville típusú peremértékproblémáknak*.

4. fejezet

A Schrödinger-egyenlet megoldásainak tulajdonságai

A Schrödinger-egyenlet fizikai tartalma közvetlen matematikai tulajdonságokhoz kapcsolódik; a fizikai háttér ismerete sokszor segít a matematikai probléma megoldásában. Ilyen tulajdonságokkal az egész könyv során fogunk találkozni. Ebben a rövid, de fontos fejezetben a megmaradó (nem keletkező, el sem tűnő) részecskék megtalálási valószínűségének fizikailag nyilvánvaló tulajdonságaival ismerkedünk meg: látni fogjuk, hogy a valószínűsűrség, mint egy folyadék áramlik egyik helyről a másikra de el nem vész. Áttekintjük az energiasajátértékeket meghatározó határfeltételek tipikus eseteit is.

4.1. Normálás

A 2.8. pontban megismert Born-szabály szerint $|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ annak valószínűsége, hogy a $\psi(\vec{r}, t)$ állapotban levő részecskét a t pillanatban az \vec{r} hely d^3r környezetében találja meg egy detektor.

A különböző helyeken való egyidejű megtalálás nem lehetséges (ezt neveztük „részecsketulajdonságnak”, ami korántsem trivialis, hanem a kvantummechanika egyik alapvető tapasztalata: egy részecskétől csak egy detektor szólal meg). Ezért az *itt* és *ott* detektálás egymást kizáró események; annak együttes valószínűsége, hogy a részecskét *vagy* itt, *vagy* ott megtaláljuk, az egyes események valószínűségeinek összege. Ha a részecske egyáltalán létezik, az ideális detektorok valahol meg is találják: ennek valószínűsége az összes lehetséges detektálási események valószínűségeinek összege:

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1. \quad (4.1)$$

Ezt az összefüggést nevezzük a hullámfüggvény *normálásának*.

Mivel a Schrödinger-egyenlet (akár az időtől függő, akár az időfüggetlen) lineáris, a megoldás normálásával nem kell folyamatosan törődnünk, elég a megkapott megoldást utólag megszorozni olyan konstanssal, hogy a (4.1) egyenlet teljesüljön. Az viszont, hogy ezt megteheszük, azon múlik, hogy a

(4.1) integrál *véges* legyen: ilyenkor mondjuk, hogy a hullámfüggvény *normálható*. A normálhatóság feltételét gyakran használjuk határfeltételként az időtől független Schrödinger-egyenlet megoldásánál: az E energiaértékek kontinuumából sokszor a normálhatóság választja ki azokat a diszkrét sajátértékeket, amelyek fizikai valóságot írnak le.

Fontos tudni, hogy már az eddig megismert egyszerű hullámfüggvények között is van, olyan amely nem normálható: ilyen a végtelen térbeli kiterjedésű síkhullám, ami az impulzus operátorának sajátfüggvénye, és ilyen a Dirac-féle deltafüggvény is, amely a helyvektor operátoráé. Ezek használatáról nem mondhatunk le, de nagyságukat nem az itt megismert valószínűségi számítási normálással, hanem más matematikai eszközzel tartjuk kézben; erről később lesz szó.

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásainak normálásával kapcsolatban meg kell említenünk, hogy ha *megmaradó* részecskét írunk le – ezt a Hamilton-operátor alakja biztosítja – akkor elég a normálást a kezdeti pillanatban kikötni; az integrál az idő múlásával nem változik. Ezzel a tulajdonsággal foglalkozunk a 4.3. pontban.

4.2. A határfeltételek és a spektrum

A (3.16) Schrödinger-féle energiasajátérték-egyenlet a Hamilton-operátor (3.9) alakjával a következő differenciálegyenletre vezet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r}) = (E - V(\vec{r}))\phi(\vec{r}). \quad (4.2)$$

Ebben az egyenletben a $V(\vec{r})$ helyfüggő potenciális energia bemenő adat; az ismeretlenek, amelyeket meg kell határoznunk, az E energiasajátérték és a hozzá tartozó $\phi(\vec{r})$ energiasajátfüggvény. Amint már megbeszéltük, az egyenletnek bármilyen E értékre van megoldása; választani azon az alapon tudunk, hogy a $\phi(\vec{r})$ függvény kielégítse a fizika által kirótt határfeltételeket. A határfeltételek által megengedett E energiasajátértékek összességét nevezzük a Hamilton-operátor *spektrumának*.

A határfeltételek a következők:

- A hullámfüggvény legyen *folytonos*, és első deriváltjai is legyenek folytonosak (különben a Δ operátorban levő második deriváltak végtelenné válhatnának, amit véges potenciál nem tud kompenzálni). A potenciál szinguláris helyein (pl. az $1/r$ helyfüggésű Coulomb-potenciál origójában) a hullámfüggvény pontosabb vizsgálatával kell meghatározni a határfeltételt, lásd a 10.1. pontot. Végtelen magas potenciállal határ-

esetében a hullámfüggvény deriváltja határozatlanná válik, lásd az 5.1. pontot.

- A leírásra használt koordinátáknak a hullámfüggvény legyen *egyértékű* függvénye (pl. ha szögkoordinátákat is használunk, egy 2π körbeforgás után önmagába visszatérő polárszögnek legyen 2π szerint periodikus függvénye).
- Ha a hullámfüggvény *kötött* (egy potenciálgödörbe lokalizált) állapotot ír le, legyen *normálható*. Szabad mozgás esetében a hullámfüggvény tartalmaz végtelenbe menő síkhullámszerű részeket is. Ilyenkor az időtől független Schrödinger-egyenlet megoldásainak normálhatósága nem teljesül; őket az időfüggő egyenlet szerint mozgó, egyre szélesebb hullámcsomagok határesetének tekinthetjük.

A határfeltételek által meghatározott spektrumnak lehetnek diszkrét és folytonos részei. A diszkrét spektrum volt a mikrovilág első üzenete a klasszikustól eltérő természettörvényekről;¹ ebből ered a „kvantum” szó is.

Diszkrét energiasajátértékek tipikusan egy potenciálgödörben kötött, abból az energiamegmaradás miatt ki nem szabaduló, állóhullámszerű vagy körbefutó energiasajátállapotnak felelnek meg. Ilyen pl. az atomban kötött elektronok esete. Tudnunk kell, hogy nem minden potenciálgödörben alakulhat ki kötött állapot; ennek feltételeivel találkozni fogunk a következőkben.

Egy diszkrét sajátértékhez több különböző sajátfüggvény is tartozhat; ilyenkor azt mondjuk, hogy a sajátérték *elfajult* (degenerált). Az elfajulást sokszor valamilyen szimmetria okozza. Egy másik fontos oka lehet, ha egy külső adat (paraméter), pl. elektromos vagy mágneses térerősség függvényében változó sajátértékek valahol keresztezik egymást. Ezekkel az esetekkel a későbbi fejezetekben fogunk megismerkedni.

Szabadon terjedő hullámokhoz folytonos energiasajátértékek tartoznak; ilyenkor a (4.2) típusú egyenlet megoldásai a hullámterjedés részleteiről adnak nélkülözhetetlen információt: a hullámok szóródásáról, esetleg véges ideig tartó csapdázásáról.

4.3. Anyagmegmaradás és komplex hullámfüggvény: a kontinuitási egyenlet

A (3.7) hullámegyenletből és komplex konjugáltjából fontos megmaradási tétel következik a $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi(\vec{r}, t)\psi^*(\vec{r}, t)$ valószínűsűrűségré. A

¹ Tulajdonképpen még korábbi, rejtett üzenet volt a Gibbs-paradoxon: az, hogy a keverési entrópia nem anyagfüggő, de megkülönbözteti a különböző vagy azonos gázok keverékét.

levezetés:

$$\begin{aligned}\partial_t(\psi\psi^*) &= \psi^*\partial_t\psi + \psi\partial_t\psi^* \\ &= \frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*),\end{aligned}\quad (4.3)$$

amit elemi vektoranalízis felhasználásával (szorzat deriválása, de előkelően nevezhetjük Green-tételnek is) így írhatunk:

$$\partial_t(\psi\psi^*) = -\nabla \cdot \vec{j}, \quad (4.4)$$

ahol

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \quad (4.5)$$

a valószínűségi áram sűrűsége. A (4.4) egyenlet szabályszerű kontinuitási egyenlet, ahogy azt a hidrodinamikából ismerjük: egy sűrűség időbeli változását a megfelelő áram negatív divergenciája adja meg; ez az egyenlet tehát a teljes valószínűség megmaradását írja le. Ez az oka annak is, hogy az időtől függő Schrödinger-egyenlet megoldására elég a kezdeti feltételben teljesíteni a normálást, akkor az már később is teljesül.

Próbáljuk ki a kapott kifejezést egy $\psi = f(t) \exp[(i/\hbar)\vec{p} \cdot \vec{r}]$ alakú hullámfüggvényre: ekkor $\nabla\psi = (i/\hbar)\vec{p}\psi$ és $\nabla\psi^* = (-i/\hbar)\vec{p}\psi^*$, ezzel $\vec{j} = (\vec{p}/m)\psi^*\psi = \vec{v}_{csoport}\psi^*\psi$, aminek megint közvetlen hidrodinamikai jelentése van: az áramsűrűség a sűrűség és az áramlási sebesség (itt: a csoportsebesség) szorzata.²

A (4.5) áramsűrűség valós hullámfüggvény esetén eltűnik. Ha türelmebben nézzük a kifejezést, az is kiderül, hogy helytől független komplex szorzó sem ad áramot. A lényeg: áram csak akkor folyik, ha a hullámfüggvény fázisszöge a hely függvényében a komplex síkon elfordul.

² Azt, hogy \vec{p}/m a csoportsebesség, a (2.7) egyenletből tudjuk. Szigorúan véve, egyetlen síkhullám nem „csoport”, de szomszédos hullámvektorú síkhullámok eredője már igen; ez afféle kis Zénón-paradoxon (nem tévesztendő össze a nevezetes kvantum-Zénón-effektussal! Ez utóbbival a 17.1. pontban fogunk megismerkedni.)

5. fejezet

A Schrödinger-egyenlet egyszerű megoldásai

A kvantummechanika tanulását mindenki azzal kezdi, hogy néhány egyszerű esetre megoldja az időtől nem függő Schrödinger-egyenletet; ilyenkor kötött vagy szabad mozgást leíró energia-sajátfüggvényeket határoznak meg. Az olvasónak azt tanácsolom, hogy már ezekben az egyszerű esetekben is azokat a tulajdonságokat keresse, amelyek majd a bonyolultabb feladatokban is segíthetik az eligazodást: a valószínűségi áram szerkezetét, a határfeltételek működését a sajátérték-probléma meghatározásában, a szimmetriák felhasználását a feladat egyszerűsítésére.

A terjedő anyaghullámra, ami egy mozgó részecske kvantummechanikai megfelelője, különféle eredetű erők hatnak. Ha a részecske energiája megmaradó mennyiség, az erőhatást általában¹ egy $V(\vec{r})$, egydimenziós mozgásnál $V(x)$ skalár potenciállal lehet leírni. A jelenségek – potenciálgödörben kötött állapot kialakulása, potenciálfalon való szóródás és áthatolás – nagymértékben függetlenek a potenciál pontos függvényalakjától, ezért megismerésüket a legegyszerűbb modellel kezdjük: „szögletes”, állandó szakaszokból összetevődő egydimenziós potenciálokkal.

Ha egy intervallumban $V(x) = V$ állandó, és az E energia megmarad, akkor a (4.2) Schrödinger-féle energiasajátérték-egyenlet megoldását közvetlenül fel lehet írni. Két esetet kell megkülönböztetni:

- Ha $E > V$, akkor két lineárisan független megoldás² $\phi(x) = e^{ikx}$ (jobbra haladó hullám) és $\phi(x) = e^{-ikx}$ (balra haladó hullám). A két haladó hullám helyett célszerű lehet az állóhullámnak megfelelő $\sin(kx)$ és $\cos(kx)$ valós kombinációkból kiindulni. A választott két alapmegoldás minden lineáris kombinációja is megoldása a differenciálegyenletnek, de nem a sajátértékproblémának: ez utóbbit a határfeltételek választják ki. A k

¹ Kivétel a töltött részecskére ható mágneses tér, amelyet vektorpotenciállal kell leírni, lásd a 11. fejezetet.

² Két függvényre a lineáris függetlenség azt jelenti, hogy nem arányosak egymással; több $f_1(x)$, $f_2(x)$, $f_3(x)$... függvényre azt, hogy nincs közöttük $\sum_i c_i f_i(x) = 0$ alakú (lineáris) összefüggés, amely a többi ismeretében már bármelyiküket meghatározná.

hullámszámot az E energiasajátértékkel az energia megmaradása kapcsolja össze: $k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar$. Kötött állapotok esetén k és ezen keresztül E lehetséges értékeit is a határfeltételek szabják meg; szabad mozgásnál E a távolból bejövő részecske energiája.

- Ha $E < V$, akkor a két lineárisan független megoldás $\phi(x) = e^{-\kappa x}$ és $\phi(x) = e^{\kappa x}$, ahol $\kappa = \sqrt{2m(V - E)}/\hbar$. A megfelelő lineáris kombinációt itt is a határfeltételek választják ki.

Az állandó potenciálú tartományok határain, ahol a potenciál ugrik, határfeltételként kell kiszabni, hogy a $\phi(x)$ függvényérték és a $\phi'(x)$ derivált folytonosan menjen át egyik tartományból a másikba.

Stacionárius állapotban az áram is stacionárius, ami a kontinuitási egyenlet szerint csak divergenciamentes lehet, de ez többféleképpen valósulhat meg.

Szabad mozgásnál az áram végtelenből jön és végtelenbe tart, ami nyilván idealizáció: igazából hullámcsomagok jönnek és mennek, de ha kiterjedésük jóval nagyobb, mint a minket érdeklő térrész, akkor jogos a végtelen kiterjedésű stacionárius állapot közelítése; a bejövő és kimenő hullámokat határfeltételekkel választjuk el egymástól. Feladatainkban a hullámra ott nézünk rá, ahol valami történik vele: szóródik, visszaverődik, áthatol egy akadályon, esetleg egy időre csapdába esik.

A potenciálgödörbe zárt stacionárius mozgáshoz is divergenciamentes áram tartozik. Ettől még lehet akár állóhullám, akár haladó. Gödörbe zárt haladó hullám csak körbe járhat, amihez legalább két dimenzióra van szükség; egydimenziós kötött mozgás csak úgy tud stacionárius lenni, ha állóhullámot formáz. Mindez hasznos első tájékozódást jelent az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásaihoz.

5.1. Végtelen potenciálgödör kötött állapotai

Minden kvantummechanikai feladatok legegyszerűbbike a végtelen potenciálgödörbe zárt elektron energiasajátértékeinek meghatározása. Kezdjük egydimenziós mozgással, akkor a (3.16) egyenlet ilyen alakot ölt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) = (E - V(x))\phi(x), \quad (5.1)$$

ahol $\phi''(x)$ a hullámfüggvény x szerinti második deriváltját jelöli, a potenciál pedig

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |x| < a, \\ \infty & \text{ha } |x| \geq a. \end{cases} \quad (5.2)$$

A külső tartományokban, ahol a potenciál végtelen, ott $\phi(x) \equiv 0$, aminek a belső tartomány határán az értéke is, a deriváltja is 0. Ezzel van egy bökkenő. A határfeltételek úgy szólnak, hogy $\phi(x)$ folytonos és a deriváltja is folytonos, de ez itt nem lehet igaz, mert akkor nem lehetne más megoldás, csak azonosan 0.

Az ellentmondás feloldása az, hogy a végtelen potenciálfal határán a derivált határozatlan, akármi lehet, vagyis a belső $|x| < a$ tartományban az állóhullámnak csak a kitérése van a határokon leszögezve, belül kitérhet, mint a rezgő húr.³

Milyenek hát a megoldások? Az $|x| < a$ belső tartományban az (5.2) egyenletből

$$\phi'' = -k^2\phi; \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (5.3)$$

egyenletet kapjuk; a megoldásoknak a kétoldali

$$\phi(\pm a) = 0 \quad (5.4)$$

határfeltételeket kell egyidejűleg kielégíteniük. Az ennek megfelelő megoldások $\sin(kx)$ vagy $\cos(kx)$ alakúak; az első esetben $k = n(\pi/a)$, a második esetben $k = (n + \frac{1}{2})(\pi/a)$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) értékre teljesítik a határfeltételt.

A két számsort egyesíteni lehet $k = n(\pi/2a)$; $n = 0, 1, 2, \dots$ alakban. Ez meghatározza az energia sajátértékeit is:

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2}{8ma^2}; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.5)$$

Vegyük észre, hogy szinusz és koszinusz lineáris kombinációi általában *nem* elégítik ki a határfeltételt, csak tiszta szinusz vagy koszinusz! Ezt a határfeltételekből olvastuk ki, de előre is tudhattuk volna. A „jó” hullámfüggvényekben az a közös, hogy vagy páros, vagy páratlan függvényei x -nek, ez pedig annak a következménye, hogy az (5.2) potenciál páros, vagyis a Hamilton-operátor az $x \rightarrow -x$ tükrözési műveletben változatlan marad („tükrözés-szimmetrikus”, „a tükrözéssel szemben invariáns”). Ehhez hasonló, szimmetrián alapuló megfontolásokkal gyakran sikerül lerövidítenünk a Schrödinger-egyenlet megoldását; ami néha még fontosabb, a számértékeknél közvetlenebb bepillantást nyerhetünk a spektrum szerkezetébe. A

³ A derivált határozatlanságát könnyű belátni, ha a végtelen potenciált átmenetileg egy konstans V_0 falmagassággal helyettesítjük, majd elvégezzük a $V_0 \rightarrow \infty$ határátmenetet, rögzített E energia mellett. A magas falban a normálható megoldás $\phi = Ae^{-\kappa(|x|-a)}$, ahol $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, vagyis a végtelen fal határátmenetekor $\kappa \rightarrow \infty$. A határon ugyanekkor $\phi(\pm a) = A \rightarrow 0$, de $\phi'(\pm a) = \mp A\kappa \rightarrow 0 \times \infty$, ami tényleg akármekkora lehet.

tértükrözés konkrét esetére a logikai kapcsolatot a következő pontban mondom el; a szimmetriák szerepének általános vonásait a későbbiekben részletesen megbeszéljük.

5.2. Tükrözési szimmetria, páros és páratlan megoldások

Maradjunk az egydimenziós problémáknál. A d^2/dx^2 operátor szimmetrikus az $x \rightarrow -x$ tükrözésre nézve. Ha a $V(x)$ egydimenziós potenciál is tükrözésszimmetrikus, $V(-x) = V(x)$, akkor az egész egydimenziós Hamilton-operátor is tükrözésszimmetrikus: $\hat{H}(-x) = \hat{H}(x)$. Ekkor a

$$\hat{H}(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad (5.6)$$

energiasajátérték-egyenlettel együtt ez is teljesül:

$$\hat{H}(-x)\phi(x) = E\phi(x), \quad (5.7)$$

változatlan E sajátértékkel.

Most végezzük el az $x = -y$ változóhelyettesítést: $\hat{H}(y)\phi(-y) = E\phi(-y)$, és (ez már csak precízkedés) jelöljük át y -t x -re:

$$\hat{H}(x)\phi(-x) = E\phi(-x). \quad (5.8)$$

Ez a várt eredményünk: ha egy tükrözésszimmetrikus Hamilton-operátornak $\phi(x)$ az E sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye, akkor $\phi(-x)$ is sajátfüggvény, és ugyanahhoz az E sajátértékhez tartozik.

Mi következik ebből $\phi(x)$ és $\phi(-x)$ kapcsolatára? Ez a kérdés az *elfajulás* fogalmkörébe tartozik. Két eset lehetséges:

1. Ha az E sajátérték nem elfajult, vagyis hozzá nem tartozik több lineárisan független sajátfüggvény, akkor $\phi(-x)$ sem lehet lineárisan független $\phi(x)$ -től, csak annak konstansszorososa lehet: $\phi(-x) = a\phi(x)$. Megismételve a tükrözés műveletét, vissza kell kapnunk az eredeti függvényt, ezért $a^2 = 1$, vagyis $a = 1$ vagy $a = -1$. Az első esetben $\phi(x)$ *páros* függvénye x -nek, a második esetben *páratlan*.
2. Ha az E sajátérték elfajult, vagyis több, lineárisan független sajátfüggvényhez tartozik ez a közös sajátérték, akkor ezek bármilyen lineáris kombinációja is ugyanezen sajátértékhez tartozó sajátfüggvény. Ekkor a lineárisan független $\phi(x)$ és $\phi(-x)$ helyett választhatjuk páros és páratlan lineáris kombinációjukat: a $\phi_{ps}(x) = \phi(x) + \phi(-x)$ és $\phi_{ptl} = \phi(x) - \phi(-x)$ sajátfüggvényeket.

A következtetés: tükrözéssel szemben invariáns Hamilton-operátor esetén vagy automatikusan páros és páratlan sajátfüggvényeket kapunk, vagy ilyeneket választhatunk.

Hogy előkészítsük a szimmetriák általánosabb elméletének megismerését, írjuk a fentieket a következőképpen: vezessük be a tértükrözés, más szóval a *paritás* \hat{P} operátorát: $\hat{P}f(x) = f(-x)$. Kétszeres tükrözés visszaadja az eredeti függvényt: $\hat{P}^2 = \mathbb{1}$, vagyis $\hat{P}^{-1} = \hat{P}$. \hat{P} sajátértékei $+1$ és -1 ; a megfelelő sajátfüggvények a páros, ill. páratlan függvények.

Eredményeinket ezen az absztraktabb nyelven úgy foglalhatjuk össze, hogy tükrözésszimmetrikus Hamilton-operátor esetén $\hat{P}\hat{H}(x)f(x) = \hat{H}(-x)f(-x) = \hat{H}(x)f(-x) = \hat{H}(x)\hat{P}f(x)$, vagyis $\hat{P}\hat{H} = \hat{H}\hat{P}$. Amint majd a 6.1. pontban megtanuljuk, ebből az következik, hogy \hat{H} -nak és \hat{P} -nek van közös sajátfüggvényrendszere: az energia-sajátfüggvényeket választhatjuk a páros és páratlan függvények közül.

5.3. Véges potenciálgödör

Kis hatótávolságú vonzóerő legegyszerűbb modellje egy véges négyszögletű potenciálgödör. Az energia zéruspontját tetszés szerint választhatjuk meg; célszerű úgy választani, hogy nagy távolságra a potenciál eltűnjön:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{ha } |x| < a, \\ 0 & \text{ha } |x| \geq a, \end{cases} \quad (5.9)$$

és gödörről lévén szó, $V_0 < 0$.

Milyen kötött állapotok alakulhatnak ki ebben a gödörben? A kötött állapot a gödör környezetére lokalizálódik, energiája a $V_0 < E < 0$ intervallumba esik. Stacionárius állapotban csak divergenciamentes áram folyhatna, de egy dimenzióban, térben korlátozva, nincs honnan hova folynia, körbe se futhat, ezért a (4.5) áram azonosan 0. Ekkor az (5.1) Schrödinger-egyenlet sajátfüggvényeit konstans szorzótól eltekintve valósnak választhatjuk. Tudjuk még azt is, hogy az (5.9) potenciál páros függvény, ezért az energiasajátfüggvények párosak vagy páratlanok.

Kezdjük a páros megoldásokkal. Válogassunk a fejezet elején felkínált lehetőségekből. A gödör belsejének csak ez felel meg:

$$\phi(x) = \cos(kx) \quad (|x| \leq a); \quad k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2. \quad (5.10)$$

A gödrön kívüli, végtelenbe nyúló tartományban a normálhatóság követelménye jelenik meg, mint határfeltétel: ki kell zárunk a távolsággal exponenciálisan növekedő függvényeket, így ez a páros kombináció marad:

$$\phi(x) = Ae^{-\kappa(|x|-a)} \quad (|x| \geq a); \quad \kappa^2 = -2mE/\hbar^2; \quad \kappa > 0. \quad (5.11)$$

Ha megszámoljuk, itt négy ismeretlen van: E , k , κ és az A amplitúdó. Az energiát tartalmazó két egyenletet összeadva E kiesik; a kapott feltételt a^2 -tel szorozva, $-V_0 = |V_0|$ felhasználásával dimenziótlanított egyenletet kapunk:

$$(ka)^2 + (\kappa a)^2 = \frac{|V_0|}{\hbar^2/(2ma^2)}. \quad (5.12)$$

Vegyük észre, hogy a jobboldalon a nevezőben az a kinetikus energia áll, ami a részecske $\Delta x \approx a$ térrészre való lokalizálásakor lépne fel a $\Delta p \approx \hbar/\Delta x$ határozatlansági relációnak megfelelően; ezt az energiát hasonlítjuk össze a gödör $|V_0|$ mélységével. Azt gondolhatnánk, hogy kötött állapot csak akkor lép fel, ha az arány elég nagy; mindjárt látni fogjuk, hogy ez nem igaz.

További egyenleteket kapunk az $x = \pm a$ gödörhatárokon való illesztésből. Mivel páros függvényeket választottunk (ugyanez vonatkozik a páratlanokra is), a két határ nem ad független egyenleteket; maradjunk a függvényérték és a derivált $+a$ helyen való illesztésénél:

$$\cos(ka) = A; \quad -k \sin(ka) = -A\kappa. \quad (5.13)$$

A két egyenletet elosztva egymással és a -val szorozva újabb egyenletet kapunk a dimenziótlan ka és κa ismeretlenek között:

$$\kappa a = ka \operatorname{tg}(ka). \quad (5.14)$$

Könnyű belátni, hogy az (5.12) és (5.14) egyenletekből álló rendszernek *bármilyen sekély gödör* esetén van megoldása, amelyből, mondjuk az (5.11) egyenlet felhasználásával, megkapjuk a megfelelő energiasajátértéket.

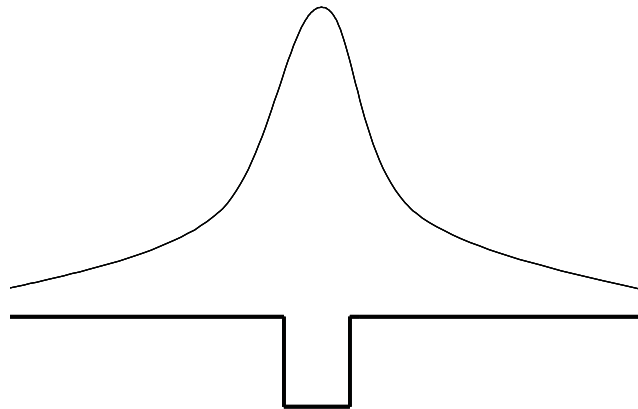
Milyen sajátfüggvény is tartozik a nagyon sekély potenciálgödörben lokalizált részecskéhez? A válasz az, hogy rossz a kérdés: a hullám nem a gödörben, hanem a *gödörhöz* lokalizálódik, $\kappa a \ll 1$ vagyis $\Delta x \gg a$ miatt a gödörnél sokkal nagyobb térrészre szétkenve (lásd az 5.1. ábrát), a függvény simasága miatt nagyon kevés kinetikus energiával. Ez is példa arra, hogy hullámokkal olyasmi is megtörténhet, ami klasszikus részecskékkel nem.

A páratlan megoldások esete egyszerűbb, és kevésbé meglepő: a gödrön belül

$$\phi(x) = \sin(kx) \quad (|x| \leq a); \quad k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2, \quad (5.15)$$

a gödrön kívül pedig

$$\phi(x) = \frac{x}{|x|} A e^{-\kappa(|x|-a)} \quad (|x| \geq a); \quad \kappa^2 = -2mE/\hbar^2 \quad (5.16)$$



5.1. ábra. Egy dimenzióban a legkisebb potenciálgödör is képes lehorgonyozni egyetlen kötött állapotot, de annak hullámfüggvénye messze túllóg a gödör peremén. Több dimenzióban ilyen nincs.

alakú a hullámfüggvény. A kettő illesztéséből most is a ka és κa ismeretleneket összekötő egyenleteket kapunk; egyikük megegyezik a páros eset (5.12) egyenletével, ezzel szemben az (5.14) egyenlet helyére ez kerül:

$$\kappa a = -ka \operatorname{ctg}(ka). \quad (5.17)$$

Most az egyenletrendszernek nagyon sekély gödörben *nincs* megoldása, annak megfelelően, hogy a páratlan függvényeknek legalább egy zérushelyük van, viszont a határon már vissza kell hajlaniuk, hogy normálható exponenciálshoz lehessen őket illeszteni. Emiatt a hullámhosszuk nem lehet $4a$ -nál nagyobb, ami egy minimális $\hbar^2 \pi^2 / 8ma^2$ kinetikus energiát kényszerít rájuk. Ha a gödör ennél sekélyebb, nincs páratlan hullámfüggvényű kötött állapot.

Eredményeink meghatározzák a kötött állapot energiáját és a hullámfüggvény alakját, de szabadon hagynak egy konstans szorzót a hullámfüggvényben. Ezt pedig fontos tudni, mert amint azt a következőkben bőszeges példákön látni fogjuk, az operátorok mátrixelemeinek nagysága tartalmazza ezeket a konstans szorzókat. Ezért jegyezzük meg, hogy a konstans szorzó nagyságát a hullámfüggvény *normálása* rögzíti.

Megemlítjük még, hogy a nagyon sekély gödörben megvalósuló sima páros kötött állapot csak egy dimenzióban jön létre, háromdimenziós megfelelője nincs: háromdimenziós gödörnek el kell érnie egy minimális mélységet, hogy kötött állapot alakulhasson ki benne. Az egydimenziós lokalizációnak viszont messzemenő következményei vannak, pl. bármilyen gyengén

ingadozó véletlen potenciálban is létrejönnek lokalizált állapotok; ez lényeges része a rendezetlen szilárd testekben sokat vizsgált *Anderson-lokalizáció* jelenségkörének.

5.4. A dobozba zárt részecske, ciklikus határfeltétel, cellák a fázistérben

Egy darab fémben vagy félvezetőben szabadon mozgó elektron kvantummechanikájának hasznos nulladik modellje egy végtelen magas falú, téglatest alakú potenciáldoboz, a , b és c hosszúságú élekkel. A határfeltételek: a hullámfüggvény tűnjön el a doboz határain. Az energiasajátértékek összehasonlítása teljesen analóg azzal, ahogy a hőszugárzással való ismerkedésünk során számoltuk össze az elektromágneses hullámok állóhullám-módusait, csak most a határfeltételek egyszerűbbek, mert ez a hullámfüggvény skálár: a doboz minden élével párhuzamosan egész számú félhullámot tudunk elhelyezni úgy, hogy a határfeltételeket kielégítsék. Ennek megfelelően, ha az origót a téglalap egyik sarkába helyezzük el, az energiasajátfüggvények $\sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$ alakúak, és a határfeltételeket akkor elégítik ki, ha

$$k_x = n_x \frac{\pi}{a}, \quad k_y = n_y \frac{\pi}{b}, \quad k_z = n_z \frac{\pi}{c}, \quad (5.18)$$

ahol

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (5.19)$$

Itt állóhullámokról lévén szó, csak pozitív számok szerepelhetnek; nulla sem lehet köztük, mert akkor nincs hullám.

A fenti k értékekhez tartozó $\hbar^2 |\vec{k}|^2 / 2m$ energiasajátértékek:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right). \quad (5.20)$$

Legyen a doboz nagyon lapos: $c \ll a, b$. Ekkor a z irányú hullámok gerjesztéséhez szükséges energia nagy lesz, mivel $1/c^2 \gg 1/a^2, 1/b^2$. Ilyenkor elég alacsony hőmérsékleten, ha $k_B T \ll (\hbar^2 \pi^2 / 2m) / c^2$, a c irányú hullámmozgás „befagy” az $n_z = 1$ alapállapotba, és a rendszer úgy viselkedik, mintha csak két dimenziós lenne. Ilyen *kvázikétdimenziós* rendszereket az utóbbi évtizedben részletesen vizsgáltak félvezetők határfelületein, 10–100 nm méretben, 1 K körüli hőmérsékleten, és a kvantummechanika egyik legizgalmasabb kísérleti megjelenési területének számítanak. Olyan is van, hogy a rendszer két irányban is sokkal kisebb, mint a harmadikban, ilyenkor alacsony hőmérsékleten csak egyetlen dimenzió gerjeszthető, és a rendszer

kváziegydimenziósként viselkedik, sőt, minden irányból erősen lehatárolt rendszer is készíthető, amely az adott alacsony hőmérsékleten termikusan egyáltalán nem gerjesztődik.⁴

Az a motívum, hogy egy adott irányban kicsiny kiterjedésű rendszerek ebben az irányban csak nagy frekvencián, nagy energiával gerjeszthetők, és ezért alacsonyabb frekvencián, alacsonyabb energián az ilyen dimenziók kifagynak, a fizika különböző területein előjön, kezdve az elektromágneses hullámvezetőktől – köztük az optikai szálaktól – egészen az elemi részecskék húrmodelljeinek a négydimenziós világon túli dimenzióig.

Van a dobozok elektronállapotainak egy másik fontos kiágazása is. Nagy háromdimenziós potenciáldobozban kialakuló kötött állapotoknál a feladat sokszor a doboz a , b , c éleinél sokkal rövidebb hullámhosszú *haladóhullám* módusok közelítő leírása, akkora pontossággal, hogy a belőlük felépülő és a doboz belsejében mozgó hullámcsomagokat Fourier-sor módjára összerakhassuk. A feladatnak része a módusokhoz tartozó energiasajátértékek közelítő összeszámolása egy kicsiny, de véges energiaintervallumban. Mindennek tipikus alkalmazási területe a kristályos szilárd testek elektromos vezetésének és rugalmas hullámainak kvantumelmélete.

Max Born és tanítványa, a hidrodinamika későbbi nagy alkotója, Kármán Tódor jött rá a szilárdtestfizika kezdeteinek kiépítésénél, hogy ilyenkor a határfeltételek pontos alakja nem lényeges, mert rajtuk egy millió hullámhossznyi üregben fél hullámhossznyi hiba múlhat, viszont az egymástól egy hullámszámnyit eltérő módusok energiaszintjeinek egymástól való távolságát – vagyis az energiaszintek sűrűségét – a határfeltételek megváltozása ennél jóval kevésbé befolyásolja. Ezzel szemben nem praktikus a haladóhullámokat állóhullámokból komplex fázisokkal összerakosgatni; célszerűbb az egyszerű, bár fizikailag nem reális *ciklikus határfeltételt* választani, amely nagyon közvetlenül elvezet a kellő pontosságú adatokhoz. Ezt a stratégiát követi azóta is a kristályos szilárd testek fizikája.

A leírásban a $-(\hbar^2/2m)\Delta\phi = E\phi$ egyenlet megoldásait haladó, a doboz $\mathcal{V} = abc$ térfogatára normált síkhullámok alakjában keressük:

$$\phi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} + \chi)} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} e^{i\chi}, \quad (5.21)$$

ahol a mértékinvariancia miatt az $e^{i\chi}$ faktort el is hagyhatjuk. Ezt a próbafüggvényt illesztjük olyan határfeltételekhez, amelyeknél a hullámfüggvény

⁴ Ezt a mérettartományt *mezoskopikus* vagy *nanoszerkezet* néven is emlegetik. A kvázikét-dimenziós rendszerek neve *kvantumgödör* (angolul: quantum well), a kváziegydimenziósaké *kvantumhuzal* (quantum wire), a kvázi-nulladimenziósaké *kvantumpötty* (quantum dot).

a doboz felületének átellenes pontjain azonos értéket vesz fel. Ez az x , y , z tengelyekre merőleges felületepárokon összesen három feltételt jelent:

$$\phi(x, y, z) = \phi(x + a, y, z) = \phi(x, y + b, z) = \phi(x, y, z + c), \quad (5.22)$$

amelyek meghatározzák a hullámvektor komponenseinek megengedett értékeit:

$$k_x = n_x \frac{2\pi}{a}, \quad k_y = n_y \frac{2\pi}{b}, \quad k_z = n_z \frac{2\pi}{c}, \quad (5.23)$$

ahol n_x , n_y , n_z *tetszőleges* (pozitív, 0 vagy negatív) egész számok, mivel a haladóhullámok bármilyen irányba haladhatnak. Ugyanez a $p_i = \hbar k_i$ ($i = x, y, z$) impulzuskomponensekben kifejezve:

$$p_x = \frac{h}{a} n_x, \quad p_y = \frac{h}{b} n_y, \quad p_z = \frac{h}{c} n_z. \quad (5.24)$$

Ezek a pontok a klasszikus mechanika által megengedett impulzusok terében egy szabályos rácsot alkotnak, amelynek elemi cellája h^3/ψ térfogatú; ennyi impulzustérfogathoz tartozik a doboznak egy haladóhullámú energiasajátfüggvénye.

Még beszédesebb fogalomalkotáshoz jutunk, ha bevezetjük a koordináta-és impulzustengelyek által kifeszített *fázisiteret*. Ebben egy energiasajátfüggvénynek megfelelő fázistérfogat az impulzuscella és a bejárható térfogat direkt szorzata, vagyis h^3 nagyságú fázistérfogat. Ezt a fogalmat sűrűn használja a statisztikus fizika.

Az impulzusrács pontjaihoz tartozó energiasajátértékek most

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right). \quad (5.25)$$

Első ránézésre olyan, mintha ezek ritkábban helyezkednének el, mint az állóhullám módusok (5.20) energiái, de itt minden energiasajátértékhez 8 haladóhullám tartozik, $\pm n_x$, $\pm n_y$, $\pm n_z$ szerint; ennek meg előlően egy energia-intervallumba az impulzustér egy teljes gömbhéja beletartozik, nem csak a pozitív nyolcad-gömbhéj.

A magasan gerjesztett, a doboz méreteihez képest rövidhullámú módusok energiasajátállapotainak sűrűsége arányos a doboz térfogatával, de nagymértékben független a doboz alakjától. Ezt matematikailag nehéz bebizonyítani, de fizikailag eléggé kézenfekvő; ezen múlik a termodinamikában az extenzív mennyiségek létezése.

5.5. Alagúteffektus és rezonanciaszórás

A kvantummechanika korai meglepetései közé tartozott, hogy egy $E > 0$ energiájú hullám $V_0 > E$ magasságú potenciálfalon („potenciálgáton”) is át tud hatolni, mint Harry Potter a 9 és 3/4-edik vágányhoz vezető falon, amelyről pedig egy „klasszikus” részecske vagy regényhős az energia megmaradásának megfelelően visszapattanna. A hullám intenzitásának egy része így is visszaverődik, de ami nem, az átjut; ehhez csak a fal d vastagságának kell eléggé kicsinek lennie.

A hullámok fizikája felől nézve persze a dolog teljesen normális. Az első meglepetés óta a jelenséget számos változatában megfigyelték (α -bomlás, elektromos áram áthaladása vékony oxidrétegen, Josephson-effektus szupravezetőkben), és alkalmazták is (félvezető alagút-diódák, Josephson-effektuson alapuló magnetométerek stb.). Most a jelenség legegyszerűbb egydimenziós „négyszög-potenciális” modelljét ismerjük meg; a folytonosan változó, de még mindig egydimenziós potenciálfal esetével a 16. fejezetben, a szemiklasszikus közelítés tárgyalásánál foglalkozunk.

Az akadályt most egy

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{ha } 0 < x < d, \\ 0 & \text{ha nem} \end{cases} \quad (5.26)$$

potenciállal helyettesítjük, és keressük az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásait.

A kötött állapot eddig tárgyalt problémáitól eltérően, most bármilyen $E > 0$ értéknél találunk olyan megoldást, amely bejövő, a potenciálfalon részben áthaladó, részben visszaverődő anyaghullámnak felel meg. Határfeltételnek is csak ennyit kötünk ki: a megoldás álljon az egyik oldalról befutó és mindkét oldalra kifutó hullámokból.

A normálás kérdése nem triviális: egy végtelen kiterjedésű síkhullám normálási integrálja végtelen. Amint már említettük, ilyenkor szokásos a bejövő hullámot egységnyi amplitúdójúra választani; amit meg akarunk határozni, az az áthaladó hullám t és a visszavert hullám r amplitúdója, majd ezeken keresztül az áthaladás $|t|^2$, ill. a visszaverődés $|r|^2$ valószínűsége.⁵ Ennek megfelelően keressük a megoldást ilyen alakban:

$$\phi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & \text{ha } x < 0, \\ t e^{ikx} & \text{ha } x > d, \\ A e^{-kx} + B e^{kx} & \text{ha } 0 \leq x \leq d, \end{cases} \quad (5.27)$$

⁵ Ha a beeső és a továbbhaladóhullám kinetikus energiája eltérő, mert a fal előtt és után más a potenciál értéke, vagy mert rugalmatlan folyamatokat is le akarunk írni, az áramsűrűségben figyelembe kell vennünk a csoportsebesség megváltozását is.

ahol $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ és $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ értékét a *bejövő* hullám E energiája határozza meg.

Az egyenletrendszer harmadik sora írja le a potenciálgát belsejében kialakuló evaneszcens hullámot. Ez egy áthaladó és egy a kimenetről visszaverődő hullámból áll. Jegyezzük meg, hogy ez utóbbi nagyon fontos szereplő: nélküle a falban a hullámfüggvény valós lenne, és emiatt nem juthatna át a falon a részecske áramsűrűség.

Az ismeretlen r , t , A , B amplitúdókat az $x = 0$, d határokon a hullámfüggvény és deriváltja illesztéséből kapott négy egyenlet határozza meg. Kvantummechanika tankönyv nem létezhet ezek nélkül, álljanak tehát itt is, ahogyan kell:

$$1 + r = A + B, \quad (5.28)$$

$$ik(1 - r) = \kappa(-A + B), \quad (5.29)$$

$$t e^{ikd} = A e^{-\kappa d} + B e^{\kappa d}, \quad (5.30)$$

$$ik t e^{ikd} = \kappa(-A e^{-\kappa d} + B e^{\kappa d}). \quad (5.31)$$

Az egyenletrendszer megoldása elemi feladat; kifejezve először A és B értékét, a harmadik egyenletből némi átalakítással megkapjuk az áthaladás valószínűségét:

$$|t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(\kappa d)}. \quad (5.32)$$

Az olvasónak jó szívvel ajánlom, hogy ellenőrizze ezt a fontos eredményt még két módon: 1. számolja ki $|r|^2$ -et, és ellenőrizze, hogy teljesül $|r|^2 + |t|^2 = 1$, vagyis a *bejövő* hullám vagy előre vagy hátra, de továbbhalad és nem vész el; 2. a (4.5) kifejezés felhasználásával számolja ki a potenciálgát belsejében a \vec{j} valószínűség-áramsűrűség nagyságát, ellenőrizze, hogy megegyezik a $|t|^2$ alagutazási valószínűséggel, és győződjék meg róla, hogy a visszaverődő evaneszcens hullám nélkül ez az áram 0 lenne.

Ez az utóbbi megjegyzés érdemes arra, hogy az olvasó legalább egyszer átgondolja: valós energiasajátfüggvények áramot nem vezetnek; az alagutazáshoz legalább két különböző helyfüggésű valós exponenciálist kell összeadni, komplex $A = |A| \exp(i\delta_A)$ és $B = |B| \exp(i\delta_B)$ együtthatókkal. Emiatt félrevezető azt mondani, hogy a visszavert exponenciális elhanyagolható; a potenciálgát alatti tartományban közvetlenül kiszámolható, hogy az átfolyó áramsűrűség

$$j = \frac{\hbar}{2im} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) = \frac{\hbar \kappa}{m} |A| |B| \sin(\delta_B - \delta_A), \quad (5.33)$$

amiben a „gyenge” reflektált hullámnak kihagyhatatlan szerepe van.

Az utolsó egyenlet érdekes összefüggést mutat a két oldalról hozott kvantummechanikai fázisok különbsége és az átalagutazó áram között. Ennek közvetlen kísérleti megjelenéseit tapasztalhatjuk a Josephson-effektusban (1962), ahol két szupravezető közötti oxidrétegen – ún. Josephson-átmeneten – elektronpárok alagutaznak át, és ezt árammérővel lehet mérni. Amíg az átfolyó áram a kritikus $\frac{\hbar\kappa}{m}|A||B|$ érték alatt marad, ellenállás nélkül folyik át a Josephson-átmeneten, csak a $\delta_B - \delta_A$ kvantummechanikai fáziskülönbség hangolódik hozzá az áram nagyságához. Amint azonban a fenti maximumnál nagyobb áramot akarunk áthajtani, a varázslat megszűnik, az átmenet ellenállása véges értékre ugrik, a két oldal között feszültségesés lép fel. Még érdekesebb az az eset, amikor az oxidréteg egy zárt vezető hurkot szakít meg, amelyben mágneses fluxust hozunk létre: ilyenkor, amint azt a 11.3. pontban megtanuljuk, a körbezárt fluxus elhangolja a hullámfüggvény fázisát, amely az (5.33) összefüggésnek megfelelően az alagutazó áram periodikus változásához vezet. Ez ampermérővel mérhető, amivel rendkívül érzékeny magnetométereket lehet konstruálni.⁶

Az alagutazásnak a félvezető elektronikában is jut szerep. A már említett nanoszerkezetekben kapufeszültségekkel létrehozott potenciálgáton át alagutazva járnak az elektronok ki-be egy-egy lehatárolt térrészbe.

A fontos $\kappa d \gg 1$ határesetben az alagutazás valószínűsége a potenciálgát vastagságával exponenciálisan, $e^{-2\kappa d}$ függvény szerint változik. Ez a szemléletes eredmény kiterjeszhető nem szögletes, hanem folytonosan változó magasságú potenciálgátakra is, a WKB (szemiklasszikus) közelítés felhasználásával, amit a 16. fejezetben fogunk megismerni.

Végül beszéljük meg röviden a *rezonanciaszórás* jelenségét. Amikor az energia elegendő az akadályon való áthaladáshoz, $E > V_0$, sőt az „akadály” potenciálgödör is lehet ($V_0 < 0$), a bejövő E energia egyes értékeinél a visszaverődés valószínűsége rezonanciaszerűen megnövekszik. Az elméleti eredményeket nagyon egyszerűen lehet megkapni az alagúteffektus formuláiból, csak a $\kappa = i k$ helyettesítést kell elvégezni; ezzel $\sinh(\kappa)$ átmegy $i \sin(k)$ -ba,

⁶ Az eszköz neve SQUID, ami a „Superconducting Quantum Interference Device” rövidítése, amúgy tintahalat jelent. A Josephson-effektus folklórához tartozik, hogy Josephson elméleti jóslatának megjelenése után jó ideig nem sikerült a jelenségeket kísérletileg megfigyelni. A kiváló elméleti fizikus Philip Anderson jött rá, hogy ennek oka a Föld mágneses tere, amely a Josephson-áram érzékenységéhez képest túl erős; ezt leárnyékolva, azonnal sikerült megfigyelni a Josephson-effektust.

más nem változik.⁷ Az eredmény: a túljutás valószínűsége

$$|t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2(k'd)}, \quad (5.34)$$

ahol $k' = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$. Ez felveszi a maximális 1 értéket minden olyan E értékre, ahol $\sin^2(k'd) = 0$, vagyis ha az E -hez tartozó hullámhossz $\lambda = 2d/n$: a teljes oda-vissza pattogásra egészszámú hullám fér rá, és a kimenet-hez 0, 1, 2, 3, ... pattogás után azonos fázisban odaérő rész hullámok egymást erősítik. Ha az olvasónak erről a klasszikus optikából ismert Fabry–Perot rezonátor jut eszébe, nem téved: itt ugyanarról a jelenségről van szó. A rezonancia maximumai akkor élesek, ha $E - V_0 \ll V_0$: ha energiában alig megyünk a potenciálfal teteje fölé. A Fabry–Perot rezonátornál ez felel meg a majdnem teljesen reflektáló tükrök esetének.

5.6. A harmonikus oszcillátor stacionárius állapotai

Az egyensúlyából kicsit kimozdított inga vagy a rugóra akasztott m tömegű test szabályos, egyetlen ω körfrekvenciával jellemezhető, vagyis *harmonikus* (felhangok nélküli) rezgőmozgást végez, $x \approx x_0 \sin(\omega t + \varphi_0)$ időfüggésű kitéréssel, amíg a súrlódás le nem csillapítja. A klasszikus mechanikából tudjuk, hogy a harmonikusság feltétele a visszatérítő erő *lineáris* függése a kitéréstől: $F = -Gx$, ami általában csak kis kitérésekre érvényes közelítés; nagy kitéréseknél „anharmonikus” korrekciók lépnek fel. A harmonikus rezgés körfrekvenciáját az erőállandó és a tömeg határozza meg: $\omega = \sqrt{G/m}$; az ennek megfelelő potenciális energia $V(x) = Gx^2/2 = (m\omega^2/2)x^2$.

A fentiek szerint az egydimenziós harmonikus oszcillátor Schrödinger-féle energiasajátérték-egyenlete

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \phi = E\phi. \quad (5.35)$$

A megoldáshoz vezető első lépés áttérni dimenziótlan változókra. Az oszcillátor jellegzetessége, hogy van egy energiadimenziójú skálaparamétere: a $\hbar\omega$ Planck-féle energiakvantum. Ezért bevezethetjük az $\varepsilon := E/\hbar\omega$ dimenziótlan energiát, ezzel az egyenlet

$$-\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \phi = 2\varepsilon\phi. \quad (5.36)$$

⁷ Amikor a formulák okosabbak, mint az ember, azt nevezik előkelően analitikus folytatásnak.

Ez az alak közvetlenül sugallja, hogy hogyan dimenziótlaníthatjuk az x koordinátát is: csak az $y := x/\sqrt{\hbar/m\omega}$ dimenziótlan kombinációt kell bevezetnünk; ha $'$ jelöli az y szerinti deriváltat, akkor a Schrödinger-egyenlet végleges alakja

$$\phi''(y) + (2\varepsilon - y^2)\phi(y) = 0. \quad (5.37)$$

Ennek a szemre egyszerű egyenletnek van egy nemtriviális matematikai tulajdonsága: a „lényeges szingularitás” $y \rightarrow \pm\infty$ esetén. Itt a megoldást nem lehet közvetlenül hatványsor alakjában megkapni, emiatt ezt a határesetet külön kell kezelnünk.

A megoldás kulcsa az az észrevétel, hogy nagy y -ra ε (és a deriváláskor fellépő y szorzó) elhanyagolható y^2 mellett, emiatt a megoldás aszimptotikus viselkedésében egy

$$\phi(y) \sim e^{-\frac{y^2}{2}}, \quad |y| \rightarrow \infty \quad (5.38)$$

tényező dominál. A differenciálegyenletnek $e^{+\frac{y^2}{2}}$ is megoldása, de ez sérti a normálhatóság határfeltételét.

A fenti alak csak aszimptotikusan igaz, véges y -ra nem elégíti ki az (5.37) egyenletet. Keressük a teljes megoldást

$$\phi(y) = e^{-\frac{y^2}{2}}H(y) \quad (5.39)$$

alakban, ahol a $H(y)$ függvénytől azt várjuk, hogy ne rontsa el az egyszer már kialakult aszimptotikus viselkedést. Amint mindjárt látni fogjuk, ez annyira erős követelmény, hogy teljesen meghatározza az energia sajátértékeit.

$H(y)$ kielégíti a

$$H'' - 2yH' + (2\varepsilon - 1)H = 0 \quad (5.40)$$

differenciálegyenletet; ennek megoldását keressük hatványsor alakjában: $H(y) = a_0 + a_1y + a_2y^2 + \dots + a_ny^n + \dots$, amit behelyettesítve az egyenletbe, egy tetszőleges y^n hatvány együtthatójára ez adódik:

$$(n+2)(n+1)a_{n+2} - (2n+1-\varepsilon)a_n = 0, \quad (5.41)$$

amit a megoldást meghatározó rekurziós formula alakjában írhatunk:

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\varepsilon}{(n+2)(n+1)}a_n. \quad (5.42)$$

Most jön a módszer csattanója. Nagy $|y|$ értékekre a hatványsornak az $n \gg 1$, $n \gg \varepsilon$ tagjai dominálnak. Ezekre a fenti rekurzió leegyszerűsödik:

$a_{n+2} \approx (2/n)a_n$, amiből $a_{2n+2} \approx a_n/n$. Innen konstans szorzótól eltekintve $a_{2n+2} \approx 1/n!$, ami $y^2 \exp(y^2)$ hatványsorának együtthatója.

Ez *tényleg* felülírja az (5.39) egyenletben feltételezett aszimptotikát! Egyetlen kibúvó, ha $H(y)$ hatványsorának valahol vége szakad, vagyis ha $H(y)$ véges polinom. Innen a módszer neve: Sommerfeld-féle polinom-módszer.

Fejezzük be a számolást. Legyen a polinom legmagasabb fokú tagja $a_n y^n$, vagyis $a_{n+2} = a_{n+4} = \dots = 0$: ez az (5.42) rekurzió értelmében akkor következik be, ha $\varepsilon = n + 1/2$, vagyis ha

$$E = E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.43)$$

A fenti feltétel csak akkor vágja el az (5.42) rekurzió folytatását, ha $a_{n-1} = 0$: a polinom vagy csak páros, vagy csak páratlan hatványokat tartalmazhat. Ez összhangban van azzal, hogy a harmonikus oszcillátor potenciál-függvénye páros, emiatt az energiasajátfüggvények a paritás sajátállapotai: páros vagy páratlan függvények. A párosakat úgy kapjuk, ha a rekurziót $a_0 \neq 0$, $a_1 = 0$ értékekről indítjuk; a páratlanokat, ha $a_0 = 0$, $a_1 \neq 0$ -ról.

Az (5.40) egyenlet így levezetett polinom-alakú megoldásai, a rekurzió speciálisan megválasztott kezdeti értékei mellett, a kvantummechanikaival azonos normálási feltételt kiróva, éppen a matematika nevezetes speciális függvényei közé tartozó *Hermite-polinomok*.

Normálási integráljaik kiszámítása nem triviális feladat. Az $n = 0$ sajátfüggvény azonban a normálással együtt kitalálható valószínűség-számítási ismeretek alapján: a 0-adrendű Hermite-polinom konstans, így a megfelelő valószínűség eloszlásfüggvény Gauss-féle (normális) eloszlás, valamilyen σ szórással: $|\phi_0(x)|^2 = \exp(-x^2/2\sigma^2)/(\sqrt{2\pi}\sigma)$, vagyis

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}. \quad (5.44)$$

Összehasonlítva az $e^{-y^2/2}$ függvényalakokkal és y definíciójával, leolvashatjuk, hogy az alapállapot hullámcsomag szórása

$$\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}. \quad (5.45)$$

Ezt az eredményt érdemes megjegyezni; vegyük észre, hogy a szórási átmegy a klasszikus mechanikának megfelelő nullába, ha \hbar eltűnik, vagy ha az oszcillátor tömege nagyon nagy, vagy ha a rugó nagyon erős.

Külön említést érdemel az $n = 0$ esethez, a harmonikus oszcillátor alapállapotához tartozó energiasajátérték. Amint az (5.43) egyenletből látjuk, ez az energia nem 0, hanem $E_0 = \hbar\omega/2$, a *zérusponthoz tartozó rezgés energiája*. Amint már a 2. fejezetben megbeszéltük, ez abból ered, hogy az elérhető minimális energiát a határozatlansági relációnak megfelelően nem a potenciálgödör aljára való teljes lokalizáció biztosítja – annak végtelen nagy kinetikus energia lenne a következménye –, hanem egy $\sqrt{\hbar/2m\omega}$ szélességű Gauss-görbe alakú hullámcsomag, amelynek van egy kis potenciális és egy kis kinetikus energiája, de a kettő összege a lehető legkisebb.

Az energiasajátértékek és a stacionárius állapotok hullámfüggvényei elvben minden információt tartalmaznak egy fizikai rendszerről, de gyakorlatban ez csak féligazság: az időtől függő kvantumállapotok fontos tulajdonságaihoz ezen az úton nem igazán lehet eljutni. Ezért a harmonikus oszcillátor alaposabb megismerését elhalasztjuk a 8. fejezetig, előtte pedig megismerjük a kvantummechanika általánosabb formalizmusát, amelyre a kvantumvilág megismerésének hatékony technikái épülnek.



TEXTS DON'T GROW ON TREES!
AUTHORS' RIGHTS AWARENESS CAMPAIGN

© Geszti Tamás

6. fejezet

Az általános formalizmus

A kvantumelmélet előtti fizikát a kvantumelmélet felől visszanézve *klasszikus fizikának* nevezzük, és a világ egyfajta leegyszerűsített képének tekintjük. Ez a leegyszerűsített kép azonban a makroszkopikus világnak elképesztően pontos leírását adja, amit soha, sehol nem sikerült lazaságon kapni. A klasszikus fizikában egy pontszerűnek tekinthető test (nevezhetjük akár részecskének is) pillanatnyi állapotát két vektor adja meg: hol van, és milyen sebességgel mozog. A két vektor összesen hat komponensének megadásából a részecskére ható erők ismeretében kiszámítható a részecske későbbi mozgása. Ennek szigorú kauzalitása a klasszikus fizika legjobban bizonyított tényei közé tartozik; ezért bízzuk házaink és gépeink tervezését mérnökökre, nem pedig varázslókra.

A mikroszkopikus világban ennél finomabb, részletesebb leírásra van szükség: a szerkezet nélküli, pontszerűnek mondott részecske a térben kiterjedten, hullámszerűen mozog, és a hullámmozgás amplitúdóját leíró $\psi(\vec{r}, t)$ hullámfüggvény időben is állandóan változik: éppen ő írja le a részecske pillanatnyi állapotát; benne van minden információ helyről, impulzusról meg mindarról, amire még kíváncsiak lehetünk. Időbeli változását a Schrödinger-egyenlet írja le, amely ugyanolyan szigorú természettörvény, mint a klasszikus test mozgását leíró Newton-egyenletek.

Már találkoztunk a kvantumrendszerek mérésénél fellépő véletlenszerűséggel. A 2. fejezet végén megismert Born-szabály csak a hely mérésével foglalkozott; ezt most kiterjesztjük más mennyiségek mérésére is. A kapott statisztikus törvényszerűségek különböző rendszereken végzett laboratóriumi kísérletek óriási változatosságát írják le, köztük – a kísérleti technika fejlődésével – ma már nem csupán mikrorendszerek *sokaságának* statisztikai feldolgozását, hanem atom- és ioncsapdákbán tartott *egyes* atomokon végzett mérések statisztikáját is; lásd a B. függelék.

A Schrödinger-egyenlet következményeinek feltárása közben egy gyönyörű matematikai szerkezet bukkan elő: a *Hilbert-tér*, amelynek vektorai a kvantumállapotok; őket mozgatják a fizikai mennyiségeknek megfelelő ope-

rátorok. Ennek a képnek tömör kifejezőkészsége nyomán számos eredmény hullik ölünkbe. Ezek begyűjtésével foglalkozik a jelen fejezet. Nem lesz rövid olvasmány, de aki az utána következőket meg akarja érteni, annak ezen át vezet az út.¹

6.1. Hullámfüggvény és kvantumállapot; megfigyelhető fizikai mennyiségek és operátorok

A hullámfüggvénnyel leírt állapotú részecskének általában nincs határozott helye, impulzusa, impulzusmomentuma, energiája, kivéve azokat a speciális eseteket, amikor a hullámfüggvény az illető mennyiség operátorának sajátfüggvénye. A 3. fejezetben megismertünk néhány ilyen speciális esetet. Megtanultuk, hogy $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ egy \vec{r}_0 helyen lokalizált részecske hullámfüggvénye, amely az \vec{r} -rel való szorzás operátorának, a hely operátorának az \vec{r}_0 sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye. Hasonlóan, $\exp[(i/\hbar)\vec{p} \cdot \vec{r}]$ egy \vec{p} impulzusú részecske hullámfüggvénye, amely a $(\hbar/i)\vec{\nabla}$ operátorának, az impulzus operátorának a \vec{p} sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye.

Ez az általános szabály: minden megfigyelhető és megmérhető fizikai mennyiséghez² tartozik egy operátor, amelynek sajátfüggvényei azok a hullámfüggvények, amelyekben az illető mennyiségnek határozott értéke van; ez a határozott érték éppen az operátorának az adott sajátfüggvényhez tartozó sajátértéke.

A hullámfüggvény általában nem sajátfüggvénye valamilyen ismert fizikai mennyiség operátorának, de előállítható, mint bármelyik fizikai mennyiség sajátfüggvényeinek lineáris kombinációja. Matematikailag ilyen pl. egy függvény Fourier-sorba fejtése. Fizikailag, ahogy a következő pontban látni fogjuk, az ilyen előállítás szoros kapcsolatban van az illető mennyiség mérésével. Az alapvető fizikai mennyiségek operátorainak sajátfüggvényei teljes rendszert alkotnak, ami azt jelenti, hogy lineáris kombinációjukkal akármilyen cizellált hullámfüggvényt előállíthatunk. Ezzel a tulajdonsággal a 6.3 pontban fogunk közelebbről megismerkedni.

¹ A matematikai háttér két nagy magyar klasszikusa: Neumann János [9], valamint Riesz Frigyes és Szőkefalvi-Nagy Béla [10] könyvei mellé (vagy helyett) ajánlok egy mai, a kvantummechanikát aktívan művelő matematikus által írott tankönyvet is [12].

² A „megfigyelhető és megmérhető fizikai mennyiség” neve az angol nyelvű irodalomban egységesen *observable*. A magyar fizikai irodalomban eddig nem alakult ki egységes szóhasználat: egymás mellett léteznek a „mérhető mennyiség”, „fizikai mennyiség”, „megfigyelhető”, „obszervábilis” kifejezések, olvasóim más változatokat is ismerhetnek. Úgy tűnik, 2007-ben korai valamelyik mellett határozottan állást foglalni.

Ha két operátornak minden sajátfüggvénye közös, akkor a két operátor felcserélhető. Valóban, ha $\hat{A}\phi_n = a_n\phi_n$ és $\hat{B}\phi_n = b_n\phi_n$, akkor $(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\phi_n \equiv [\hat{A}, \hat{B}]\phi_n = 0$. Emiatt $[\hat{A}, \hat{B}]f(\vec{r}) = 0$, minden olyan függvényre, amely a sajátfüggvények lineáris kombinációjaként írható. Az előző bekezdésben említett teljesség miatt azonban ez minden függvényre teljesül, így \hat{A} és \hat{B} tényleg minden körülmények között felcserélhető: $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Igaz az ellenkező állítás is: ha az \hat{A} és \hat{B} operátorok felcserélhetőek és külön-külön teljes sajátfüggvényrendszerük van, akkor sajátfüggvényeik vagy közösek, vagy (elfajulás esetén) közös lineáris kombinációk választhatók belőlük. Ennek bizonyítása egy lehetnyit nehezebb az előzőnél. Legyen $\hat{A}\phi_n = a_n\phi_n$, akkor a felcserélhetőség miatt $\hat{A}\hat{B}\phi_n = \hat{B}\hat{A}\phi_n = a_n\hat{B}\phi_n$, vagyis $\hat{B}\phi_n$ is sajátfüggvénye \hat{A} -nak, ugyanazzal az a_n sajátértékkel, mint ϕ_n . Ha ez a sajátérték nem elfajult, akkor ebből következik, hogy a két sajátfüggvény arányos egymással: $\hat{B}\phi_n = \text{const} \cdot \phi_n \equiv b_n\phi_n$, ahol az utolsó lépésben nem történt más, mint hogy a konstans elneveztük b_n -nek. Ezzel viszont beláttuk, hogy ϕ_n sajátfüggvénye \hat{B} -nek is.³

Az elfajult esetben egy-két lépéssel még többet kell tenni: ϕ_n helyett egy \hat{A} -ban elfajult altér jelenik meg, amelyen \hat{B} -t diagonalizálni kell, így jutunk el a közös sajátfüggvényekhez. A részletek kidolgozását *gyakorlatként* az olvasóra hagyom.

Nem felcserélhető operátorokra ékesszóló példa a helyvektor és az impulzus esete, amelyek felcserélhetetlenségét a 3.3 pontban ismertük meg. Az elsőnek az egy pontra lokalizált delta-függvények, a másodiknak az egész térre kiterjedő síkhullámok a sajátfüggvényei; ezek annyira különbözőek, amennyire csak két dolog különbözhet egymástól.

A fizikai mennyiségekhez rendelt operátorok a kvantummechanika alapvető eszközei. Szerepük nem korlátozódik a sajátállapotok és sajátértékek kiválasztására. Bár a szuperpozíció elve miatt a kvantumállapotok általában nem sajátállapotai semmilyen fontos fizikai mennyiségnek, az operátorok ilyen esetben is teljes értékű matematikai kifejezései az illető mennyiségnek, a kvantumállapot dinamikájában éppen úgy, mint magának a mennyiségnek a mérésében. Ez utóbbi a kvantummechanikában különösen forró téma, amivel a következő pontban kezdünk ismerkedni.

³ Mark Kac, a 20. század egyik fizikában is aktív nagy matematikusa mondta: „belátni” azt jelenti, meggyőzni egy értelmes embert; „bebizonyítani” azt jelenti, meggyőzni egy makacs embert.

6.2. A mérés statisztikája

Egy speciális esetben már tudjuk, hogyan határozza meg a hullámfüggvény a mérés statisztikáját; ez a hely mérése. A részecske helyvektorát elegendően kisméretű detektorok rendszerével mérjük. Tudjuk, hogy egy részecskétől csak egyetlen detektor szólal meg; hogy melyik, az véletlen esemény. A megszólaló detektor helyvektora a helymérés eredménye. A 2.9 pontban megismert Born-szabály értelmében $|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ annak a valószínűsége, hogy a részecskét a detektor az \vec{r} hely körüli kicsiny d^3r térfogatban találja meg. Mivel a különböző helyen levő detektorok megszólalásai egymást kizáró események, a helyvektor átlagértékét közvetlen integrálással kapjuk meg:

$$\langle \vec{r} \rangle = \int \vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = \int \psi^* \hat{r} \psi d^3r, \quad (6.1)$$

ahol az utolsó lépésben kihasználtuk, hogy a hely operátora a helyvektorral való szorzás.

Hogyan érvényesül a véletlenszerűség statisztikája, ha valami más mennyiséget mérünk, például az impulzust? Mivel az impulzus a hullámvektor \hbar -szorosa, kézenfekvő mindenekelőtt az anyaghullámot egy optikai ráccsal hullámvektorok szerint felbontani. A rács a különböző hullámvektorú komponenseket – az impulzus operátorának sajátfüggvényeit – akárcsak egy optikai spektrométer a színeket, különböző irányba tereli, és ha eléggé eltávolodunk a rácstól, térben el is különíti őket.⁴ Ilyen távolságban zárjuk le minden komponens útját egy-egy detektorral; amelyik detektor megszólal, az annak a hullámvektornak megfelelő impulzus a mérés eredménye. Már csak azt kell meghatároznunk, mi a valószínűsége annak, hogy egy adott impulzusértéket mérünk?

A választ általánosabban, egy A fizikai mennyiség mérésére fogjuk megkeresni. Legyen az A -hoz tartozó kvantummechanikai operátor \hat{A} . Keressük meg sajátértékeit és normált sajátfüggvényeit:

$$\hat{A}\varphi_n(\vec{r}) = a_n\varphi_n(\vec{r}). \quad (6.2)$$

Az A -szeparáló eszköz úgy működik, hogy a különböző \hat{A} -sajátfüggvényeket más és más helyre tereli:

$$\varphi_n(\vec{r}) \Rightarrow \Phi_n(\vec{r}). \quad (6.3)$$

⁴ Emögött meghúzódik egy trükkös határátmenet: az impulzus sajátfüggvényei az egész teret kitélő síkhullámok, de őket véges szélességű nyalábokkal közelítjük; először elmegyünk olyan messze, hogy a komponensek jól szétváljanak, azután szélesítjük a nyalábot. Ez persze csak matematikában számít trükkösnek, kísérletben természetes.

A Φ_n függvények változatlanul normált hullámmódusok⁵, amelyek olyan távol kerülnek egymástól, hogy már ne legyen köztük átfedés. Amint ezt Neumann János megfogalmazta (róla nevezik ezt a stratégiát „von Neumann-mérésnek”), ehhez olyan erőhatást kell alkalmaznunk, amely az A mennyiségtől függ, pl. az impulzus mérése esetén egy optikai rácst, a mágneses momentum mérése esetén inhomogén mágneses mezőt (Stern–Gerlach kísérlet).⁶

A detektorokat úgy helyezzük el, hogy a térben elkülönített Φ_n hullámmódusok mindegyikét teljesen befogja egy-egy detektor. Ekkor, ha a detektálási rendszer ideálisan működik, és a szeparálás előtt a rendszerünk tiszta $\varphi_n(\vec{r})$ állapotban volt, az n -edik detektor biztosan (1 valószínűséggel) megszólal, a többi biztosan nem.

De a részecske kvantumállapota általában nem egyetlen sajátfüggvénynek felel meg, hanem ezekből épül fel az a hullámcsomag, amelyen A értékét szeretnénk megmérni. Mivel a szeparálás a lineáris Schrödinger-egyenlet szerint történik, közben a szuperpozíció súlyai változatlanok maradnak:

$$\psi(\vec{r}, t = 0) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r}) \Rightarrow \sum_n c_n \Phi_n(\vec{r}). \quad (6.4)$$

Ilyenkor, mivel a szétválasztott komponensek már nem interferálnak egymással, az 1 valószínűség a Born-szabálynak megfelelően megszorozódik $|c_n|^2$ -tel, vagyis annak valószínűsége, hogy éppen az a_n sajátértéket mérjük,

$$p_n = |c_n|^2. \quad (6.5)$$

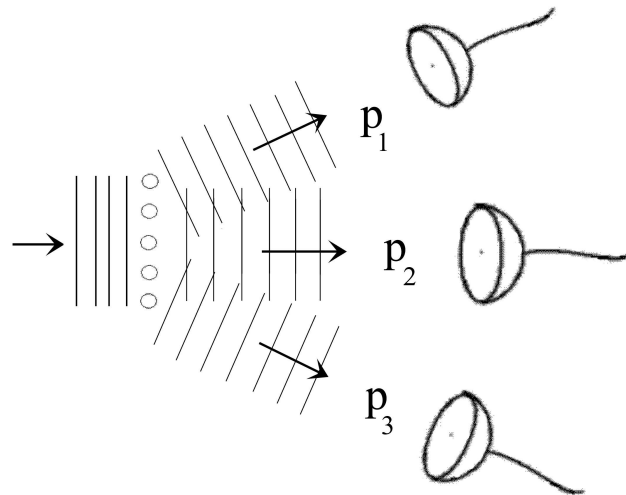
Ez a kvantummechanika egyik alapvető összefüggése, amit gyakran posztulátumként mondanak ki; itt azt láttuk be, hogy ez az eredmény a térbeli szétválasztás stratégiájából következik. A valószínűségek – megnyugtató módon – nem függnak a mérés technikai részleteitől, csak az eredeti hullámfüggvény állapotát jellemző c_n együtthatóktól.

A hullámfüggvény normálása a felbontás után tovább él: valahol biztosan megtaláljuk a részecskét, ezért

$$\sum_n p_n = \sum_n |c_n|^2 = 1, \quad (6.6)$$

⁵ A normálás megőrzését hívjuk a mozgás *unitaritásának*, aminek tartalmát még ebben a fejezetben megismerjük.

⁶ A közvetlen Neumann-séma nem mindig működik, pl. egy atom energiasajátfüggvényeit nem lehet térben elválasztani. Ilyenkor gyakran egy közvetítő kvantumrendszert, pl. egy szórt vagy éppen az atom által kisugárzott fotont csatolunk a megfigyelendő rendszerhez, és a közvetítőt tereljük állapotok szerint elkülönítve (spektroszkóp!) a detektorok rendszeréhez.



6.1. ábra. Neumann-mérés: a bejövő hullámcsomagból térben szétválasztjuk a mérendő mennyiség sajátfüggvényeit.

ami matematikailag a sajátfüggvények ortogonalitásából következik, lásd a következő pontban.

A (6.5) eredmény meghatározza az A fizikai mennyiség – más szóval: az \hat{A} operátor – mérési eredményeinek átlagát a $\psi = \sum_n c_n \phi_n$ állapotban:

$$\langle \hat{A} \rangle_{\psi} = \sum_n p_n a_n = \sum_n |c_n|^2 a_n. \quad (6.7)$$

A kapott kifejezést a következő pontban még tovább alakítjuk, mégpedig nem egyedi számítási trükkökkel, hanem a sajátfüggvények messzemutató, a fizikai tartalomba is mélyen bevilágító matematikai tulajdonságainak felhasználásával.

6.3. Az állapotok Hilbert-tere; teljesség; a kvantummechanikai átlag

Egy függvényt valamilyen függvényrendszer szerint kifejtteni olyan, mint egy vektort egységvektorok rendszere („bázis”) szerint kifejtteni. Mindkettőhöz szükség van egy alpműveletre: a *skalárszorzat* műveletére, amely két vektorhoz (ill. két függvényhez) egy számot rendel, hogy segítségével meg-

határozzuk meg a kifejtési együtthatókat. A számolás a legegyszerűbb akkor, ha az \vec{i} , \vec{j} , \vec{k} bázisvektorok *ortogonálisak*, azaz a különböző bázisvektorok skalárszorzata 0, és *normáltak*, azaz önmagukkal való skalárszorzatuk 1. A két tulajdonságot együtt úgy mondjuk, hogy a bázis *ortonormált*. Ilyenkor egy $\vec{a} = a_i \vec{i} + a_j \vec{j} + a_k \vec{k}$ alakú kifejtésben pl. az a_j együtthatót így kaphatjuk meg: $\vec{j} \cdot \vec{a} = a_i \vec{j} \cdot \vec{i} + a_j \vec{j} \cdot \vec{j} + a_k \vec{j} \cdot \vec{k} = a_i \times 0 + a_j \times 1 + a_k \times 0 = a_j$.

Hogyan definiálhatjuk a skalárszorzatot két függvényre? A megtalálási valószínűség normálása adhat útbaigazítást: egy egységvektor önmagával való skalárszorzatának az $\int |\psi|^2 d^3r = \int \psi^* \psi d^3r = 1$ összefüggés felelhet meg. Ezért definiáljuk két különböző komplex függvény, $f(\vec{r})$ és $g(\vec{r})$ skalárszorzatát így:

$$\langle f|g \rangle = \langle g|f \rangle^* = \int f^*(\vec{r})g(\vec{r})d^3r. \quad (6.8)$$

Könnyű ellenőrizni, hogy ez a definíció megfelel a skalárszorzat ismert matematikai tulajdonságainak. Hogy ezenkívül még a fizikában hasznos is, azt a fizikai mennyiségekhez rendelt operátorok egy nevezetes tulajdonsága: az önadjungáltság biztosítja, amelyre hamarosan visszatérünk.

A fenti definícióval bevezettük a hullámfüggvénnyel jellemezhető kvantumállapotok *Hilbert-terét*. A Hilbert-tér szemléletes és hatékony matematikai szerkezete arra való, hogy geometriai fogalmakkal – vektorok összeadása, hossza, ortogonalitása – írjuk le olyan elemek halmazát – itt: egy fizikai rendszer kvantumállapotainak összességét –, amelyek között két művelet definiálható: 1. lineáris kombináció, 2. skalárszorzat. Az első, lineáris műveletet a kvantumfizikában a szuperpozíció elve biztosítja, a másodikat a valószínűségekre vonatkozó kvadrátikus Born-szabály, valamint a sajátfüggvények szerinti felbontás számos megjelenése.

Az $\int |\psi|^2 d^3r$ normálási integrál konvergenciáját már többször említettük, mint az energiasajátfüggvényeket kiválasztó határfeltételt. Ez a feltétel általában belekerül a Hilbert-tér definíciójába; úgy szoktuk mondani, hogy a Hilbert-teret *négyzetesen integrálható* függvények alkotják („ \mathcal{L}^2 függvényosztály”). Fontos hangsúlyozni, hogy a függvények kifejtésére szolgáló bázisfüggvények sokszor *nem* tartoznak az \mathcal{L}^2 függvényosztályba, ilyenkor azonban az ő ortonormálási és teljességi tulajdonságaikat nem a (6.8) skalárszorzat szerint kell biztosítani. Ezzel a 6.5 pontban részletesen foglalkozunk.

A (6.8) egyenlet jobboldala a skalárszorzat definíciója, de koncentráljunk most a baloldalra, ahol – egy fontos szimmetriatulajdonság kimondása mellett, mintegy ráadásul – bevezettük Dirac híres „bra-ket” jelölését. Ebben az a nagy lelemény, hogy a skalárszorzat szétszedhető: ha azt akarjuk hangsúlyozni, hogy a $g(\vec{r})$ függvényt a Hilbert-tér vektorának tekintjük, akkor

jelölése $|g\rangle$; ha egy skalárszorzat első tényezőjeként egy $f^*(\vec{r})$ függvény jelenik meg, akkor ő az „adjungált tér vektorának” tekinthető és vektorjelölése $\langle f|$. Végül ha elvégezzük a skalárszorzást, annak jelöléseként a két szimbólumot összetoljuk, így keletkezik az $\langle f|g\rangle$ jelölés. Külön említést érdemel Dirac angol nyelvi leleménye: a skalárszorzattal együtt a *bracket* (zárójel) szót is kettéhasítja, így lesz az $\langle f|$ típusú adjungált vektorok neve *bra vektor*, a $|g\rangle$ típusú vektoroké *ket vektor*. Egy fizikai rendszer minden lehetséges kvantumállapotát egy ket vektor írja le; bra vektorok csak a skalárszorzatban jelennek meg. Minden $|a\rangle$ ket vektornak van egy adjungált $\langle a|$ bra megfelelője; az $\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle$ ketnek az $\alpha^*\langle a| + \beta^*\langle b|$ bra az adjungáltja.

A Dirac-féle vektorjelölés azt akarja hangsúlyozni, hogy a kvantumállapot fizikai tartalma független attól, hogy milyen „koordinátarendszerben” írom le: a helyvektor függvényeként reprezentálom, vagy egy impulzus-sajátfüggvények szerinti kifejtés Fourier-együtthatóival, esetleg valami más bázisfüggvények szerint kifejtve. Ennek megfelelően a „bra” vagy „ket” belsőjébe csak egy indexet, vagy más, a kvantumállapotot azonosító minimális jelölést szoktunk írni.

Legyen $|n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots$) a vektorjelölése egy $u_n(\vec{r})$ hullámfüggvényekből álló ortonormált bázisnak:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \quad (6.9)$$

és fejtük ki a $\psi(\vec{r}, t)$ hullámfüggvénynek megfelelő $|\psi(t)\rangle$ kvantumállapotot a bázisvektorok szerint:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle, \quad (6.10)$$

amit az $\langle m|$ bra-vektorral balról skalárszorozva és kihasználva a bázisvektorok ortonormáltságát, megkapjuk a kifejtés együtthatóit:

$$c_m(t) = \langle m|\psi(t)\rangle \quad \left(\equiv \int u_m^*(\vec{r})\psi(\vec{r}, t)d^3r \right). \quad (6.11)$$

Ezt visszahelyettesítve a (6.10) kifejtésbe és az együttható elé írva az $|n\rangle$ ket-vektort, ezt kapjuk:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle. \quad (6.12)$$

Vegyük észre, hogy a baloldalon is, a jobboldal jobbszélén is ugyanaz a $|\psi(t)\rangle$ állapotvektor áll, tehát ami közben vele történik, az maga az egységoperátor:

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}. \quad (6.13)$$

Ebben van egy dolog, ami nagyon nem triviális: az, hogy az $|n\rangle$ bázisvektorok (az $u_n(\vec{r})$ bázisfüggvények) *elegen* vannak ahhoz, hogy akármilyen ψ állapot minden részletét össze lehessen rakni belőlük. Ha ez a fontos követelmény teljesül, akkor azt mondjuk, hogy az $|n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots$) ortonormált bázis *teljes*, és az ezt kifejező (6.13) egyenlet neve *teljességi reláció*.⁷

A Dirac-jelölésről térjünk vissza egy pillanatra a hullámfüggvényekhez! Mi felel meg ekkor a teljességi relációnak? Írjuk ki a hullámfüggvény kifejtését egy teljes ortonormált függvényrendszer szerint, használva a skalárszorzat definícióját:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n u_n(\vec{r}) \int u_n^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}', t) d^3 r'. \quad (6.14)$$

Ebből leolvashatjuk a hullámfüggvények teljességi relációját:

$$\sum_n u_n(\vec{r}) u_n^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (6.15)$$

ami összhangban van a (6.13) egyenlettel, hiszen a Dirac-féle deltafüggvény az integráloperátorként írt egységoperátor magfüggvénye.

A (6.13) összeg egyes $|n\rangle\langle n|$ tagjainak van egy fontos és szemléletes geometriai jelentése: ezek az $|n\rangle$ bázisvektorokra vetítő *projekciós operátorok* (röviden: projektorok). Általában a $|\psi\rangle\langle\psi|$ operátor úgy hat a tőle jobbra álló ket vektorra, hogy először skalárszorozza $\langle\psi|$ -vel, ezáltal leolvassa a $|\psi\rangle$ egységvektorra való vetület hosszát, majd ezzel a számmal megszorozva ugyanezt az egységvektort, előállítja a vetületet.

Abban a fontos esetben, amikor az $|n\rangle$ teljes ortonormált rendszer elemei egy A fizikai mennyiség \hat{A} operátorának sajátvektorai, és az $|n\rangle$ sajátvektorhoz az a_n sajátértékek tartozik, az \hat{A} operátor így hat a (6.12) állapotra:

$$\hat{A} |\psi(t)\rangle = \hat{A} \sum_n |n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n |n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle \equiv \sum_n |n\rangle a_n \langle n|\psi(t)\rangle, \quad (6.16)$$

emiatt magát az \hat{A} operátort szimbolikusan így írhatjuk (az operátor *egységfelbontása*):

$$\hat{A} = \sum_n |n\rangle a_n \langle n|. \quad (6.17)$$

⁷ Ennek közismert alappéldája az impulzus sajátfüggvényei szerinti kifejtés – leánykori nevén: Fourier-sor – teljessége, amely azon múlik, hogy a periodikus határfeltételeket kielégítő trigonometriai ill. komplex-exponenciális függvények sora tetszőlegesen rövid hullámhosszakat tartalmaz, így tetszőlegesen finom részletek kirazolására is képes. A kifejtés gyors konvergenciájára nincs automatikus garancia.

Használjuk fel ezt az eredményt arra, hogy végleges alakba hozzuk az operátor átlagértékének (a véletlen eredményeket adó mérések statisztikai középértékének) (6.7) kifejezését:

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_n |c_n|^2 a_n = \sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle a_n = \langle \psi | \sum_n | n \rangle a_n \langle n | \psi \rangle, \quad (6.18)$$

vagyis

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (6.19)$$

Ez az az alapvető átlagolási formula, amelyre a kvantummechanika legtöbb alkalmazása épül. Egy irányban ez még általánosítható: amikor az átlagot tovább átlagoljuk, különböző kvantumállapotok statisztikai sokaságára. Ezt az általánosítást a 6.5 pontban ismerjük meg.

6.4. Önadjungált operátorok

A mérhető fizikai mennyiségeket a kvantummechanika általában a klasszikus fizikától örökölte;⁸ mért értékeik értelemszerűen valós számok.

Hogy a megfelelő operátorok sajátértékei valósak legyenek, azt az *önadjungált*ság tulajdonsága biztosítja, amelynek messzemenő további következményei vannak. Megértéséhez meg kell ismernünk az *adjungált operátor* fogalmát.

A fogalom megértéséhez vezessük be az $\hat{A} | u \rangle =: | \hat{A} u \rangle$ jelölést, és legyen ennek a vektornak az adjungáltja $\langle \hat{A} u |$. Ezekkel a jelölésekkel élve, az \hat{A} operátor \hat{A}^\dagger adjungáltjának azt az operátort nevezzük, amely tetszőleges $\langle u |$ és $| v \rangle$ vektorokkal kielégíti az

$$\langle \hat{A}^\dagger u | v \rangle = \langle u | \hat{A} v \rangle \quad (6.20)$$

egyenletet. *Önadjungált* vagy – Hermite francia matematikus nevéből képzett szóval – *hermitikus* az \hat{A} operátor, ha

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}. \quad (6.21)$$

Hogy az önadjungált operátor sajátértékei valósak, azt közvetlenül beláthatjuk a (6.8) egyenletben megismert szimmetriatulajdonság felhasználásával: legyen $\hat{A} | n \rangle = a_n | n \rangle$, akkor

$$a_n = \langle n | \hat{A} | n \rangle = \langle \hat{A} | n | n \rangle^* = \langle n | \hat{A} | n \rangle^* = a_n^*, \quad (6.22)$$

⁸ Nem mindegyiket: van, amelyik a valószínűségszámítás felől érkezett; ilyen pl. a szórási folyamatok hatáskeresztmetszete. Ilyenkor a valós értéket nem egy operátor önadjungálttsága, hanem a Born-szabály biztosítja.

vagyis a_n tényleg valós.

Egy másik fontos tulajdonsága az önadjungált operátoroknak, hogy különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvényei ortogonálisak. Valóban, ha $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$ és $\hat{A}|m\rangle = a_m|m\rangle$, akkor

$$\begin{aligned}\langle m|\hat{A}|n\rangle &= a_n\langle m|n\rangle \\ &= \langle \hat{A}|m\rangle|n\rangle = a_m\langle m|n\rangle,\end{aligned}\quad (6.23)$$

ahonnan következik

$$(a_m - a_n)\langle m|n\rangle = 0, \quad (6.24)$$

vagyis vagy $a_m = a_n$ teljesül, vagy az ortogonalitás: $\langle m|n\rangle = 0$.

Lássuk még be, hogy az eddig megismert operátorok tényleg önadjungáltak. A helykoordinátával való szorzásra az önadjungáltság triviálisan teljesül; belátnivalónk csak az impulzus operátoránál marad: az egyszerűség kedvéért egy dimenzióban maradva, teljesül-e

$$\int u^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} v(x) \right) dx = \int \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} u(x) \right)^* v(x) dx? \quad (6.25)$$

A válasz az, hogy igen, a két oldal egy parciális integrálással átmegy egymásba, feltéve, hogy a távoli határokon az $u(x)$ és $v(x)$ függvények eltűnnek, vagy pedig ciklikus határfeltételt elégítenek ki. Mindkét eset előfordul a kvantummechanika alkalmazásaiban.

6.5. Operátorok és mátrixok; unitér transzformációk

Egy \hat{A} operátorról mindent megtudunk, ha megismerjük egy tetszőleges $|\psi\rangle$ állapotra gyakorolt hatását. Kövessük azt a stratégiát, hogy a (6.10) és (6.11) formulák segítségével fejtsük ki egy $|n\rangle$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) ortonormált bázis szerint mind a kiinduló $|\psi\rangle$ -t, mind az ebből az \hat{A} operátor hatására létrejött $\hat{A}|\psi\rangle$ vektort. Ez a művelet úgy is leírható, hogy az \hat{A} operátor elé is, mögé is beírjuk a (6.13) formula szerinti egységoperátort:

$$\begin{aligned}\hat{A}|\psi\rangle &= \sum_m b_m |m\rangle = \sum_m |m\rangle b_m \\ &= \sum_m |m\rangle \langle m|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_m \sum_n |m\rangle \langle m|\hat{A}|n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_m |m\rangle \sum_n A_{mn} c_n,\end{aligned}\quad (6.26)$$

ahol bevezettük az \hat{A} operátor $\langle m|\hat{A}|n\rangle \equiv A_{mn}$ mátrixelemét. A leolvasható végeredmény:

$$b_m = \sum_n A_{mn} c_n, \quad (6.27)$$

vagyis a Hilbert-térbeli $|n\rangle$ bázison a $|\psi\rangle$ ket-vektort ábrázoló c_n együttható-vektorból az $\hat{A}|\psi\rangle$ -t ábrázoló b_m együttható-vektort az A_{mn} mátrixszal való szorzással kaphatjuk meg. Jegyezzük meg, hogy egy önadjungált (hermitikus) operátor mátrixelemei rendelkeznek az

$$A_{nm} = A_{mn}^* \quad (6.28)$$

szimmetriatulajdonsággal.⁹ Egy másféle felépítésben ezt a tulajdonságot is tekinthetjük az önadjungáltság definíciójának.

Első gyakorlatként írjuk át az időtől függő Schrödinger-egyenletet mátrixalakba:

$$\partial_t |\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \sum_n c_n(t) |n\rangle, \quad (6.29)$$

amit balról skalárszorozva az $\langle m|$ bra-vektorral, kapjuk a keresett mátrixos Schrödinger-egyenletet:

$$\dot{c}_m = -\frac{i}{\hbar} \sum_n H_{mn} c_n. \quad (6.30)$$

Mindjárt írjuk fel az adjungált időfüggő Schrödinger-egyenletet is:

$$\dot{c}_m^* = \frac{i}{\hbar} \sum_n H_{mn}^* c_n^* = \frac{i}{\hbar} \sum_n c_n^* H_{nm}, \quad (6.31)$$

ami talán kevésbé elegáns bizonyítása annak a sokszor használt összefüggésnek, hogy

$$\partial_t \langle \psi| = \frac{i}{\hbar} \langle \psi| \hat{H}. \quad (6.32)$$

Az operátorok mátrix-ábrázolása roppant hajlékony matematikai lehetőséget teremt arra, hogy az adott problémához legjobban illeszkedő bázison kiszámított mátrixelemeket használva, a lineáris algebra eszközeivel jussunk el kvantummechanikai feladatok megoldásához. Ez mindenekelőtt azt a lehetőséget jelenti, hogy a Schrödinger-féle energiasajátérték-egyenletet az eredeti parciális differenciálegyenlet peremértékproblémája helyett egy mátrix sajátértékproblémájának megoldására vezessük vissza. Természetesen ezzel a differenciálegyenlet határfeltételeiben rejlő fizikai információt nem nyelhetjük le: ez az információ a bázisfüggvények kiválasztásán keresztül

⁹ A bizonyítás triviális: $\langle n|\hat{A}|m\rangle = \langle \hat{A}|n|m\rangle = \langle m|\hat{A}|n\rangle^*$.

épül bele a mátrixelemekbe.¹⁰ Az algebrai módszerben a fel nem cserélhető mátrixok – pl. a koordináta és impulzus operátorainak megfelelő mátrixok – ismert kommutátoraiából egyenleteket kaphatunk a mátrixelemek meghatározására. Ennek példáit a következőkben többször fogjuk látni (harmonikus oszcillátor, impulzusmomentum).

A Hilbert-tér bevezetésekor már hangsúlyoztuk, hogy az állapotvektorok és operátorok jelentése független attól, milyen módon ábrázoljuk őket, vagyis milyen bázisvektorok szerint fejtjük ki. Ennek megfelelően a kvantummechanika egyik alpművelete a *bázisváltás*, vagyis áttérés egyik bázisról a másikra. Végezzük el ezt a műveletet a fenti vektorokkal és mátrixokkal, és térjünk át a kiinduló $|n\rangle$ bázisról egy különböző, $|\alpha\rangle$ teljes ortonormált bázisra, vagyis keressük meg a

$$|\psi\rangle = \sum_m c_m |m\rangle = \sum_\alpha d_\alpha |\alpha\rangle \quad (6.33)$$

felbontás d_α együtthatóit!

A számolás most is az egységfelbontás beszúrásával történik:

$$d_\alpha = \langle \alpha | \psi \rangle = \sum_m \langle \alpha | m \rangle \langle m | \psi \rangle = \sum_m U_{\alpha m} c_m, \quad (6.34)$$

ahol bevezettük az

$$U_{\alpha m} := \langle \alpha | m \rangle \quad (6.35)$$

transzformációs mátrixot.

Mi történik ilyenkor a mérhető fizikai mennyiségeknek megfelelő operátorok mátrixaival? Természetesen ők is transzformálódnak a bázisváltáskor:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle &= \sum_{m,n} \langle \alpha | m \rangle \langle m | \hat{A} | n \rangle \langle n | \beta \rangle \\ &= \sum_{m,n} U_{\alpha m} A_{mn} (U^{-1})_{n\beta} = \left(\underline{\underline{U}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{U}}^{-1} \right)_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (6.36)$$

ahol kihasználtuk, hogy $\langle n | \beta \rangle$ az „új” $|\beta\rangle$ bázisból az „eredeti” $|n\rangle$ bázisba visszavezető U^{-1} inverz transzformáció mátrixeleme.

¹⁰ Azt, hogy egy kvantummechanikai feladatot mátrixalgebrai eszközökkel is meg lehet oldani, Heisenberg fedezte fel, még a Schrödinger-egyenlet megalkotása előtt, ma már hihetetlennek tűnő absztrakt gondolatmenettel. Heisenberget nagyon meglepte, hogy Schrödinger hullámegyenletén keresztül egy szemléletesebb út is elvezet az ő mátrixaihoz. A reprezentációktól elszakadó, absztrakt, de geometriájában mégis szemléletes Hilbert-tér nyelvezetének kimunkálásában Dirac és Neumann János szerzett elévülhetetlen érdemeket. Ebből a nézőpontból Schrödinger legnagyobb hozzájárulása az volt, hogy behozta a történetbe a kvantumállapotot: a vektort, amelyre az operátorok/mátrixok hatnak.

Az U mátrixnak van egy különleges matematikai tulajdonsága: ez *unitér* mátrix, vagyis az inverze megegyezik az adjungáltjával: $U^\dagger U = \mathbb{1}$. Ez abból látszik, hogy

$$(U^{-1})_{m\alpha} = \langle m|\alpha\rangle = \langle \alpha|m\rangle^* = (U_{\alpha m})^*. \quad (6.37)$$

Ez nem holmi matematikai véletlen! Az unitaritás szükséges és elégséges feltétele annak, hogy a bázisváltás, vagy bármi más lineáris operátorral leírt transzformáció, ne változtassa meg a kvantumállapot normálását. Valóban, visszatérve mátrixokról a bázisfüggetlen operátorok jelölésére, ha teljesül az

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \mathbb{1} \quad (6.38)$$

unitaritási feltétel, akkor a transzformált

$$|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle \quad (6.39)$$

állapotvektor normája

$$\langle \hat{U} \psi | \hat{U} \psi \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (6.40)$$

Ezért aztán unitér operátorok a bázisváltó mátrixokon kívül is nagyon gyakran és sokféle szerepkörben fordulnak elő a kvantummechanikában. Mindenekelőtt, ha nem a Hilbert-térben, hanem a valós, háromdimenziós térben változtatjuk koordináta-rendszerünket, nézőpontunkat, azzal a fizikai jelenségek nem változnak, de a hullámfüggvények és operátorok matematikai alakja igen. Ettől azonban a hullámfüggvények normálása nem változhat, így ha valami mégis változik, az csak unitér transzformációval történhet, amelynek során az operátorok az $\hat{U} \hat{A} |\psi\rangle = (\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger) |\psi'\rangle$ azonosságból leolvasható

$$\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger \quad (6.41)$$

szabály szerint transzformálódnak. Amint a következő fejezetekben többször fogjuk látni, ez kényelmes matematikai eszközt jelent a *szimmetriák* kezelésére.

Külön, rendkívül fontos téma az állapotvektor időbeli fejlődése. Mivel ennek során a teljes valószínűség megmarad (gondoljunk a kontinuitás-egyenletre), az időfejlődést is unitér operátor írja le. Ezzel is gyakran találkozunk a következőkben.

6.6. Folytonos mátrixok; koordináta- és impulzus-reprezentáció

Amint már említettük, a folytonos spektrumú koordinátaoperátor sajátfüggvényei, a $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ függvények nem normálhatók, de teljesek, hiszen összegezve (integrálva) az \vec{r}_0 sajátértékek spektrumára, kielégítik a (6.15) teljeségi relációt:

$$\int \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0) d^3 r_0 = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (6.42)$$

amit könnyű ellenőrizni, csak egy $f(\vec{r}')$ függvényre vett hatását kell kiszámolnunk. Mivel a Dirac-féle deltafüggvény valós, a fenti egyenlet kerül az ortonormálási reláció helyébe is.

A $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ hullámfüggvénynek az állapotvektorok Dirac-jelölése szerint $|\vec{r}_0\rangle$ felel meg, és az állapotvektor folytonos kifejtése ezek szerint a koordináta-sajátvektorok szerint

$$|\psi(t)\rangle = \int C(\vec{r}_0, t) |\vec{r}_0\rangle d^3 r_0, \quad (6.43)$$

ahol a kifejtési együttható

$$C(\vec{r}_0, t) = \langle \vec{r}_0 | \psi(t) \rangle = \int \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \psi(\vec{r}, t) d^3 r = \psi(\vec{r}_0, t), \quad (6.44)$$

vagyis amit eddig „hullámfüggvény” néven ismertünk, az a Hilbert-tér nyelvén az állapotvektor kifejtési együtthatóinak folytonos vektora, a koordináta sajátvektorainak bázisán!

Térjünk át a folytonos spektrumú operátorok másik nevezetes példájára: az impulzusra, amelynek értékei korlátatlan mozgás esetén¹¹ folytonosan változhatnak. Ilyenkor az impulzus-sajátfüggvények szerinti kifejtés Fourier-sor helyett Fourier-integrál lesz, amelynek alapvető formulája

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx = 2\pi \delta(k), \quad (6.45)$$

ahol $d > 1$ dimenzióban a kitevőben skalárszorzatot, a jobboldalon $(2\pi)^d$ szorzót kell írni. Ebből kiindulva megkaphatjuk a $|\vec{p}\rangle$ impulzus-sajátállapotoknak megfelelő impulzus-sajátfüggvények teljes rendszerét. Keressük

¹¹ Ennek alternatívája az a szokásos leírásmód, amelyben a hullámfüggvényre egy elképzelt, elég nagy (az adott folyamatot nem akadályozó) doboz peremén ciklikus határfeltételeket rovunk ki; ilyenkor az impulzusnak nem folytonos, hanem sűrű diszkrét spektruma van.

őket $C \exp[(i/\hbar)\vec{p} \cdot \vec{r}]$ alakban, és a C normálási együtthatót határozzuk meg abból a feltételből, hogy teljesüljön a folytonos spektrumra vonatkozó

$$\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = \int \langle \vec{p}' | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle d^3 r = \int C^* C e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}} d^3 r = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad (6.46)$$

normálási összefüggés, amely – hasonlóan a helyvektor-sajátfüggvényekre vonatkozó (6.42) egyenlethez – egyben a teljességi reláció szerepét is betölti. Felhasználva a (6.45) formulát és még a $\delta(ay) = \delta(y)/|a|$ tulajdonságot is, C -t valósnak választva, az eredmény:

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p} \cdot \vec{r}} \quad (6.47)$$

(a normálási faktor kitevője d dimenzióban $-d/2$).

A (6.43) és (6.44) egyenletek mintájára, a kvantumállapotot impulzus-sajátvektorok szerint is kifejtethetjük:

$$|\psi(t)\rangle = \int \phi(\vec{p}, t) |\vec{p}\rangle d^3 p, \quad (6.48)$$

ahol a

$$\begin{aligned} \phi(\vec{p}, t) &= \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle \\ &= \int \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle d^3 r = \int \frac{e^{-(i/\hbar)\vec{p} \cdot \vec{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\vec{r}, t) d^3 r \end{aligned} \quad (6.49)$$

együttható az *impulzus-reprezentációbeli hullámfüggvény*.

Az utóbbi egyenletet, amely természetesen egy megfelelő fizikai együtthatókkal feldíszített Fourier-integrál, úgy tekinthetjük, mint a koordináta-reprezentációból ($\psi(\vec{r}, t)$) az impulzusreprezentációba ($\phi(\vec{p}, t)$) való áttérés titkos formuláját. A (6.48), (6.47) egyenleteket felhasználva könnyű felírni a visszavezető út formuláját is:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle \\ &= \int \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle d^3 p = \int \frac{e^{(i/\hbar)\vec{p} \cdot \vec{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \phi(\vec{p}, t) d^3 p. \end{aligned} \quad (6.50)$$

Gyakorlatként használjuk fel ezt az eredményt arra, hogy találjuk ki a helyvektor operátorának az impulzusreprezentációban használható alakját:¹²

$$\begin{aligned}\hat{r} \psi(\vec{r}, t) &= \int \vec{r} \frac{e^{(i/\hbar)\vec{p}\cdot\vec{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \phi(\vec{p}, t) d^3 p \\ &= \int \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \frac{e^{(i/\hbar)\vec{p}\cdot\vec{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] \phi(\vec{p}, t) d^3 p \\ &= \int \frac{e^{(i/\hbar)\vec{p}\cdot\vec{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \phi(\vec{p}, t) \right] d^3 p,\end{aligned}\quad (6.51)$$

ahonnan leolvashatjuk, hogy az impulzusreprezentációban a helyvektor operátorának az

$$\hat{r} \Rightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \quad (6.52)$$

művelet felel meg. Természetesen akár koordináta-, akár impulzusreprezentációban számolunk, mindenképpen teljesül a $[\hat{p}, \hat{r}] = \hbar/i$ felcserélési reláció, ahogy annak lennie kell.

6.7. Sűrűségmátrix és Wigner-függvény

A mátrix formalizmus nagyjelentőségű alkalmazását jelenti a kvantummechanikai átlagolás formulájának nevezetes átalakítása. Használjuk a $|\psi\rangle = \sum_m c_m |m\rangle$, $\langle\psi| = \sum_n c_n^* \langle n|$ felbontást; ekkor a (6.19) formulát így írhatjuk át:

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi = \sum_m \sum_n c_n^* \langle n|\hat{A}|m\rangle c_m = \sum_m \sum_n \rho_{mn} A_{nm} = Tr(\hat{\rho}\hat{A}), \quad (6.53)$$

ahol bevezettük a

$$\rho_{mn} = c_m c_n^* \quad (6.54)$$

mátrixelemekkel rendelkező *sűrűségmátrixot* és a neki megfelelő

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (6.55)$$

sűrűségoperátort (pongyolán ezt is inkább sűrűségmátrixnak szokták nevezni), amely a $|\psi\rangle$ állapotra vetítő projekciós operátor. Jegyezzük meg koordinátareprezentációban érvényes, folytonos mátrix alakját is:

$$\rho(x, x') = \langle x|\psi\rangle\langle\psi|x'\rangle = \psi(x)\psi^*(x'). \quad (6.56)$$

¹² Az utolsó lépésben parciális integrálást hajtunk végre.

Az időfüggő Schrödinger-egyenletből könnyű meghatározni a sűrűségoperátor mozgásegyenletét:

$$\dot{\hat{\rho}} = |\dot{\psi}\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\dot{\psi}| = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi\rangle\langle\psi| + \frac{i}{\hbar}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{H}, \quad (6.57)$$

vagyis

$$\dot{\hat{\rho}} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (6.58)$$

A sűrűségmátrix fogalmát Landau és Neumann János vezette be egymástól függetlenül; a (6.58) mozgásegyenlet Neumann Jánostól származik, és *von Neumann-egyenletnek* nevezik. A sűrűségmátrixban az a nagy felfedezés, hogy a kvantummechanikai átlagban megjelenő $|\psi\rangle$ és $\langle\psi|$ faktorokat egyetlen objektumba foglalja össze, amelyet nem csak egyetlen $|\psi\rangle$ *tiszta állapot* esetén lehet használni, hanem együtt lehet átlagolni különböző kvantumállapotú rendszerek sokaságára is (*kevert állapot*). Mivel a Neumann-egyenlet lineáris, változatlan alakban „túléli” ezt a műveletet.

Ilyenkor is érvényes marad a (6.53) levezetésből megismert

$$\langle\hat{A}\rangle_{\psi} = Tr(\hat{\rho}\hat{A}), \quad (6.59)$$

alapvető összefüggés, csak ez most általában kétszeres átlagolás egymásutánját fejezi ki: egy mérhető fizikai mennyiség kvantummechanikai átlagolása egy adott kvantumállapotban, majd második átlagolás különböző kvantumállapotok sokaságára.

Ez a sokaság, akár csak a statisztikus fizikában, Gibbs nyomán elképzelhető úgy, mintha a kvantumrendszer rengeteg példányban lenne előttünk, várva, hogy rajta a mérést elvégezzük, de jelentheti egyetlen kvantumrendszeren sokszor, azonos kezdeti preparálás után elvégzett mérések sokaságát is. Statisztikus fizikában a kettő egyenértékűségét *ergodicitásnak* mondjuk. A kvantummechanikában pár évtizeddel ezelőtt még mindenki a Gibbs-féle sok példányt érezte a jó elképzelésnek, mondván, hogy az atomok mindig sokan vannak; mára a kérdés külön ízt kapott attól, hogy ion- és atomcsapdákban (lásd a B. függelék) egyes ionokat ill. atomokat lehet hosszú ideig megőrizni, és rajtuk sokszor megismételt kísérleteket végezni.

A hullámfüggvény normálása a sűrűségmátrix nyelvén elmondva

$$Tr \hat{\rho} = 1, \quad (6.60)$$

vagyis az egységoperátor átlaga 1. Ez változatlan marad kevert állapotra (sokaságra) is.

Ezzel azonban a keverésre érzéketlen tulajdonságoknak végére is értünk. Mivel a tiszta állapotra vonatkozó (6.55) kifejezés projektort ír le, tiszta állapotban az is teljesül, hogy

$$\text{Tr } \hat{\rho}^2 = 1. \quad (6.61)$$

Ha viszont a sűrűségoperátort különböző állapotokra átlagoljuk, az utóbbi összefüggés már nem igaz: kevert állapotra általában

$$\text{Tr } \hat{\rho}^2 \leq 1. \quad (6.62)$$

Van még egy, kevésbé előrelátható, de roppant jelentőségű megjelenési formája is a sűrűségmátrixnak: leírja az olyan szituációkat is, amelyekben egy nagyobb környezethez – Feynman kifejezésével élve: „a világ többi részéhez” (*the rest of the world*) – csatolt részrendszer dinamikáját akarjuk követni. Az alapjelenség a részrendszer kvantummechanikai interferenciaképességének – koherenciájának – fokozatos elmosódása a környezethez való csatolódás, vagy ami szinte ugyanaz, a környezetből eredő zaj hatása. Ilyenkor is a kevert állapotra jellemző sűrűségmátrix alakul ki. A részletekkel a 15. fejezetben fogunk megismerkedni. Fontos azonban megjegyezni, hogy a keverék-sűrűségmátrix matematikai alakján semmi módon nem látszik meg, hogy átlagolással vagy környezeti hatások beszámításával jött létre: ez inkább teljesen új tulajdonságokat hordozó „vegyület”, mint az összetevőket őrző „keverék”; nincs az a kvantum-Hamupipőke, aki szétválogassa.

Térjünk vissza a direkt alkalmazásokhoz, használjuk a (6.56) koordináta-reprezentációt, és átlagoljuk a sokaságban w_i valószínűséggel előforduló ψ_i állapotok sokaságára:

$$\sum_i w_i \langle \vec{x} | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \vec{x}' \rangle = \sum_i w_i \psi_i(\vec{x}) \psi_i^*(\vec{x}') := \rho(\vec{x}, \vec{x}'). \quad (6.63)$$

Ennek a mennyiségnek messzire mutató, fontos átalakításával jutunk el a *Wigner-függvény* fogalmához, amely a sűrűségmátrix egy sajátos reprezentációja. Wigner Jenő ötlete az volt, hogy a (6.63) mennyiség egyszerre tapogattja le egy hullámcsomag helyét és – különböző \vec{x} , \vec{x}' helyek összehasonlításával – impulzusát, de hogy az utóbbit kézzelfoghatóvá tegyük, az impulzust egy Fourier-transzformációval le kell olvasni. Ezért bevezette az azóta Wigner-függvénynek nevezett mennyiséget:

$$f_W(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \rho\left(\vec{x} + \frac{\vec{\eta}}{2}, \vec{x} - \frac{\vec{\eta}}{2}\right) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\eta}} d^d \eta \quad (6.64)$$

(a "d" kitevő a dimenziószámot jelenti).

A Wigner-függvény a klasszikushoz közeli kvantummechanikai mozgások leírásának érzékeny és szemléletes eszköze; valós függvény,¹³ amely a formális $\hbar \rightarrow 0$ határátmenettel át megy a klasszikus fázistérbeli $f(\vec{x}, \vec{p})$ eloszlásfüggvénybe. Könnyű belátni, hogy *integráljai* már a határátmenet nélkül is a megfelelő eloszlásfüggvényt szolgáltatják. Az egyszerűbbel kezdjük: impulzus szerint kiintegrálva, és felhasználva a

$$(2\pi\hbar)^{-d} \int \exp[-(i/\hbar)\vec{p} \cdot \vec{\eta}] d^d p = \delta(\vec{\eta}) \quad (6.65)$$

összefüggést, kapjuk:

$$\int f_W(\vec{x}, \vec{p}) d^d p = \rho(\vec{x}, \vec{x}) = \sum_i w_i |\psi_i(\vec{r})|^2 = P(\vec{x}), \quad (6.66)$$

ami a hely szerinti eloszlásfüggvény.

A fordított eset bizonyítása hosszadalmasabb; számoljuk ezt ki egy dimenzióra, és vezessük be az $y_{\pm} = x \pm \eta/2$ jelölést. Ezzel, a Wigner-függvényt a helykoordináta szerint integrálva, ezt kapjuk:

$$\int f_W(x, p) dx = \sum_i w_i (2\pi\hbar)^{-1} \int \int \psi_i(y_+) \psi_i^*(y_-) e^{-\frac{i}{\hbar}py_+} e^{\frac{i}{\hbar}py_-} d\eta dx. \quad (6.67)$$

Most térjünk át az y_+ , y_- integrációs változókra: mivel $|\partial(y_+, y_-)/\partial(\eta, x)| = 1$, a kettős integrál szorzattá esik szét. Használva még az impulzusreprezentációbeli (6.49) hullámfüggvényt 1 dimenzióra szabva, végül ezt kapjuk:

$$\begin{aligned} \int f_W(x, p) dx &= \\ &= \sum_i w_i \left(\int \psi_i(y_+) e^{-\frac{i}{\hbar}py_+} \frac{dy_+}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right) \left(\int \psi_i^*(y_-) e^{\frac{i}{\hbar}py_-} \frac{dy_-}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right) \\ &= \sum_i w_i \phi_i(p) \phi_i^*(p) = \sum_i w_i |\phi_i(p)|^2 = P(p), \end{aligned} \quad (6.68)$$

vagyis az impulzus eloszlásfüggvénye, ahogy vártuk. Jegyezzük meg viszont, hogy az integrálás nélkül a Wigner-függvény általában *nem* tekinthető fázistérbeli valószínűségeloszlásnak, aminek ékesszóló jele, hogy „erősen kvantumos”, vagyis a (szemi)klasszikus határesetből távollevő rendszereknél tipikusan átsap negatív értékekbe is. Mindezzel együtt, a Wigner-függvényt

¹³ *Gyakorlat:* bizonyítsuk be, hogy valós!

és a mintájára bevezetett más fázistér-kvázieloszlásokat kiterjedten használják bonyolult kvantummechanikai problémák szemléltetésére.

Gyakorlat: Számítsuk ki 1 dimenzióban a Wigner-függvényét: 1. a harmonikus oszcillátor alapállapotának, 2. egy koherens állapotnak¹⁴, 3. két koherens állapot szuperpozíciójával létrehozott „Schrödinger-macskának”!

¹⁴ Lásd a 8.2. pontot.

7. fejezet

Közvetlen következmények

Az előző fejezetben megismertekből néhány általános és fontos eredmény következik, amelyek a kvantummechanika emblemikus tulajdonságai. Ide tartoznak a híres határozatlansági relációk, ide az energiasajátértékek meghatározásának közvetlen és hatékony variációs módszere, és néhány alapvető eredmény a mért statisztikai átlagok időbeli fejlődésére; ez utóbbiakból nő ki a mozgásállandók és szimmetriák témaköre.

7.1. Határozatlansági relációk

A kvantummechanikai átlagolás receptjének és az önadjungáltság fogalmának megismerésével felkészültünk a Heisenberg-féle határozatlansági relációk matematikailag pontos levezetésére. Egy matematikai ismeretre még szükségünk van, ez a skalárszorzatra vonatkozó *Schwartz egyenlőtlenség*, amely a vektorokra vonatkozó $|\vec{a} \cdot \vec{b}| = a b \cos \alpha \leq a b$ egyenlőtlenség Hilbert-térbeli megfelelője:

$$|\langle a|b \rangle|^2 \leq \langle a|a \rangle \langle b|b \rangle. \quad (7.1)$$

Tekintsük a $\hat{\Delta A} =: \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$, $\hat{\Delta B} =: \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$ önadjungált operátorokat, amelyek kommutátora $[\hat{\Delta A}, \hat{\Delta B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$. Egy $|\psi\rangle$ állapotban alkalmazzuk a Schwartz egyenlőtlenséget a $|\hat{\Delta A} \psi\rangle$ és $|\hat{\Delta B} \psi\rangle$ vektorokra:

$$\langle \hat{\Delta A} \psi | \hat{\Delta A} \psi \rangle \langle \hat{\Delta B} \psi | \hat{\Delta B} \psi \rangle \geq |\langle \hat{\Delta A} \psi | \hat{\Delta B} \psi \rangle|^2. \quad (7.2)$$

Most használjuk ki az operátorok önadjungáltságát:

$$\begin{aligned} \langle \psi | (\hat{\Delta A})^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\hat{\Delta B})^2 | \psi \rangle &\geq |\langle \psi | \hat{\Delta A} \hat{\Delta B} | \psi \rangle|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} \langle \psi | \hat{\Delta A} \hat{\Delta B} - \hat{\Delta B} \hat{\Delta A} | \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi | \hat{\Delta A} \hat{\Delta B} + \hat{\Delta B} \hat{\Delta A} | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \psi | \hat{\Delta A} \hat{\Delta B} + \hat{\Delta B} \hat{\Delta A} | \psi \rangle|^2, \end{aligned} \quad (7.3)$$

ahol az utolsó lépésben kihasználtuk, hogy a középső sorban az első tag imaginárius, a második valós, így négyzeteik összeadódnak. Az utolsó sor

második tagja viszont nemnegatív (A és B közötti korrelációkat jelez), így az alábbi egyenlőtlenségre jutunk:

$$\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta B)^2 | \psi \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2. \quad (7.4)$$

Végül bevezetve a $\Delta A =: \sqrt{\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle}$ jelölést, megkapjuk a határozatlansági reláció szokásos alakját:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|. \quad (7.5)$$

Ennek speciális esete a közismert $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ reláció.

A határozatlansági relációkat a kvantummechanika kezdeti éveiben kiterjedt folklór övezte, amelynek lényeges része volt Heisenberg mikroszkóp-gondolatkísérlete. Ebben egyetlen λ hullámhosszú foton világítja meg a tárgyat, és a szóródott fotonról egyszerre akarjuk leolvasni a tárgy helyét és impulzusát. A foton egy θ szöget befogó tárgylencse gyűjti be. Ilyenkor, a mikroszkóp ismert elmélete szerint, a felbontható legkisebb méret $\Delta x = \lambda / \sin \theta$; annál kisebb, minél nagyobb szöget fogunk be. A θ szöggel viszont $\Delta p = (h/\lambda) \sin \theta$ arányban nő a bizonytalansága a fotonról leolvasható, tárgysík irányú impulzusvetületnek. Láthatóan a két hatás kompenzálja egymást, és $\Delta x \Delta p \approx h$. Látnunk kell azonban, hogy ez nem bizonyítja, csak illusztrálja a határozatlansági relációt: egy konkrét példán mutatja be, hogy a kvantummechanikából eredő korlátokat nem lehet trükkös mérési tervekkel megkerülni, ugyanúgy, mint ahogy az energia megmaradását sem lehet holmi trükkös örökmozgóval vagy vízzel hajtott autóval átverni.

A 2.6 pontban megismert energia–idő határozatlansági reláció *nem* illik bele az itt megismert sémába, mert az idő a kvantummechanikában paraméter, amelynek nincs operátora, így az ott adott szemléltetés többé-kevésbé a végleges levezetést jelenti. A reláció megjelenési formáinak azonban se szeri, se száma: előbukkan minden rövid életű alakzat energiájának bizonytalanságában.

Egy említésre érdemes újabb fejlemény annak felismerése, hogy az impulzus és hely közötti határozatlansági relációban a két partner szerepe nem szimmetrikus, mert szabad mozgásnál az impulzus mozgásállandó. Méréséhez két helymérésre van szükség különböző időpontokban. Ha az első helymérés túlságosan pontos, az impulzus bizonytalansága nagy lesz, ami megnöveli a második helymérés bizonytalanságát is: a helymérések pontosságát *optimalizálni* kell, nem maximalizálni. A véges ideig tartó mérések visszahatásának optimalizálása a kvantummechanika egyik aktívan kutatott

területe; szorosan kapcsolódik a „Quantum Non-Demolition” témaköréhez, amit a 17.3. pontban mutatunk be.

7.2. Variációs elv a stacionárius állapotokra

Az alapállapot energiája kiemelkedően fontos fizikai mennyiség. Ez határozza meg molekulák és szilárd testek kötésének erősségét, különböző összetett rendszerek stabilitását. Minél bonyolultabb a rendszer, annál nehezebb megoldani a Schrödinger-egyenletet. Jó tudni, hogy van egy módszer, amely éppen az alapállapot energiájának meghatározásában roppant hatékony, és eredményeit akár nemzedékről nemzedékre javíthatják a fantáziadús fizikusok: ez a variációs módszer.

Alkalmazzuk a (6.19), (6.7) formulákat a Hamilton-operátorra, amelynek sajátértékei növekvő sorrendben $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$, vagyis E_0 az alapállapot energiája, és szorítkozzunk időtől nem függő $\phi(\vec{r})$ hullámfüggvényekre. Ekkor a fenti egyenlőtlenségek miatt

$$\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0, \quad (7.6)$$

ahol kihasználtuk a (6.6) normálási tulajdonságot is.

A kapott egyenlőtlenség tetszőleges $\phi(\vec{r})$ hullámfüggvényre igaz, és a baloldali átlagot kiszámítva, felső korlátot kapunk az alapállapot energiájára. A felső korlátot egyre jobb „próbafüggvényekkel” lefelé szorítva, a korlátok egyre jobb becslésekké válnak. Ez lehetővé teszi, hogy nehezen megoldható Schrödinger-egyenletek esetén megpróbáljuk *kitalálni* a hullámfüggvény helyfüggésének alakját, szabad paramétereiket hagyva a függvényben, amelyek hullámcsomagok szélességét és alakját, összegek súlyozását, és még amit fontosnak vagy legalább lehetségesnek érzünk, mindent változtathatnak. Ekkor már néhány paraméter szerinti deriválással tudjuk meghatározni az adott alakú függvényekkel elérhető legjobb becslést. Más kutatók, más próbafüggvényekkel esetleg alacsonyabb felső korlátot érnek el, ami visszafelé, a kvantumállapot szerkezetéről ad fontos információt: jobb állapot, jobb hullámfüggvény.

A módszer alkalmazásánál olyan próbafüggvényekkel igyekszünk kifejezni az elgondolt fizikai tartalmat, amelyekkel a \hat{H} átlagolásához szükséges integrálokat ki lehet számítani. Ilyen integrálokból óriási adatbázisok halmozódtak fel. Külön figyelmet érdemel, hogy a paraméterek változtatásakor a hullámfüggvény normálását megőrizzük.

A variációs módszert legtöbbször a bonyolult alapállapotok kutatására használják, de nem mindig: ha egy mellékfeltétellel kikötjük, hogy a próbafüggvényünk ortogonális legyen az alapállapotra, akkor vizsgálhatjuk vele

az első gerjesztett állapotot, ha arra is ortogonalizálunk, akkor a másodikat, és így tovább. A megfelelő próbafüggvények kiválasztásában és a számítások kezelhető méretek között tartásában sokszor nélkülözhetetlen szolgálatot tesznek a szimmetriák és a kezelésükre hivatott csoportelméleti módszerek.

Konkrét fizikai rendszerek szerkezetéről és fizikai tulajdonságairól a kvantummechanika kezdete óta felhalmozott ismereteink jelentős része származik variációs számításokból; a Newton-féle híres „óriások vállán állunk” metafora sokszor ebben a konkrét alakban jelenik meg: „a te eredményed az én próbafüggvényem”.

7.3. Az átlagérték időderiváltja; mozgásállandók; Ehrenfest tételei

Egy fizikai mennyiség \hat{A} operátorának $\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ átlaga két okból is változik az idő múlásával: egyrészt mert a $|\psi(t)\rangle$ kvantumállapot változik (ezt írja le a Schrödinger-egyenlet), másrészt mert maga a fizikai mennyiség is változik: $\dot{\hat{A}} = \partial \hat{A} / \partial t \neq 0$. Ez utóbbi egyáltalán nem valami egzotikus bonyodalom: ha váltóáramot engedünk át egy tekercsen, a mágneses térben mozgó elektron Hamilton-operátora is változik az időben. A fentiek megjelennek az átlag időderiváltjában:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \langle \dot{\psi} | \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \dot{\hat{A}} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} | \dot{\psi} \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{A} \hat{H} | \psi \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [\hat{H}, \hat{A}] | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (7.7)$$

ahol felhasználtuk a ket- és bra-vektorok időfüggését leíró (6.29) ill. (6.32) Schrödinger-egyenleteket.

A (7.7) eredmény legtöbbet emlegetett alkalmazása az, hogy ha az \hat{A} operátor felcserélhető a rendszer Hamilton-operátorával és explicite nem függ az időtől:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{A}] &= 0, \\ \partial \hat{A} / \partial t &= 0, \end{aligned} \quad (7.8)$$

akkor kvantummechanikai átlaga időben nem változik, tehát \hat{A} *mozgásállandó*. Természetesen ezek a feltételek jóval többet biztosítanak, mint az átlagérték állandóságát: teljesülésük esetén az \hat{A} operátor mérésének teljes

statisztikája független az időtől. Külön említést érdemel, hogy a mozgásállandóknak \hat{H} -val való felcserélhetőségük miatt létezik \hat{H} -val közös sajátfüggvényrendszerük. A $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ feltétel tartalmának, különös tekintettel a szimmetriákkal való kapcsolatára, sok kötetnyi az irodalma, és ebben a könyvben is sokat fogunk vele foglalkozni.¹

Lépjünk túl a mozgásállandók témakörén, és a (7.7) egyenletet alkalmazzuk egyetlen részecske helyének és impulzusának átlagos időfüggésére! Az egyszerűség kedvéért maradjunk egyszemélyes modellrendszereknél (három dimenzióban minden ugyanígy érvényes), és induljunk ki a jól ismert $\hat{H} = (\hat{p}^2/2m) + V(\hat{x})$ Hamilton-operátorból. Az eredmények:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [V(\hat{x}), \hat{p}] \rangle = -\frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\frac{\hbar}{i} \partial_x, V(x) \right] \right\rangle \\ &= \left\langle -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle = \langle F(x) \rangle, \end{aligned} \quad (7.9)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{i}{2m\hbar} \langle [\hat{p}^2, \hat{x}] \rangle = \left\langle \frac{\hat{p}}{m} \right\rangle. \quad (7.10)$$

A két egyenlet levezetéséhez egy-egy kommutátort kellett felhasználni: az elsőhöz készen kaptuk az ismert $\hat{p}_x = (\hbar/i)\partial_x$ differenciáloperátoros reprezentációt, a másodikhoz le kellett vezetnünk a kevésbé triviális $[\hat{p}_x^2, \hat{x}] = \hat{p}_x[\hat{p}_x, \hat{x}] + [\hat{p}_x, \hat{x}]\hat{p}_x = (2\hbar/i)\hat{p}_x$ eredményt.²

A (7.9) és (7.10) egyenleteket nevezzük *Ehrenfest tételeinek*. Tartalmuk az, hogy a Newton-féle mozgásegyenletek (ill. a megfelelő Hamilton-féle kanonikus egyenletek) jól meghatározott *átlagos* értelemben a kvantummechanikában is érvényesek: az impulzus kvantummechanikai átlaga határozza meg a tömegközéppont átlagos sebességét, és az $F(x) = -\partial V(x)/\partial x$ erő kvantummechanikai átlagával egyenlő az impulzus átlagának időderiváltja. Ezek fontos és egyáltalán nem triviális eredmények, amelyek jó első tájékozódást nyújthatnak bonyolult időfüggő problémák természetéről.

¹ Még akkor is, ha a $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ összefüggés csak közelítőleg érvényes, és valamilyen gyenge perturbáció lassan módosítja \hat{A} átlagértékét és mátrixelemeit, a közelítő mozgásállandó \hat{A} sajátértékeivel előnyösen indexelhetők a rendszer állapotai, ezért hívják őket néha „jó kvantumszámoknak”.

² Ez utóbbi nem egyedi trükk: a módszer az, hogy a $\hat{p}_x\hat{p}_x\hat{x}$ szorzatban az \hat{x} tényezőt lépésről lépésre kell átvinni a jobbszélre a balszélre, és minden lépésnél hozzáadni ill. levonni a megfelelő $[\hat{p}_x, \hat{x}]$ kommutátort.

7.4. Időfejlődés Schrödinger- és Heisenberg-képben

A kvantummechanikát követő mikrorendszerek időbeli változását statisztikai átlagokon keresztül tudjuk mérésrel követni: a rendszert sokszor egymás után, azonos kezdőállapotban kell *preparálni*, és t idővel később valamilyen \hat{A} fizikai mennyiséget (vagy fizikai mennyiségek egy bővebb választékát) megmérni. A mérési eredmények teljes jegyzőkönyvéből \hat{A} függvényeinek átlaga, pl. a határozatlansági relációkban szereplő szórás is kiértékelhető.

Az eredmények átlagát az elmélet oldaláról a megkerülhetetlen, minden információt tartalmazó (7.7) egyenlet adja meg. Ennek levezetésénél az állapotvektor fejlődését nyomon követő Schrödinger-egyenletből indultunk ki (*Schrödinger-kép*), de a végeredmény inkább az átlagolt operátor tulajdonságainak aktív szerepét látszik hangsúlyozni.

Ez utóbbi szemléletet erősíti, ha felhasználjuk azt a 6.5 pontban már kimondott észrevételt, hogy az állapotvektor fejlődését *unitér transzformációnak* tekinthetjük, hiszen az állapotvektor úgy változik, hogy normája (önmagával vett skalárszorzata) változatlan, ezért így írható:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle, \quad (7.11)$$

ahol $t = 0$ egy önkényesen választott kezdőpillanat, és az $\hat{U}(t)$ unitér operátor ($\hat{U}\hat{U}^\dagger = \mathbb{1}$) kielégíti a Schrödinger-egyenletből közvetlenül következő

$$\partial_t \hat{U}(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t) \quad (7.12)$$

dinamikai egyenletet, az $\hat{U}(0) = \mathbb{1}$ kezdeti feltétellel. Jegyezzük meg mindjárt az adjungált egyenletet is:

$$\partial_t \hat{U}^\dagger(t) = \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger(t) \hat{H}(t). \quad (7.13)$$

Az eddigiek felhasználásával a vizsgált átlagérték így írható:

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) | \psi(0) \rangle. \quad (7.14)$$

Most jön az érdekes lépés: vegyük észre, hogy az első alakból a másodikba való átmenetet úgy tekinthetjük, mint egy $\hat{S}(t)$ fordított unitér transzformációt, amelynek operátora $\hat{U}(t)$ inverze:

$$\hat{S}(t) := \hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}^\dagger(t). \quad (7.15)$$

A transzformált állapotvektort és operátorokat jelöljük „H” indexszel, amely most Heisenberg nevére utal:

$$\begin{aligned} |\psi_H\rangle &= \hat{S}(t) |\psi(t)\rangle = \hat{U}^{-1}(t) \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle; \\ \hat{A}_H(t) &= \hat{S}(t) \hat{A} \hat{S}^\dagger(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t). \end{aligned} \quad (7.16)$$

Ezzel megérkeztünk a *Heisenberg-képbe*, amelyben az állapotvektorok időben nem változnak; az időfüggést az operátorok hordozzák. Az átlagérték időfüggése viszont nem változik: a (7.14) egyenletből

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \Psi_H | \hat{A}_H(t) | \Psi_H \rangle. \quad (7.17)$$

A teljesség kedvéért meg kell még adnunk az $\hat{A}_H(t)$ Heisenberg-operátor időfüggését leíró operátor-egyenletet: (7.11) és (7.12) felhasználásával

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H(t), \hat{A}_H(t)] + \partial_t \hat{A}_H(t), \quad (7.18)$$

ahol az utolsó tag az $\hat{A}_H(\hat{r}(t), \hat{p}(t), t)$ operátor *explicit*, valamilyen időfüggő külső tértől eredő, tehát *nem* a benne szereplő $\hat{r}(t)$, $\hat{p}(t)$ Heisenberg-operátorokon keresztül időfüggésének felel meg.

Amint azt vártuk, az operátor-mozgásegyenlet alakja híven követi az átlagérték időfejlődését leíró (7.7) egyenletet, annak minden következményével. Mindenekelőtt, ha nincs explicit időfüggés, akkor a $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ feltétel választja ki a mozgásállandókat. Egy fokkal kevésbé triviális, hogy az Ehrenfest-tételek a Heisenberg-képben operátoregyenlet alakjában is érvényesek.

Igazán fontos példa a (4.4) kontinuitási egyenlet és a (4.5) áramsűrűség megjelenése a Heisenberg-képben. Az \vec{r} helyen (paraméter, nem dinamikai változó!) vett részecskesűrűség Heisenberg-operátora $\hat{r}_i(t)$ helyvektor-operátorú és $\hat{p}_j(t)$ impulzus-operátorú részecskékből álló rendszerre nyilvánvalóan

$$\hat{\rho}_H(\vec{r}, t) = \sum_i \delta(\vec{r} - \hat{r}_i(t)). \quad (7.19)$$

Ennek Heisenberg-időderiváltja, ha a Hamilton-operátor

$$\hat{H}_H(t) = \frac{1}{2m} \sum_i \hat{p}_i(t) + V(\{\hat{r}_i(t)\}), \quad (7.20)$$

a következő beszédes alakba írható:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_H(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_H(\vec{r}, t), \quad (7.21)$$

ahol az \vec{r} helyen vett áramsűrűség Heisenberg-operátora:

$$\hat{j}_H(\vec{r}, t) = \frac{1}{2M} \sum_i \left(\hat{p}_i(t) \delta(\vec{r} - \hat{r}_i(t)) + \delta(\vec{r} - \hat{r}_i(t)) \hat{p}_i(t) \right). \quad (7.22)$$

A levezetés kidolgozását *gyakorlatul* ajánlom az olvasó számára; a kiindulás természetesen a (7.18) egyenlet, amelyben az utolsó tag elhagyható, hiszen a (7.20) Hamilton-operátorban nincs explicit időfüggés.

A Heisenberg-kép a kvantummechanika Heisenbergtől származó, Schrödinger előtti mátrixos megfogalmazásában merült fel először, mint a klasszikus mechanikai mozgásegyenletek kvantummechanikai megfelelőjét jelentő (7.18) egyenlet mátrixokkal reprezentált alakja. Teljes jelentése azonban csak az állapotvektor szerepének tisztázásával vált világossá. A kvantumelmélet későbbi fejlődése szempontjából ennél sokkal fontosabb volt annak felismerése, hogy a Schrödinger- és Heisenberg-képek mintájára közbenső képek is konstruálhatók, amelyekben pl. különválaszthatjuk a kölcsönhatás nélküli, „csupasz” részecskék Hamilton-operátorát a kölcsönhatást leíró tagtól. Ha az operátorok időfejlődését a csupasz Hamilton-operátor, az állapotvektorét pedig a kölcsönhatás szabályozza, akkor jutunk el a *kölcsönhatási képbe*, amely a bonyolult kölcsönható kvantumrendszerek vizsgálatának nélkülözhetetlen eszköze. Ez az eszköz először Dirac munkáiban jelent meg, mint az időtől függő perturbációs számítás kerete (lásd a 13.2 pontban); később az elemi részecskék fizikáját leíró relativisztikus kvantumtérelméletben vált félelmesen hajlékony és sokoldalú technikává, Tomonaga, Schwinger, Feynman és Dyson munkái nyomán. A kölcsönhatási kép formalizmusának rövid áttekintését adjuk a D. függelékben; ebben a könyvben csak egy helyen alkalmazzuk: az E. függelékben leírt master-egyenletek levezetésénél.

7.5. A Hamilton-operátor szimmetriái és a megmaradó mennyiségek

Már említettük az unitér transzformációk egyik nevezetes felhasználási területét: velük lehet leírni, hogyan változik ugyanannak a fizikai rendszernek a matematikai leírása, ha a háromdimenziós térben nézőpontot váltunk: más helyről, más irányból nézünk rá a rendszerre. Az alapvető példák: a koordináta-rendszer eltolása, elforgatása, tükrözése, de ide tartozik az óra átállítása is. Mindezeknek egy-egy \hat{T} lineáris, unitér transzformáció felel meg, amelynek során a kvantummechanikai állapotvektor matematikai alakja megváltozik: $|\psi\rangle \Rightarrow |\psi'\rangle$, ahol

$$|\psi'\rangle = \hat{T} |\psi\rangle. \quad (7.23)$$

Megváltozik az operátorok matematikai alakja is: $\hat{A} \Rightarrow \hat{A}'$, ahol

$$\hat{A}' = \hat{T} \hat{A} \hat{T}^\dagger. \quad (7.24)$$

Ha egy papírból kivágott figurát körülrajzolok, majd megfordítom és ráteszem a rajzra, általában nem illik rá, de van, amikor igen: akkor, ha a figura

tükrözés-szimmetrikus. Ugyanígy a kvantummechanikában is előfordul, hogy egy fizikai mennyiség operátora egy transzformáció során *nem* változik meg: akkor, ha a transzformáció a fizikai rendszer valamilyen *szimmetriáját* fedi fel.

A szimmetria függ attól, hogy milyen mennyiséget próbálok transzformálni. A kvantummechanikában mindig a *Hamilton-operátor*, ill. bonyolultabb esetben a megkonstruálására használt *Lagrange-függvény* szimmetriáját vizsgáljuk, mert annak vannak messzemenő következményei.³ Legyen a \hat{H} Hamilton-operátor szimmetrikus a \hat{T} unitér transzformációra nézve:

$$\hat{T} \hat{H} \hat{T}^\dagger = \hat{H}. \quad (7.25)$$

Szorozzuk meg az egyenletet jobbról a \hat{T} operátorral és használjuk ki \hat{T} unitaritását: az eredmény $\hat{T} \hat{H} = \hat{H} \hat{T}$, vagyis

$$[\hat{H}, \hat{T}] = 0. \quad (7.26)$$

Ezen alapulnak a szimmetriák kvantummechanikai alkalmazásai:

- a szimmetriaművelet unitér operátora mozgásállandó (megmaradó mennyiség);
- a Hamilton-operátor sajátfüggvényei választhatók úgy, hogy a szimmetriaműveletnek is sajátfüggvényei legyenek.

Az utóbbi tulajdonság sokszor megkönnyíti az energiasajátfüggvények meghatározását, amire a következőkben több példát is fogunk látni. Mindekelőtt említsük meg a tükrözés példáját, amellyel már találkoztunk az egydimenziós potenciálgödör és a harmonikus oszcillátor esetében. Az egydimenziós problémák speciálisak, amennyiben a szimmetriák „egy lépésben” működnek. Amint már az említett példákban megtanultuk, a tükrözés operátora a \hat{P}_x paritásoperátor, amelynek sajátfüggvényei a páros és a páratlan függvények. $[\hat{H}, \hat{P}_x] = 0$ akkor teljesül, ha a potenciális energia tükrözés-szimmetrikus: $\hat{P}_x V(x) = V(-x) = V(x)$; ilyenkor az energiasajátfüggvények vagy párosnak, vagy páratlannak választhatók (ha nincs elfajulás, akkor maguktól vagy párosak, vagy páratlanok). Az időfejlődés során a paritás

³ Kedvenc vizsgakérdésem: a fejem magasságában a gravitációs erő ugyanakkora, mint lent a padlón. Ez translációs szimmetria, mégsem marad meg a leejtett pohár impulzusa, hanem növekszik a széttörésig. Miért? A válasz természetesen ez: nem az erő, hanem a Hamilton-függvény translációs-szimmetriája biztosítja az impulzusmegmaradást. Ha a függőleges erő állandó, akkor a Hamilton-függvény helyfüggő része, a potenciális energia nem állandó, hanem lineárisan változik a magassággal, tehát az impulzus nem marad meg.

megmarad: páros kezdeti állapot későbbi átalakulása során is páros, páratlan kezdeti állapot később is páratlan marad.

Több dimenzióban az egy dimenzióra vonatkozó szimmetria nem ennyire egyszerűen hat, de kihasználására még mindig van egy egyszerű recept: a *szeparálás* módszere. Ha $\hat{P}_x V(x, y, z) = V(-x, y, z) = V(x, y, z)$, akkor a Schrödinger-egyenlet megoldásai $f(x)\phi(y, z)$ alakban kereshetők, és az $f(x)$ tényező párosnak, ill. páratlannak választható, ami az időbeli fejlődés során is megmarad.

Különösen fontos téma a *folytonos szimmetriák* esete, mert ez vezet el a klaszszikus fizikából ismert, alapvető megmaradási tételekhez. A lényeg roppant egyszerű. Válasszunk egy koordinátát, mondjuk x -et, meg egy $f(x, y, z)$ függvényt, és számoljunk:

$$\frac{\partial}{\partial x} \hat{H} f(x, y, z) = \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} f(x, y, z) + \hat{H} \frac{\partial}{\partial x} f(x, y, z), \quad (7.27)$$

ezért ha \hat{H} független x -től, akkor felcserélhető a $\partial/\partial x$ művelettel. Az, hogy \hat{H} független x -től, az x irányú translációval szembeni invarianciát (változatlanyságot), más szóval: x irányú *transzláció-szimmetriát* jelent, a következménye pedig $\hat{p}_x = (\hbar/i)\partial_x$ megmaradása. Meglepetés nincs a dologban: \hat{H} csak a $V(x, y, z)$ potenciális energiában függhetne x -től; ha nem függ, akkor $F_x = -\partial V/\partial x = 0$, vagyis nem hat x irányú *erő*, így természetes, hogy az x irányú impulzus nem változik, hasonlóan a klasszikus mechanikához.

Ugyanerre a mintára működik az impulzusmomentum megmaradása is: ha φ egy tengely körüli forgás szögkoordinátája, és a potenciális energia – rajta keresztül pedig \hat{H} – nem függ φ -től, akkor rendszerünknek az adott tengely körüli *forgásszimmetriája* van; ugyanebből az is következik, hogy a potenciális energiának megfelelő erő vektora átmegy a forgástengelyen, így nincs forgatónyomatéka. Másrészt ilyenkor \hat{H} felcserélhető a $\partial/\partial\varphi$ művelettel, vagyis $(\hbar/i)\partial_\varphi$ megmaradó mennyiség. Hamarosan megtanuljuk, hogy ez éppen az adott forgástengelyhez tartozó *impulzusmomentum (perdület)*, tehát azt kaptuk, hogy ha forgásszimmetria van, vagyis nem hat forgatónyomaték, akkor az impulzusmomentum megmarad, ahogy vártuk.

Kakuktkotás, de fontos különleges eset az *energia megmaradása*: triviálisan $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$, és ha \hat{H} -nak explicit időfüggése sincs, vagyis \hat{H} invariáns az *időeltolással* szemben,⁴ akkor mindebből következik, hogy az energia megmaradó mennyiség. Ez – amint a következő pontban is látni fogjuk – nem azon a matematikai pályán kapcsolódik az időeltoláshoz, mint az impulzus a térbeli translációhoz, hiszen ∂_t nem az energia operátora, de a

⁴ Például nincs jelen időfüggő elektromágneses mező.

Schrödinger-egyenlet mégiscsak összekapcsolja ∂_t -t a Hamilton-operátorral, emiatt az eredményeken nem látszik meg a különböző eredet.

7.6. A folytonos szimmetriák generátorai

Azt, hogy minden folytonos szimmetriához tartozik egy megmaradó mennyiség, *Noether tételének* nevezik. A tételnek van egy általánosabb megfogalmazása is, ami az előző pontbeli első ismerkedés után megtanulásra érdemes. Maradjunk az x koordináta példájánál, és vezessük be a koordinátarendszer x irányú, véges a nagyságú eltolásának $\hat{T}_x(a)$ unitér operátorát:

$$\hat{T}_x(a) f(x, y, z) = f(x - a, y, z). \quad (7.28)$$

Ha a Hamilton-operátor x irányban translációs-szimmetrikus, akkor $\hat{T}_x(a) \hat{H} (\hat{T}_x(a))^{-1} = \hat{H}$, tehát $[\hat{H}, \hat{T}_x(a)] = 0$, így $\hat{T}_x(a)$ megmaradó mennyiség.

A véges transláció operátorát a Taylor-sor összekapcsolja a deriválás műveletével, ezen keresztül pedig az impulzus operátorával! Ellenőrizzük a levezetést, emlékezve arra, hogy egy operátor függvénye a függvény hatvány-sorával definiált operátor:

$$\begin{aligned} f(x - a) &= f(x) - af'(x) + \frac{(-a)^2}{2!} f''(x) + \frac{(-a)^3}{3!} f'''(x) + \dots \\ &= \left(\mathbb{1} + \frac{(-a\partial_x)}{1!} + \frac{(-a\partial_x)^2}{2!} + \frac{(-a\partial_x)^3}{3!} + \dots \right) f(x) \quad (7.29) \\ &= e^{-a\partial_x} f(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x} f(x), \end{aligned}$$

ahonnan leolvashatjuk, hogy

$$\hat{T}_x(a) = e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x} \quad (7.30)$$

a véges a távolságú transláció operátora. Adjungáltja $(\hat{T}_x(a))^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x}$; unitaritása \hat{p}_x önadjungáltságából következik.

Legyen az eltolás nagysága $a = \delta x$ infinitézimálisan kicsi; akkor

$$\hat{T}_x(a) \approx \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta x \hat{p}_x. \quad (7.31)$$

Ezt úgy szokták kifejezni, hogy „az impulzus az eltolások csoportjának *generátora*”, ami azt a szemléletet fejezi ki, hogy a (7.30) véges eltolás a (7.31) infinitézimális eltolásokból épül fel exponenciális operátorra. Mivel egy

operátor és annak bármilyen analitikus függvénye ugyanazokkal az operátorokkal felcserélhető, a Hamilton-operátor véges translációval szembeni invariációjából nem csak $\hat{T}_x(a)$ megmaradása, hanem a generátor, a \hat{p}_x impulzus megmaradása is következik.

Ugyanígy épül fel egy önkényesen kiválasztott z tengely körüli $\delta\varphi$ infinitézimális rotációkból, amelyek generátora az \hat{L}_z impulzusmomentum, a véges φ szögű rotációk operátora:

$$\hat{R}_z(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{L}_z}. \quad (7.32)$$

Ha a Hamilton-operátor invariáns a z körüli rotációval szemben, a forgás generátora, \hat{L}_z megmaradó mennyiség.

Természetesen sem a transláció x irányának, sem a rotáció z tengelyének nincs kitüntetett szerepe; értelemszerű vektorjelölésekkel megszabadulhatunk tőlük: \vec{u} egységvektor irányába történő a hosszú eltolás operátora $\hat{T}_{\vec{u}}(a) = e^{-\frac{i}{\hbar} a \vec{u} \cdot \hat{p}}$; \vec{u} egységvektor irányú tengely körüli φ szögű forgatás operátora $\hat{R}_{\vec{u}}(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \vec{u} \cdot \hat{L}}$.

Egy adott egyenes menti translációk sorrendje nem befolyásolja az eredményt: a megfelelő unitér operátorok felcserélhetők. Ugyanez vonatkozik egy adott tengely körüli forgások egymásutánjára. A *különböző tengelyek* körüli véges forgások azonban nem felcserélhetők: az eredmény szempontjából nem mindegy, hogy hasrafekszem és balra fordulok, vagy balra fordulok és hasrafekszem. Ennek megfelelően az impulzusmomentum vektorkomponensei sem lesznek felcserélhetőek. Kommutátoraik közvetlenül következnek a forgás geometriájából; akárhogyan vezetjük le őket, az eredmény az impulzusmomentum minden fajtájára univerzálisan igaz lesz. Erre a kérdésre a 9.1. pontban térünk vissza.

Amint már az előző pontban is említettük, az időeltolás és az energiamegmaradás kapcsolata formuláiban megegyezik az eddigiekkel: ha \hat{H} explicite nem függ az időtől, a Schrödinger-egyenlettel egyenértékű (7.12) egyenlet megoldásából közvetlenül megkapjuk az időfejlesztő (időtranszlációs) unitér operátort:

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}. \quad (7.33)$$

Az eltérő eredet ellenére tovább már ez is ugyanúgy működik, mint a térbeli szimmetriák: ha $\hat{U}(t) \hat{H} (\hat{U}(t))^{-1} = \hat{H}$, akkor $[\hat{H}, \hat{U}(t)] = 0$, így nem csak $\hat{U}(t)$, hanem annak generátora, \hat{H} is mozgásállandó.

7.7. Általános szimmetriaműveletek: irreducibilis ábrázolások és a spektrum

A térbeli szimmetriák kiaknázása bonyolultabb molekulák vagy kristályok esetén komoly matematikai felkészültséget igényel, amelynek fő eszköztárát a *csoportelmélet* adja.⁵ Hasonlóan nagy csoportelméleti apparátussal dolgozik a részecskefizika, amely a részecskefajták sokaságában többféle rejtett közelítő szimmetria felismerésével teremt rendet.

A „*csoportot*” szimmetriaműveletek alkotják, amelyek kombinálásával – a használatos szakkifejezés szerint: *szorzásával* – létrejövő szimmetriaműveletek is elemei ugyanannak a csoportnak. A szorzás a műveletek egymásutáni elvégzését jelenti. Az alkalmazások a műveletek *ábrázolására* épülnek: alkalmasan megválasztott kvantumállapotok bázisán a műveleteknek unitér mátrixok felelnek meg; ezek „ábrázolják” a csoportot.

Az alapfogalom a Hilbert-tér *invariáns altere*: bázisvektorok olyan lineáris kombinációja, amelyből a szimmetriaművelet nem vezet ki. Az ábrázolások manipulálásában az alpművelet a *redukálás*: olyan minimális invariáns alterek megkeresése, amelyeknek már nincsen még kisebb invariáns altere. A redukálás technikáját, amely ortogonalitási tulajdonságok kihasználásán alapul, az olvasó csoportelmélettel foglalkozó könyvekből tanulhatja meg.

A „kiredukálással” megtalált, minimális invariáns alterek bázisai alkotják a csoport *irreducibilis ábrázolásait*. Egy irreducibilis ábrázolás bázisvektorai a szimmetriaművelet során egymás között kombinálódnak.

Mindennek legközvetlenebbül az energiasajátértékek és sajátvektorok meghatározásában vehetjük hasznát. Ha a szimmetriaművelettel szemben az adott fizikai rendszer Hamilton-operátora invariáns, akkor az *azonos* irreducibilis ábrázoláshoz tartozó, szimmetriaművelettel egymásba transzformálható bázisvektorokhoz azonos energiasajátértékek tartoznak.

A szimmetria *különböző* irreducibilis ábrázolásainak bázisvektoraihoz általában különböző energiasajátérték tartozik; ha mégis azt találjuk, hogy a sajátértékek makacsul egybeesnek, akkor gyanakodhatunk, hogy valami új szimmetriatulajdonságot fedeztünk fel.

A csoportábrázolások elméletének legegyszerűbb esete a paritás már többször megismert példája. Az első igazán nem triviális példa a forgáscsoport esete, amellyel részletesen fogunk foglalkozni.

⁵ A terület nagy klasszikusa Wigner Jenő magyarul is megjelent könyve [11].

8. fejezet

A harmonikus oszcillátor: részletek

Ezzel a fejezettel a kemény alapozó edzésekről visszatérünk a konkrét rendszerekhez.

A harmonikus oszcillátor a fizika legfontosabb *megoldható*, vagyis minden részletében analitikus (nem numerikus) számolással követhető modellje, amely a természetben található rendszerek sokaságát írja le: molekulák és kristályok rezgéseit, de – egyszerű változóhelyettesítéseken keresztül – az elektromágneses mező rezgéseit is. Ezen túlmenően számos bonyolultabb fizikai rendszer elméleti tárgyalását teszi lehetővé, hogy harmonikus oszcillátorokból rakjuk össze őket, vagy harmonikus oszcillátorok kis megváltoztatásával – perturbációjával – közelítve jutunk el a megértésükig.

Az 5. fejezet végén már megismertük a harmonikus oszcillátor időfüggetlen Schrödinger-egyenletének megoldásával kapott energiaspektrumot és a stacionárius állapotok hullámfüggvényeit. Most az időközben megismert általános formalizmus nagyobb hajlékonyságát és teljesítőképességét használjuk ki ennek a fontos modellnek az alaposabb megismerésére.

8.1. Az algebrai módszer: keltő és eltüntető operátorok és mátrixelemeik

A Hamilton-operátor spektrumát a Schrödinger-egyenlet megoldása nélkül is sokszor meghatározhatjuk a felcserélési relációk (az oszcillátor esetén: $[\hat{p}, \hat{x}] = \hbar/i$) felhasználásával. Ilyenkor a Schrödinger-egyenlet határfeltételeiben megjelenő információt általában azzal vesszük figyelembe, hogy a számolásban kihasználjuk a kvantumállapotok normálhatóságát.

A harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m} \\
 &= \hbar\omega \frac{m\omega}{2\hbar} \left(\hat{x}^2 + \frac{1}{m^2\omega^2}\hat{p}^2 \right) \\
 &= \hbar\omega \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right) \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right) + \frac{1}{2} \right) \\
 &= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right),
 \end{aligned} \tag{8.1}$$

ahol a harmadik sorban a komplex számokra teljesülő $a^2 + b^2 = (a + ib) \times (a - ib)$ összefüggés mintájára a négyzetösszeget szorzattá alakítottuk, de figyelembe vettük, hogy \hat{x} és \hat{p} felcserélhetetlen operátorok; végül az utolsó sorban bevezettük az

$$\begin{aligned}
 \hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right) = \frac{1}{2\sigma}\hat{x} + \frac{i}{\hbar}\sigma\hat{p}, \\
 \hat{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right) = \frac{1}{2\sigma}\hat{x} - \frac{i}{\hbar}\sigma\hat{p}
 \end{aligned} \tag{8.2}$$

operátorokat, amelyek felcserélési relációja \hat{p} és \hat{x} ismert kommutátorából közvetlen behelyettesítéssel adódik:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \tag{8.3}$$

A (8.2) definíciókban $\sigma = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}$, összhangban az (5.45) egyenlettel.

A most bevezetett \hat{a} és \hat{a}^\dagger operátorok egymásnak adjungáltjai, ami abból következik, hogy \hat{x} és \hat{p} önadjungáltak. \hat{a} neve *eltüntető operátor*, \hat{a}^\dagger neve *keltő operátor*. Amit eltüntetnek, ill. keltenek, az az oszcillátor egy gerjesztési kvantuma, ahogy azt mindjárt belátjuk. Előbb azonban jegyezzük meg a (8.2) összefüggések fordítottját is:

$$\hat{x} = \sigma(\hat{a} + \hat{a}^\dagger); \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{2i\sigma}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \tag{8.4}$$

Írjuk a Hamilton-operátorra kapott eredményt ilyen alakba:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right); \quad \hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}, \tag{8.5}$$

és koncentráljunk az \hat{N} operátor sajátértékeire és a hozzájuk tartozó normált sajátvektorokra:

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle; \quad \langle n|n\rangle = 1. \tag{8.6}$$

A (8.3) felcserélési reláció felhasználásával könnyű megmutatni, hogy $|n\rangle$ -nel együtt $\hat{a}|n\rangle$ és $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ is sajátvektorok, kivéve ha valamelyikük 0:

$$\begin{aligned}\hat{N}\hat{a}|n\rangle &= (\hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a}|n\rangle = (\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a}|n\rangle = (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle; \\ \hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \hat{a}^\dagger(\hat{a}\hat{a}^\dagger)|n\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|n\rangle = (\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger)|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle.\end{aligned}\tag{8.7}$$

Az így kapott sajátvektorok nem normáltak. Felhasználva, hogy

$$\|\hat{a}|n\rangle\| = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n,\tag{8.8}$$

kapjuk, hogy

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle.\tag{8.9}$$

Hasonlóan,

$$\|\hat{a}^\dagger|n\rangle\| = \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1|n\rangle = n+1\tag{8.10}$$

felhasználásával

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.\tag{8.11}$$

A (8.9) egyenlet szerint egy n sajátértékből kiindulva sajátállapotok sorozatát generálhatjuk $n-1$, $n-2$, ... sajátértékekkel. A sajátértékek sorozata azonban (8.8) miatt nem mehet át negatív értékekbe. Ez csak akkor kerülhető el, ha n egész értékéről indulunk, és egész értékeken át eljutunk a 0-ig. Ott a sorozat megszakad, mert (8.9) szerint

$$\hat{a}|0\rangle = 0,\tag{8.12}$$

vagyis $|-1\rangle$ állapot nem generálódik, $|0\rangle$ a harmonikus oszcillátor alapállapota. Ebből (8.11) ismételt alkalmazásával előállíthatjuk az összes gerjesztett állapotokat:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle.\tag{8.13}$$

Innen az \hat{a}^\dagger operátor (8.2) alakjába beírva \hat{x} és \hat{p} koordinátareprezentációját, és felhasználva az alapállapot hullámfüggvény (5.44) alakját, megkapjuk a gerjesztett állapotok normált hullámfüggvényeinek számolásra alkalmas alakját:

$$\phi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}\sqrt{2\pi}\sigma} \left(\frac{x}{2\sigma} - \sigma \frac{d}{dx} \right)^n e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}.\tag{8.14}$$

Ezeknek a formuláknak a segítségével mindent kiszámíthatunk a harmonikus oszcillátor stacionárius állapotairól. Úgy alakult azonban, hogy a nemstacionárius állapotok a későbbiekben több figyelmet kaptak.

8.2. Koherens állapotok (kvantum-hinta)

Schrödinger 1928-ban, kevéssel hullámegyenletének megalkotása és a harmonikus rezgőmozgást leíró megoldásának megtalálása után rájött, hogy a klasszikus oszcillátornak *nem* a kvantum oszcillátor magasan gerjesztett állapotai felelnek meg, hanem egy oda-vissza hintázó alapállapot hullámcsomag, amelynek alakja változatlan marad, nem folyik szét, csak a hullámfüggvény fázisa szed fel egy triviális időfüggést a zéruspontrezgés energiája miatt. Az időfüggő Schrödinger-egyenletnek ezt az érdekes megoldását hívjuk koherens állapotnak, és különösen az elektromágneses hullámok kvantumelméletében tett szert óriási jelentőségre, mert ezeknek a hullámmódusoknak koherens állapotaival van tele körülöttünk a világ¹; tőlük szól a rádió, a TV, a mobiltelefon. Amint mindjárt látni fogjuk, a koherens állapot végtelen sok különböző gerjesztett állapot szuperpozíciója, meghatározott együtthatókkal.

A következőkben belátjuk, hogy a keresett koherens állapot az \hat{a} eltüntető operátor sajátvektora, megfelelő időfüggő sajátértékkal. Mindenekelőtt, az

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (8.15)$$

sajátértékegyenletet kielégítő $|\alpha\rangle$ normált sajátvektorokat fel lehet építeni a harmonikus oszcillátor sajátvektoraiból:²

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (8.16)$$

amit a (8.9) egyenletbe való közvetlen behelyettesítéssel igazolhatunk.

A következő lépésben megmutatjuk, hogy a fenti formula, megfelelő időfüggő $\alpha(t)$ sajátértékkal, kielégíti az időfüggő Schrödinger-egyenletet. Ehhez induljunk ki egy $|\alpha_0\rangle$ kezdeti állapotból, és írjuk be az $|n\rangle$ oszcillátor-sajátállapotok ismert időfüggését:

$$e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+1/2)t} |n\rangle = e^{-i\omega t/2} |\alpha_0 e^{-i\omega t}\rangle, \quad (8.17)$$

vagyis – a „zéruspontrezgésnek” megfelelő triviális fázisfaktortól eltekintve – visszakaptuk a (8.16) koherens állapotot, amelynek paramétere az oszcillátor ω frekvenciájával körbejár a komplex síkon:

$$\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t} = |\alpha| e^{-i(\omega t + \delta)}, \quad (8.18)$$

¹ Más szóval: amiről a Maxwell-egyenletek szólnak, azok a mező koherens állapotai.

² Mivel \hat{a} nem önadjungált, sajátértékei általában komplexek.

ahol δ -val jelöltük a komplex $\alpha(t)$ kezdőfázisát.

Hogy mozog eközben a hullámcsomag? Számítsuk ki a hely- és impulzusoperátor időfüggő átlagát, a (8.4) eredmények felhasználásával:

$$\begin{aligned}\langle x \rangle_t &= \langle \alpha(t) | \hat{x} | \alpha(t) \rangle \\ &= \sigma \langle \alpha(t) | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | \alpha(t) \rangle = \sigma (\alpha(t) + \alpha^*(t)) \\ &= 2\sigma \Re[\alpha(t)] = 2\sigma |\alpha| \cos(\omega t + \delta),\end{aligned}\quad (8.19)$$

$$\begin{aligned}\langle p \rangle_t &= \langle \alpha(t) | \hat{p} | \alpha(t) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2i\sigma} \langle \alpha(t) | \hat{a} - \hat{a}^\dagger | \alpha(t) \rangle = \frac{\hbar}{2i\sigma} (\alpha(t) - \alpha^*(t)) \\ &= \frac{\hbar}{\sigma} \Im[\alpha(t)] = -\frac{\hbar}{\sigma} |\alpha| \sin(\omega t + \delta),\end{aligned}\quad (8.20)$$

vagyis a koherens állapot az $(x(t), p(t))$ fázissíkon egy ellipszisen jár körbe, amely x irányban $2\sigma |\alpha|$, p irányban $(\hbar/\sigma) |\alpha|$ kiterjedésű. Eközben az „átmérője” változatlan marad: x irányban $2 \Delta x = 2\sigma$, p irányban $2 \Delta p = \hbar/\sigma$.

Ha a komplex síkon egy $|\alpha| \gg 1$ koherens állapot körbejáró foltjára messziről nézünk rá, a foltot már körbejáró pontnak látjuk, megfelelően a klasszikus mechanika fázissíkján való mozgásnak. $|\alpha|$ viszont az átlagos gerjesztettséget méri:

$$\bar{n} := \langle n \rangle_\alpha = \langle \alpha | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \alpha \rangle = \alpha^* \alpha \langle \alpha | \alpha \rangle = |\alpha|^2, \quad (8.21)$$

vagyis

$$|\alpha| \approx \sqrt{\bar{n}}, \quad (8.22)$$

úgyhogy ebben az átlagos értelemben igaz a korrespondenciaelv: nagy $\bar{n} \approx$ klasszikus mozgás. Azonban közelebről ránézve a kérdésre, a sok gerjesztett állapot koherens szuperpozíciója nélkülözhetetlen eleme a klasszikus ságnak. Ezt legközvetlenebbül az (8.4) egyenletekből láthatjuk: \hat{x} és \hat{p} lineárisan tartalmazza a keltő és eltüntető operátorokat, amelyeknek átlagértéke bármelyik energiasajátállapotban 0, csak átmeneti mátrixelemeik vannak különböző sajátállapotok között. Ezért ahhoz, hogy az inga klasszikus módon kilenghessen, vagyis hogy \hat{x} és \hat{p} átlaga makroszkopikus lehessen, az ingát olyan kvantumállapotba kell átvinni, amelyben különböző energiasajátállapotokat szuperponálunk.

Még egy elemi tulajdonságát említjük meg a koherens állapotnak: ha az $\alpha(t)$ paraméter $\varphi = \omega t + \delta$ fázisát óramutatónak tekintjük és leolvassuk róla

a t időt, az $\bar{n} = \bar{E}/\hbar\omega$ átlagos gerjesztettségről pedig az átlagos energiát, akkor alkalmazhatjuk a $\Delta E \Delta t \approx \hbar$ határozatlansági relációt, hogy egy újabb relációt kapjunk a fázis és a gerjesztési szám szórása között:

$$\Delta\phi \Delta n \approx 1, \quad (8.23)$$

vagyis a koherens állapotnak éppen *azért* lehet határozott, koherenciát hordozó fázisa, mert a gerjesztési száma határozatlan: végtelen sok különböző $|n\rangle$ gerjesztett állapotból szuperponálódott össze.

A gerjesztési szám sok alkalmazásban úgy jelenik meg, mint egy rezgési módusban jelenlevő részecskék száma – lásd a következő pontban. Ilyen értelemben a (8.23) összefüggés a kollektív fázis és a részecskeszám közötti határozatlansági reláció alakjában jelenik meg, ami számos kvantumjelenenség megértésének kulcsa. Matematikailag pontos megfogalmazása meglehetősen nehéz, mivel a fázis – eltérően mondjuk az x koordinátától – nem végtelen határok között változhat, hanem 2π szerint periodikus, de ha a koherencia erős: $\Delta\phi \ll 2\pi$, akkor ez nem okoz gondot, és a fenti pongyola megfogalmazást nyugodtan használhatjuk.

A koherens állapotok matematikai kezelésére ötletes és nem túl bonyolult technikák alakultak ki, amelyekből a C. függelékben adunk ízelítőt.

8.3. Rövid kitekintés: molekula-rezgések, kristályrezgések, csapdába ejtett ion rezgései

Az atomok úgy gerjesztődnek, hogy elektronfelhőjük magasabb energiasajátállapotba megy át. Az ennek megfelelő ΔE gerjesztési energia nagyságrendben $10^{-19} J \approx 1 eV$, ami $\Delta E/k_B \approx 10^4 K$ hőmérsékletnek felel meg. A molekulák és kristályok azonban jóval alacsonyabb energiával is gerjeszthetők, ha rezgésbe hozzuk őket; ha a rezgés kitérése nem túl nagy, a rezgést a harmonikus oszcillátor modelljével írhatjuk le. Az ehhez tartozó rezgési kvantumnak megfelelő hőmérséklet a molekula tömegétől függ: $\hbar\omega/k_B$ a H_2 molekulára $6000 K$, J_2 molekulára $300 K$.³

A molekulák rezgési módusai nagy változatosságot mutatnak, a minden esetben jelen levő nyújtási rezgéstől az egyenes bot-molekulák hajlító rezgésein át a bonyolultabb szerkezetek csavarási módusaiig. A módusok sokaságának számbavételében a szimmetriák jelentenek némi fogódzót.

A szimmetria legdurvább tulajdonságai közvetlenül is megjelennek az optikai spektrumokban. Egy különböző atomokból álló kétatomos molekula,

³ A szabadon lebegő-repülő molekulának van egy még alacsonyabb gerjesztési módusa: ha forgásba jön. Kristályoknál ez a lehetőség hiányzik.

pl. HJ rezgő dipólmomentuma elnyel és kibocsát a rezgéssel megegyező frekvenciájú infravörös sugárzást. Olyan molekula, amely két azonos atomból áll, pl. O_2 , erre csak két lépésben képes: a bejövő fény dipólmomentumot indukál, ami aztán képes sugározni; ezt a sokkal gyengébb folyamatot nevezik „Raman-effektusnak”.

Kristályok hanghullám-szerű, ún. akusztikus rezgési módusai egy sávban helyezkednek el, amelyek 0-tól az ω_D Debye-frekvenciáig terjednek; ω_D/k_B nagyságrendje anyagtól függően néhányszor 100 K. A többatomos elemi cellájú kristályoknak vannak még olyan, magasabb frekvenciájú, ún. optikai rezgési is, amelyek nem hanghullámra, hanem rezgő dipólusokra emlékeztetnek; bennük az elemi cellát alkotó atomok egymáshoz képest rezegnek. $T \ll \omega_D/k_B$ hőmérsékleten a kristályok rezgési módusai is harmonikus oszcillátornak tekinthetők. Rezgési kvantumaikat *fononnak* nevezzük; ezt a szót Landau alkotta a foton mintájára, a *hang* görög nevéből. Alacsony hőmérsékleten a fononok dominálják a szigetelő kristályok tulajdonságait; fémekben az elektronok szabad mozgásának hatásai sokszor erőteljesebbek.

Magas gerjesztési szinten a harmonikus oszcillátor közelítése elromlik. Molekuláknál az ebből eredő „anharmonikus” effektusok a színképek szétmosódásától a molekula disszociációjáig, csavarási módusoknál a szabad forgásig terjedhet. Kristályoknál a domináló anharmonikus jelenség a *fonon-fonon kölcsönhatás*; magas hőmérsékleten ez lényegesen befolyásolja a szigetelő kristályok fajhőjét és hővezetését.

A molekulák és kristályok rezgési elméleti leírásának nélkülözhetetlen keretét jelenti a *Born–Oppenheimer közelítés* (más néven: *adiabatikus közelítés*). Eszerint a nehéz atommagok lassú rezgéseit késedelem és gerjesztődés nélkül követi és leárnyékolja a könnyű és gyors elektronok felhője, amelynek energiáját viszont a magok úgy érzékelik, mint egy járulékot a potenciális energiájukhoz. Minderről a 15.7. pontban olvasható egy rövid leírás.

Az utóbbi évtizedek nagy találmánya, az *ioncsapda*, amely mágnesekkel és elektromos töltésű elektródokkal tart helyben egyes ionokat, újabb példáját teremtette meg a kvantummechanikai oszcillátornak. A csapdázó potenciál gödrében az ionok 10 MHz nagyságrendű frekvenciával rezegnek, amelynek kvantuma (ezt is fononnak nevezik!) $\hbar\omega/k_B \approx 10^{-3}$ K hőmérsékletnek felel meg. Ilyen alacsony hőmérsékletet lézeres hűtéssel lehet létrehozni. A csapdázás és lézerhűtés témakörét foglalja össze a B. függelék.

Lehűtve, az egyes ion rezgőmozgása vagy néhány ion kollektív rezgése félreismérhetetlenül követi a kvantummechanikai leírásból ismert tulajdonságokat. A rezgés alapállapotú hullámfüggvényének kiterjedése (lásd az

(5.45) formulát) néhányszor 10 nm nagyságrendű, ami egy nagyobb molekula mérete. Fényimpulzusok élesen hangolt kombinációival a csapdázott ionokat mozgásba is lehet hozni; rezgésük koherens állapotot jelenít meg. Még trükkösebb impulzuskombinációkkal a koherens állapotot ketté is lehet hasítani; az egyidőben kétfelé hintázó hullámcsomag volt az első kísérleti megjelenítése Schrödinger boldogtalan macskájának, amely egyszerre él is, hal is.

8.4. A foton

A kvantumelmélet története az elektromágneses hullámok kvantumos jellegének Planck és Einstein által való felismerésével kezdődött. Később a fejlődés az elektronok mozgástörvényeinek feltárása felé haladt előre. Az atomos anyagról változatlanul a fény elnyelési spektrumai szolgáltatták a legrészletesebb információt, de ennek elméleti leírásában (lásd a 13.2. pontot) elegendő volt az elektromágneses mezőt „klasszikus” erőtérenk tekinteni. Ennek utólagos magyarázata az lehet, hogy az erős fényforrások olyan fényt bocsátanak ki, amelyben a mező módusai magasan gerjesztett, koherens állapotokhoz közeli állapotba kerülnek.

Az elmélet további fejlődése során azonban kötelező feladatként merült fel, hogy a sugárzás kvantumos tulajdonságai is kerüljenek az épületen belülre. Ezzel finom és fontos jelenségek sora vált vizsgálhatóvá, mindenekelőtt a *spontán emisszió*: amíg a sugárzás kvantumosságát nem vesszük figyelembe, érthetetlen, hogy ha egy elektron kezdetben gerjesztett energiasajátállapotban van, amelyben a töltéseloszlás időben állandó, miért kezdi el kisugározni energiáját, visszatérve az alapállapotba vagy egy alacsonyabban gerjesztett állapotba. A jelenség kulcsa a kvantált elektromágneses mező aktív szerepe; ezt tekintjük át most röviden. Az elméletet az Olvasó részletesebben részecskefizikai könyvekből⁴ (igen, a foton is egy „részecske”), vagy a kvantumoptika irodalmából⁵ ismerheti meg. Az alábbiakban feltételezzük a klasszikus elektrodinamika elméletének (Maxwell–egyenletek) ismeretét.

Az egyszerű eredményekhez a leggyorsabb út a *Coulomb–mérték* választásán át vezet: használjunk divergenciamentes vektorpotenciált, vagyis legyen $\nabla \cdot \vec{A} = 0$. Ezzel összhangban, legyen a skalár potenciál a töltésekhez „hozzáfagyott” Coulomb–erő potenciálja, ami a tiszta sugárzási térben nulla ($\phi = 0$). Ekkor a közvetlen mérhető elektromos és mágneses térerősségek

⁴ Lásd pl. a [13] tankönyvet.

⁵ A legelterjedtebb tankönyv: [20].

így adódnak:

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}; \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (8.24)$$

Miért került ez a témakör a harmonikus oszcillátorról szóló fejezetbe? Azért, mert a „szabad”, tehát a sugárzó-elnyelő testeket nem tartalmazó sugárzás felbontható egy véges térfogat (rezonátor, vagy akár csak elképzelt, véges de nagy doboz) *normál módusainak* teljes rendszere szerint:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_l A_l(t) \vec{u}_l(\vec{r}), \quad (8.25)$$

ezek a normál módusok pedig a

$$\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = c^2 \Delta \vec{A} \quad (8.26)$$

hullámegyenlet⁶ $\vec{u}_l(\vec{r}) \sin(\omega_l t + \phi_l)$ alakban harmonikusan oszcilláló megoldásai. Helyfüggő részeik, az $\vec{u}_l(\vec{r})$ *módusfüggvények* a

$$(\Delta + k_l^2) \vec{u}_l(\vec{r}) = 0; \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_l(\vec{r}) = 0 \quad (8.27)$$

vektori hullámegyenlet transzverzális megoldásai; ezek a $k_l^2 = \omega_l^2/c^2$ összefüggésen keresztül kapcsolódnak az oszcilláló időfüggéshez. Az $\vec{u}_l(\vec{r})$ függvények a rezonátor vagy doboz határán fizikai eredetű határfeltételeknek tesznek eleget; ezek választják ki a módusokat és azok ω_l sajátfrekvenciáit. Az l indexszel különböztetjük meg a különböző helyfüggésű és/vagy különböző polarizációjú módusokat.

Az egyszerűség kedvéért először egy zárt rezonátor esetét számoljuk végig, amelyben állóhullámok alakulnak ki. Az ennek megfelelő módusfüggvények valóságosak, és mivel maga az $\vec{A}(\vec{r}, t)$ vektorpotenciál valós, így valóságosak lesznek az $A_l(t)$ módusamplitúdók is.

A különböző ω_l frekvenciákhoz tartozó módusok ortogonálisak és normáltak:

$$\int \vec{u}_l(\vec{r}) \cdot \vec{u}_{l'}(\vec{r}) d^3r = \delta_{ll'}. \quad (8.28)$$

A frekvenciában elfajult módusokból választható ortonormált bázis.

A (8.25) sorfejtést behelyettesítve a (8.26) hullámegyenletbe és kihasználva a (8.28) ortonormáltsági összefüggést, a módusok különválnak, és független harmonikus oszcillátorok mozgásegyenletét kapjuk:

$$\ddot{A}_l = -\omega_l^2 A_l. \quad (8.29)$$

⁶ $c^2 = 1/(\epsilon_0 \mu_0)$, ahol ϵ_0 és μ_0 a vákuum dielektromos állandója, ill. mágneses permeabilitása

Hogy az oszcillátor-módusok kvantumos viselkedését feltárjuk, rakjuk össze ezekből a módusokból az elektromágneses mező energiájának ismert kifejezését, újra használva az ortonormáltságot, valamint a térmennyiségeket a vektorpotenciálra visszavezető (8.24) összefüggéseket:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \int \left(\frac{\epsilon_0}{2} |\vec{E}|^2 + \frac{1}{2\mu_0} |\vec{B}|^2 \right) = \frac{\epsilon_0}{2} \sum_l (\dot{A}_l)^2 + \sum_l \frac{k_l^2}{2\mu_0} A_l^2 \\ &= \sum_l \left[\frac{\epsilon_0 (\dot{A}_l)^2}{2} + \frac{\epsilon_0 \omega_l^2 A_l^2}{2} \right] \end{aligned} \quad (8.30)$$

Álljunk meg egy pillanatra: hiszen ha itt ϵ_0 helyébe egy m tömeget gondolunk, akkor minden tag pontosan egy harmonikus oszcillátor energiája, kifejezve az A_l koordinátával és az \dot{A}_l sebességgel. Akkor viszont, $p_x = m\dot{x}$ analógiájára,

$$\pi_l = \epsilon_0 \dot{A}_l \quad (8.31)$$

az A_l koordinátához kanonikusan konjugált impulzus.

Innen már egyenes út vezet a kvantumelmülethez: az $A_l(t)$ és $\pi_l(t)$ klaszikus mennyiségek helyett vezessünk be \hat{A}_l és $\hat{\pi}_l$ operátorokat, amelyek kielégítik a

$$[\hat{\pi}_l, \hat{A}_l] = \frac{\hbar}{i} \quad (8.32)$$

felcserélési relációt.

A továbbiakban csak a 8.1. pont menetét kell követnünk, és eljutunk a Hamilton-operátor

$$\hat{H} = \sum_l \left(\frac{\hat{\pi}_l^2}{2\epsilon_0} + \frac{\epsilon_0}{2} \omega_l^2 \hat{A}_l^2 \right) = \sum_l \hbar \omega_l \left(\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l + \frac{1}{2} \right) \quad (8.33)$$

kifejezéséhez, ahol bevezettük az l -edik módus

$$\hat{a}_l = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \omega_l}{2\hbar}} \left(\hat{A}_l + \frac{i}{\epsilon_0 \omega_l} \hat{\pi}_l \right) \quad (8.34)$$

eltüntető operátorát és

$$\hat{a}_l^\dagger = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \omega_l}{2\hbar}} \left(\hat{A}_l - \frac{i}{\epsilon_0 \omega_l} \hat{\pi}_l \right) \quad (8.35)$$

keltő operátorát, amelyek felcserélési relációja

$$[\hat{a}_l, \hat{a}_l^\dagger] = 1. \quad (8.36)$$

Ennek felhasználásával

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{a}_l &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{a}_l] = -i\omega_l\hat{a}_l, \\ \frac{d}{dt}\hat{a}_l^\dagger &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{a}_l^\dagger] = i\omega_l\hat{a}_l^\dagger,\end{aligned}\quad (8.37)$$

amiből a megfelelő Heisenberg-képbeli időfüggő operátorok:

$$\hat{a}_l(t) = \hat{a}_l e^{-i\omega_l t}; \quad \hat{a}_l^\dagger(t) = \hat{a}_l^\dagger e^{i\omega_l t}.\quad (8.38)$$

A (8.34) és (8.35) egyenletekből kifejezve az \hat{A}_l operátort és behelyettesítve a (8.25) sorfejtésbe, végül áttérve a keltő és eltüntető operátorok Heisenberg-képbeli alakjára, megkapjuk az $\vec{A}(\vec{r}, t)$ vektorpotenciálnak megfelelő Heisenberg-operátort:

$$\hat{A}(\vec{r}, t) = \sum_l \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_l}} \left[\hat{a}_l e^{-i\omega_l t} + \hat{a}_l^\dagger e^{i\omega_l t} \right] \vec{u}_l(\vec{r}).\quad (8.39)$$

A (8.24) reláció segítségével azonnal adódik az elektromos térerősség Heisenberg-operátora is:

$$\hat{E}(\vec{r}, t) = i \sum_l \sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{2\varepsilon_0}} \left[\hat{a}_l e^{-i\omega_l t} - \hat{a}_l^\dagger e^{i\omega_l t} \right] \vec{u}_l(\vec{r}).\quad (8.40)$$

Említsük meg még, hogy a fenti eljárást végig lehet csinálni haladó hullámmódusokkal is, amelyeknek komplex módusfüggvények felelnek meg. Gondosan kézben tartva a vektorpotenciál és az elektromos térerősség valós, ill. operátoruk önadjungált voltát, és a valós kombinációk között keresve meg a kanonikusan konjugált változó párokat, a végeredmény alig változik; (8.39) ill. (8.40) helyett ezt kapjuk:

$$\begin{aligned}\hat{A}(\vec{r}) &= \sum_l \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_l}} \left[\hat{a}_l e^{-i\omega_l t} \vec{u}_l(\vec{r}) + \hat{a}_l^\dagger e^{i\omega_l t} \vec{u}_l^*(\vec{r}) \right]; \\ \hat{E}(\vec{r}) &= i \sum_l \sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{2\varepsilon_0}} \left[\hat{a}_l e^{-i\omega_l t} \vec{u}_l(\vec{r}) - \hat{a}_l^\dagger e^{i\omega_l t} \vec{u}_l^*(\vec{r}) \right].\end{aligned}\quad (8.41)$$

A sugárzás és a töltött anyag kölcsönhatásának leírásában ezek az operátorok lépnek a klasszikus vektorpotenciál, ill. elektromos térerősség helyére. A fény hullámhosszához (100 – 1000 nm) képest kisméretű tárgyak (atomok,

nem túl nagy molekulák) esetén a kölcsönhatás Hamilton-operátorára alkalmazható a dipólközelítés; ennek érvényességi határain belül az alábbi két kifejezés ekvivalens:

$$\hat{H}_{kölcs} = \hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = -\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{E}}. \quad (8.42)$$

Jegyezzük meg, hogy a vektorpotenciál, ill. a térerősség *lineárisan* tartalmazza a keltő és eltüntető operátorokat, ami szemléletes matematikai formában fejezi ki azt a tényt, hogy töltött részecskék a kölcsönhatás során fotonokat sugároznak ki és nyelnek el. Ugyanez arra is utal, hogy amikor a klasszikus elektrodinamikának megfelelő térerősségeket észlelünk, ott mindig koherens állapotok vannak jelen; fotonszám-sajátállapot nem lehet, mert abban a térerősségek átlaga 0.

A sugárzási folyamatokra a 13. fejezetben térünk vissza, felvértezve a perturbációszámítás eszközeivel, hiszen a töltések és áramok jelenléte az elektromágneses mező megzavarását, közkeletű latin szóval: perturbációját jelenti.

Most nézzük meg alaposabban a perturbálatlan („szabad”) elektromágneses mező állapotait. A (8.33) Hamilton-operátor sajátértékei nyilvánvalóan

$$E_{n_1, n_2, \dots} = \sum_l \hbar \omega_l \left(n_l + \frac{1}{2} \right), \quad (8.43)$$

szavakban kimondva: az l -edik módusban n_l foton található; ezek energiájából tevődik össze a szabad elektromágneses mező energiája. A formulától egyenes út vezet a Planck-féle sugárzási törvényhez, mivel a „zérusponti rezgésnek” megfelelő $1/2$ tagok csak az energia skáláját tolják el.⁷

Ennyi számolás után jogot szereztünk, hogy megkérdezzük: mi hát a foton? Vagy helyesebben szólva: mi hát *egy* foton?

A kérdés némiképpen filozofikus, és a válasz is az. Egy foton: amiben egy módus egyfoton-állapota különbözik a nullafoton-állapotától. Más szóval: maga a tárgynak tekintett *gerjesztés*. De lehet a gerjesztést tárgynak tekinteni?

Miért ne? Energiája van; ha a módus haladó hullám, akkor impulzusa is van; a módus polarizációjától függően spinje, helyfüggése szerint még pálya-impulzuszórája is van. Nyugalmi tömege (a relativitás elméletének értelmében) éppen nincs, de ez csak azon múlik, hogy energiája és

⁷ A (8.43) energiasajátérték-formula egyaránt érvényes valós vagy komplex módusfüggvények használata mellett.

impulzusa között a kapcsolat lineáris. Persze ezen az esetlegességen múlik a fény alapvető tulajdonsága: a fény – más szóval: a fotonok – szabad keletkezése és elnyelődése.

Most jön a beugrató kérdés: akkor hát mi *két* foton?

Ezt már sokkal nehezebb megválaszolni. A kérdéssel van a hiba: egy oszcillátor második gerjesztett állapotának hullámfüggvénye nyilván nem két első gerjesztett állapot valamiféle összege, hanem valami egyedi tárgy: egy *kétfoton*. Ugyanez vonatkozik a mező olyan állapotára is, amelyben két módus a maga első gerjesztett állapotában, a többi módus alapállapotban található. Hullámcsomagok alakjában ebből két fotonszerű tárgy még szétfuthat akár száz kilométerre is, de az egész akkor is egy darab kétfoton marad, egyedi korrelációkkal a két szétfutott fotonszerű tárgy között. Erről szólnak a híres EPR-korrelációk és a Bell-egyenlőtlenségek, lásd a 15.10. pontot.

Az egyfoton- és kétfoton-állapotok az utóbbi években kísérleti realitást nyertek azáltal, hogy egyre megbízhatóbb egyfoton- és kétfoton-források, és ezzel párhuzamosan, egyfoton- és kétfoton-detektorok jöttek létre.

Kezdjük a detektorokkal. A *fotoelektron-sokszorozó* nem újdonság, *Bay Zoltán* ötletéből jött létre az 1940-es évek végén. Elve az, hogy egy foton által kiváltott fotoelektron nagy feszültséggel való felgyorsítás után becsapódva, egy fémfelületből néhány másodlagos elektront szakít ki, kinetikus energiájából fedezve azok kilépési munkáját. Ezt sokszor ismételve egy hosszú vákuumcső mentén, az elektronok lavinaszerűen szaporodnak, míg végül az anódon mérhető áramlökés jelenik meg. Ugyanennek jóval fiatalabb, félvezető alapú változata a *lavina-fotodióda*, ahol az ugyancsak feszültséggel gyorsított elektronok nem felületi becsapódással, hanem sáv-sáv átmenetekkel hozzák létre a másodlagos elektronok lavináját.

Ami miatt az igazi egyfotondetektálás mégis nehéz dolog, az mindenekelőtt a detektorok véges reakcióideje: ha a fotonok véletlenszerűen, Poisson-eloszlás szerint érkeznek, akkor távolról sem elhanyagolható annak valószínűsége, hogy egy elektronlavina végigfutása alatt több foton csapódik be, ezeket pedig a detektor nem tudja megkülönböztetni. Az utóbbi évek újdonsága az a technika, hogy a bejövő fotonok áramát üvegszál-nyalábosztókon sokszorososan szétválasztva sok detektor felé küldik szét, amivel drasztikusan lecsökkenthető a majdnem-egybeesések miatt elmulasztott detektálások száma. Megmarad azonban az a tény, hogy az elinduló elektronlavinák nem mindig fejlődnek ki, így a detektorok hatásfoka valahol 50–80 % között van. Ehhez járul még a foton nélkül, termikus gerjesztésre elinduló lavinák lehetősége: a detektorok „sötétzaja”. Emiatt, bár a fotonok sokkal könnyebben kezelhetők, mint bármi más részecskefajta, a fotonokkal végrehajtott kísér-

letekben mindig jelen van a detektálásból eredő hiba, ami megnehezítheti az eredmények értelmezését.

A Poisson-eloszlás „foton-csoportosulási” hajlama miatt tehát az intenzitás lecsökkentésével *nem* lehet megbízható egyfoton-forrást készíteni. Az egyfoton-források mai viharos fejlődése a *kétfoton-forrásokkal* kezdődött: a „paraméteres lekonvertálásnak” nevezett nemlineáris optikai folyamatban egy ω frekvenciájú lézerrel gerjesztett kristályból páros spontán emisszióval egyszerre két $\omega/2$ frekvenciájú foton lép ki,⁸ amelyek együtt egy jóldefiniált kétfoton-állapotot alkotnak. Ennek kiaknázása kvantummechanikai alapki-sérletek céljaira *P. Mandel* munkáival kezdődött az 1980-as években. Ekkor merült fel az első megbízható egyfoton-források ötlete is: ha a fotonpár egyik tagját egy detektor jelzi, akkor ami ezzel egyidejűleg (koincidenciában) az optikai rendszer másik ágán történik, azt nagy valószínűséggel a *másik* foton váltja ki.⁹ Ezek a véletlenszerű pillanatokban emittáló, de a társfoton által „bejelentett” (angolul: „heralded”) egyfoton-források az utóbbi években fokozatosan átadják helyüket a „megrendelésre” (angolul: „on demand”) működő forrásoknak: ezek többnyire egy csapdázott atomot vagy félvezető kvantumpöttyöt „hangolva”, azt gerjesztett állapotba, majd adott pillanatban rezonanciába hozzák az őt körülvevő optikai rezonátorral; ebben a pillanatban bekövetkezik az emisszió. Tudni kell azonban, hogy ezek drága és egyelőre csak laboratóriumi célokra használható eszközök; a gyakorlati alkalmazások többnyire még mindig az intenzitás lecsökkentésével közelítik meg az egyfoton-állapotokat, küszködve a Poisson-eloszlás mellékhatásaival.

Hogy egyfoton- és kétfoton-állapotok preparálása és detektálása ekkora feladatot jelent, az csak alátámasztja, hogy egyes fotonok ritkán fordulnak elő világunkban: a fotonszám-sajátállapotok (más szóval: *Fock-állapotok*) csak afféle koordinátarendszert jelentenek; a valóságos fény ezek szuperpozícióiból, leggyakrabban koherens állapotokból épül fel.

⁸ Ilyen *klasszikus* nemlineáris optikai folyamat nem létezik: nemlinearitással frekvenciát duplázni lehet, felezni nem. A spontán emisszió (lásd a 13.3. pontot) tipikus kvantumjelenség.

⁹ Ahogy a régi vicc mondja: Hogy fogjunk egy oroszlánt? Egyszerű: fogjunk kettőt és az egyiket eresszük el.

9. fejezet

Impulzusmomentum a kvantummechanikában

A kvantummechanika a hidrogénatomból született. A hidrogénatom gömbölyű, és ennek messzemenő következményei vannak: a háromdimenziós tér legerősebb szimmetriája nyomot hagy az atomos hidrogén minden megfigyelhető tulajdonságán. Ennek háttere a hidrogénatom Schrödinger-egyenletének Schrödinger által talált megoldásában tisztázódott. A kapcsolatot már ismerjük: a forgásnak megfelelő unitér transzformációnak generátora az impulzusmomentum (perdület); forgásszimmetrikus rendszerben az impulzusmomentum mozgásállandó. A részletek most következnek.

Az impulzusmomentumnak van még egy alapvető szerepe: az elemi részecskéknél a pályamozgástól független saját impulzusmomentuma, *spinje* van; ennek felderítése a kísérletektől és az első fenomenológiai elméleti leírásoktól az algebrai-csoportelméleti megfontolások diadalmas térnyerésén keresztül vezetett az impulzusmomentum mindenütt megjelenő hatásainak tisztázásáig. Ezzel egy következő fejezetben foglalkozunk.

9.1. A pálya-impulzusmomentum operátora; az impulzusmomentum felcserélési relációi

Transzlációs-szimmetrikus potenciálban nincs erő, emiatt a teljes impulzus megmarad. Forgásszimmetrikus potenciálban nincs forgatónyomaték, emiatt a teljes impulzusmomentum megmarad.

Klasszikus mechanikában egy pontszerű test impulzusmomentuma:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}. \quad (9.1)$$

Ismerjük \vec{r} és \vec{p} operátorát; ezeket a fenti formulába beírva, megkapjuk egy részecske impulzusmomentumának kvantummechanikai operátorát. Általában a hely és impulzus operátorai nem felcserélhetők, ezért meg kellene küzdenünk a helyes sorrend kiderítésének problémájával, de ez magától

megoldódik a vektorszorzat szerkezte miatt:

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\
 \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\
 \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi},
 \end{aligned} \tag{9.2}$$

hiszen az egymásra merőleges koordináta- és impulzuskomponensek mindig felcserélhetők.

A utolsó sorbeli egyenlőség levezetése a következő: hengerkoordinátákra áttérve, a φ változó a z tengely körüli elfordulás szöge, $x = r \cos \varphi$ és $y = r \sin \varphi$. Tekintsünk egy $f(x, y) = f(r, \varphi)$ függvényt; ennek megváltozása a z tengely körüli elforgatáskor

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} \Big|_r = \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_y \frac{\partial x}{\partial \varphi} \Big|_r + \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_x \frac{\partial y}{\partial \varphi} \Big|_r = \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) f. \tag{9.3}$$

Alapvetően fontos feladat az impulzusmomentum-komponensek kommutátorainak kiszámítása. Természetesen most is abból indulunk ki, hogy $[\hat{p}_k, \hat{r}_l] = (\hbar/i) \delta_{kl}$; $[\hat{r}_k, \hat{r}_l] = [\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0$, ahol $(k, l) = x, y, z$.

Fogjunk hozzá! $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = (\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_y) [p_z, z]$ (nyolc tagból négy kiesett) $= -\hat{L}_z(\hbar/i)$. A végeredmény, ciklikusan permutálva az indexek között:

$$\begin{aligned}
 [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{L}_z \\
 [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\
 [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y,
 \end{aligned} \tag{9.4}$$

ami tömören így is írható:

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = \varepsilon_{jkl} i\hbar \hat{L}_l, \tag{9.5}$$

ahol a „teljesen antiszimmetrikus tenzor” $\varepsilon_{jkl} = \pm 1$ aszerint, hogy (j, k, l) páros vagy páratlan permutációja az x, y, z indexeknek, és $\varepsilon_{jkl} = 0$, ha két vagy mindhárom indexe megegyezik.

Azt kaptuk tehát, hogy az impulzusmomentum komponensei általában nem felcserélhetők; ahogy már a 7.6. pontban megbeszéltük, ez abból ered,

hogy a különböző tengelyek körüli elforgatások sem felcserélhetők, eredményük függ az elvégzés sorrendjétől. Az itt levezetett felcserélési relációk ezt a geometriai tartalmat tükrözik, és függetlenek az adott fizikai levezetéstől. Ez azért fontos, mert a felcserélési relációkon keresztül juthatunk el majd a pályamozgás nélküli perdület: a spin megértéséhez.

Következő feladatunk az $\hat{L}^2 \equiv \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ operátor kommutátorainak kiszámolása. Nézzük pl. ezt: $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x \hat{L}_x, \hat{L}_z]$. Az eredményt úgy kapjuk meg, ha \hat{L}_z -t két lépésben a jobbszélről átvisszük a balszélre, és minden lépésben hozzáadjuk a megfelelő kommutátort. Ilyen lépéseket végrehajtva kapjuk meg a fontos végeredményt:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0. \quad (9.6)$$

Az impulzusmomentum négyzetének operátora tehát az impulzusmomentum vektoroperátorának minden komponensével, minden vetületével felcserélhető, de a komponensek egymás között nem.

Az impulzusmomentumról tanultakat különböző mértékben forgásszimmetrikus Schrödinger-egyenletek megoldásánál szeretnénk hasznosítani, olyan alakban keresve az energiasajátfüggvényeket, hogy azok mindjárt a megfelelő forgás unitér operátorának, tehát a megfelelő impulzusmomentum-operátoroknak is sajátfüggvényei legyenek. A fenti eredményekből az következik, hogy nem kaphatunk meg mindent: az impulzusmomentum mindhárom komponensének közös sajátfüggvényei általában nem léteznek; a legtöbb, ami elérhető: \hat{L}^2 és egy önkényesen választott komponens, többnyire \hat{L}_z közös sajátfüggvényeiként keressük a Schrödinger-egyenlet megoldásait.

Az előző hosszú mondat közepén nem véletlenül volt ott az „általában” szó. Van egy kivétel: a teljesen gömbszimmetrikus hullámfüggvény mindhárom impulzusmomentum-komponensnek 0 sajátértékhez tartozó, közös sajátfüggvénye. Nincs baj a felcserélési relációkkal; ilyenkor a jobboldalon is 0 áll.

9.2. Schrödinger-egyenlet hengersizmetrikus potenciállal: a Bohr-féle kvantumfeltétel

Keressük az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásait olyan potenciális energia jelenlétében, amely a z tengely körüli elforgatással nem változik, vagyis hengersizmetrikus.¹ Ilyenkor célszerű az x , y , z derékszögű koordinátákról áttérni az r , z , φ hengerkoordinátákra; a hengersizmetria azt jelenti, hogy a potenciál a szögkoordinátától nem függ, tehát $V(r, z)$ alakban

¹ Ugyanezt a fogalmat jelenti a párhuzamosan létező „tengelyszimmetrikus” szó is

írható. Persze ilyenkor a Schrödinger-egyenlet kinetikus energia tagjában szereplő Laplace-operátort is át kell írni hengerkoordinátákba: a megoldandó parciális differenciálegyenlet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V(r, z) \right] \phi(r, z, \varphi) = E \phi(r, z, \varphi). \quad (9.7)$$

(a tömeget mostantól M -mel jelöljük, mert m egy impulzusmomentumhoz kapcsolódó kvantumszám szerepét kapja meg).

Vegyük észre, hogy a baloldalon szereplő szög szerinti derivált az impulzusmomentum operátorával van közvetlen kapcsolatban: $\partial^2/\partial\varphi^2 = -\hbar^{-2}\hat{L}_z^2$. Ezért a fenti egyenlet így is írható:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r, z) + \frac{\hat{L}_z^2}{2M r^2} \right] \phi(r, z, \varphi) = E \phi(r, z, \varphi). \quad (9.8)$$

A potenciális energiára emlékeztető, de az impulzusmomentumtól függő $(L_z)^2/(2M r^2)$ tagról könnyű belátni, hogy ez a *centrifugális erő* potenciálja, ha ezt az erőt nem a rosszul definiált sebesség függvényeként, hanem a megmaradás által élesen meghatározott impulzusmomentum függvényében, $(L_z)^2/Mr^3$ alakban adjuk meg.

A (9.8) alakról már nyilvánvaló, hogy \hat{L}_z megmaradó mennyiség: ami a szögletes zárójelben részletezett \hat{H} -operátorból nem \hat{L}_z függvénye, az φ -től nem függ, és azért felcserélhető \hat{L}_z -vel. Emiatt \hat{H} sajátfüggvényeit lehet és célszerű is olyan alakban keresni, hogy mindjárt \hat{L}_z -nek is sajátfüggvényei legyenek.

Mivel koordináta-reprezentációban $\hat{L}_z = (\hbar/i) \partial/\partial\varphi$, vagyis ez az operátor a három koordináta közül csak φ -re hat, egy háromváltozós hullámfüggvény csak akkor lehet sajátfüggvénye \hat{L}_z -nek, ha φ -függése *szeparálódik*, vagyis szorzatalakba válik szét:

$$\phi(r, z, \varphi) = g(\varphi) f(r, z), \quad (9.9)$$

ahol $g(\varphi)$ sajátfüggvénye \hat{L}_z -nek, $f(r, z)$ pedig \hat{L}_z alatt konstans szorzóként viselkedik.

Keressük meg \hat{L}_z sajátértékeit és sajátfüggvényeit!

$$\frac{\hbar}{i} \frac{dg(\varphi)}{d\varphi} = \lambda_z g(\varphi). \quad (9.10)$$

Ennek a differenciálegyenletnek bármilyen λ_z érték mellett van megoldása:

$$g(\varphi) = e^{\frac{i}{\hbar} \lambda_z \varphi}. \quad (9.11)$$

Az \hat{L}_z operátor λ_z sajátértékekét a határfeltételek választják ki; szögkoordinátáról lévén szó, a határfeltétel az a követelmény, hogy a függvény *egyértékű*, vagyis 2π szerint periodikus legyen. Ez csak akkor teljesül, ha $\lambda_z/\hbar = m$ egész szám (negatív vagy 0 is lehet), vagyis \hat{L}_z sajátértékei:

$$\lambda_z = m \hbar; \quad m = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (9.12)$$

Vegyük észre, hogy ez éppen a Bohr-féle kvantumfeltétel, a levezetés pedig lényegében a de Broglie-féle meg gondolás, a hengersizmetrikus Schrödinger-egyenletre alkalmazva. A megfelelő sajátfüggvény:

$$g_m(\varphi) = e^{i m \varphi}. \quad (9.13)$$

Visszatérve a (9.8) teljes Schrödinger-egyenletre, a hengersizmetriából annyit nyertünk, hogy L_z megmaradása miatt a különböző m sajátértékekhez tartozó $g_m(\varphi) f_m(r, z)$ szorzatalakú sajátfüggvényekre különálló egyenleteket kapunk, amelyekben \hat{L}_z helyett a megfelelő sajátérték, $m \hbar$ jelenik meg. Az egyenlet a szögfüggő tényezővel egyszerűsíthető, és három helyett két változós, tehát könnyebben megoldható egyenletünk marad:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r, z) + \frac{(m \hbar)^2}{2M r^2} \right] f_m(r, z) = E f_m(r, z). \quad (9.14)$$

Ez az egyenlet tartalmazza az impulzusmomentumtól függő centrifugális potenciált. Megoldásának további menete a $V(r, z)$ hengersizmetrikus potenciál részleteitől és az $f_m(r, z)$ radiális-axiális hullámfüggvényre vonatkozó további határfeltételektől függ.

9.3. Schrödinger-egyenlet centrális erőterben: az energiasajátfüggvények szögfüggése

Áttérünk a gömbszimmetrikus $V(r)$ potenciál és a hozzá tartozó, az origó felé mutató centrális erőterre. Ilyen potenciál hat a hidrogénatomban az elektróra; ez volt Schrödinger első komoly erőpróbája; ezzel kezdődött a kvantummechanika diadalmenete.

Gömbszimmetrikus esetben a teljes impulzusmomentum megmarad; ennek megfelelően a szögfüggés sokkal gazdagabb változatosságot mutat, mint a hengersizmetria esetén. Ebben a változatosságban viszont nem kell kézimunkára hagyatkoznunk, hanem használhatjuk a gömbfüggvények jól ismert

matematikai eszköztárát.² Először ezzel a kapcsolódással kell megismerkednünk.

Természetesen most a Schrödinger-egyenletet gömbi koordinátákban írjuk fel:³

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\varphi, \vartheta} \right) + V(r) \right] \phi(r, \varphi, \vartheta) = E \phi(r, \varphi, \vartheta), \quad (9.15)$$

ahol bevezettük a „szög szerinti Laplace-operátort”:

$$\Delta_{\varphi, \vartheta} := \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (9.16)$$

Nem véletlen, hanem a gömbszimmetria játszótérén való összetalálkozása jó fizikának a jó matematikával, hogy most is ugyanolyan szerencsénk van, mint a hengersizimmetria esetében: ha az \hat{L}^2 operátort türelmes helyettesítések sorával átírjuk gömbi koordinátákba, kiderül, hogy

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\varphi, \vartheta}, \quad (9.17)$$

úgy, hogy mindaz, amit a szög szerinti Laplace-operátor sajátfüggvényeiről és sajátértékeiről tudunk, egy szempillantás alatt kvantummechanikai tudássá válik.⁴

Ez pedig nem kevés; álljon itt egy minimális felsorolás: jól ismerjük az

$$Y_{l,m}(\varphi, \vartheta) = N_{l,m} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \vartheta) \quad (9.18)$$

gömbfüggvényeket, ahol az

$$N_{l,m} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \times \begin{cases} (-1)^m, & \text{ha } m \geq 0, \\ 1, & \text{ha } m < 0 \end{cases} \quad (9.19)$$

normálási tényező biztosítja az

$$\int Y_{l,m}(\varphi, \vartheta) Y_{l',m'}(\varphi, \vartheta) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (9.20)$$

² Ez az elméleti fizikában szokásos hozzáállás; jobb előbb megszokni, mint később. Aki az elektrodinamikából [14] nemcsak a Maxwell-egyenleteket ismeri, de az alkalmazások sokaságán is átrágtta magát, annak mindez nem lesz új.

³ Ez nem a legszokásosabb írásmódja a Laplace-operátor radiális részének, de igaz, ha figyelembe vesszük, hogy a deriválás mindenre hat, ami tőle jobbra van, beleértve a hullámfüggvényt is.

⁴ Matematikus barátaim kedvéért nem írtam „vállik” helyett azt, hogy „nemesül”.

ortonormálási relációt, amelyben $\int \dots d\Omega$ a teljes térszögre való integrálást jelenti. A (9.18) formulában P_l^m az „asszociált Legendre-polinom”:

$$P_l^m(\cos \vartheta) = (\sin \vartheta)^{|m|} \frac{\partial^{|m|}}{\partial (\cos \vartheta)^{|m|}} P_l(\cos \vartheta), \quad (9.21)$$

végül $P_l(y)$ az l -edfokú ($l = 0, 1, 2, \dots$) *Legendre-polinom*, az ortogonális polinomok népes családjának legegyszerűbb tagja, a következő normálással:

$$\int_{-1}^1 P_l(y) P_{l'}(y) dy = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}. \quad (9.22)$$

Az l -edfokú polinom $|m|$ -edik deriváltja miatt P_l^m csak addig nem 0, ameddig $|m| \leq l$, vagyis $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$.

A kulcseredmény pedig, amely mindezt a gömbölyű tárgyak, köztük a hidrogénatom kvantummechanikájához kapcsolja, a következő:

$$\begin{aligned} \Delta_{\varphi, \vartheta} Y_{l,m}(\varphi, \vartheta) &= -l(l+1) Y_{l,m}(\varphi, \vartheta) \\ &\Rightarrow \hat{L}^2 Y_{l,m}(\varphi, \vartheta) = l(l+1) \hbar^2 Y_{l,m}(\varphi, \vartheta); \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{l,m}(\varphi, \vartheta) &= im Y_{l,m}(\varphi, \vartheta) \\ &\Rightarrow \hat{L}_z Y_{l,m}(\varphi, \vartheta) = m \hbar Y_{l,m}(\varphi, \vartheta) \end{aligned} \quad (9.23)$$

(a második tulajdonság ránézésre is látható trivialisitás, de fizikailag fontos).

Foglaljuk össze szavakban is: az $Y_{l,m}$ gömbfüggvények sajátfüggvényei

- az impulzusmomentum nagyságát mérő \hat{L}^2 operátornak, $l(l+1)\hbar^2$ sajátértékkel; az ezt indexelő l szám neve: *mellékkvantumszám*;
- az impulzusmomentum-vektornak egy önkényesen választott z irányra való vetületét mérő \hat{L}_z operátornak, $m \hbar$ sajátértékkel; m neve *mágneses kvantumszám*. Az azonos l -hez, de különböző m -hez tartozó energiasajátállapotok elfajultak (energiasajátértékük megegyezik) a gömbszimmetria miatt, amely megtiltja, hogy valami egy önkényes iránytól függjön; külső mágneses térben, amely viszont kijelöl egy irányt a térben, az elfajulás megszűnik, az energiaszintek szétválnak. Ezt hívjuk *Zeeman-effektusnak*; részletesebben lásd a 11.1. pontban.

Az, hogy az impulzusmomentum maximális vetülete, $\hbar l$ rövidebb, mint a vektor hossza, $\sqrt{\hbar^2 l(l+1)}$, a kvantummechanika egyik korai meglepetése

volt. Úgy szokás értelmezni, hogy a vektor nem állhat teljesen párhuzamosan a z tengellyel, hiszen akkor mindhárom komponense teljesen határozott lenne, ellentétben a felcserélési relációkkal.

Használjuk fel, amit kaptunk! Szeparáljuk a hullámfüggvényt egy szögfüggő impulzusmomentum-sajátfüggvény és egy radiális hullámfüggvény szorzatára:

$$\phi(r, \varphi, \vartheta) = Y_{l,m}(\varphi, \vartheta) R_l(r). \quad (9.24)$$

Ezt behelyettesítve a (9.15) egyenletbe és felhasználva a (9.17), (9.23) eredményeket, a Schrödinger-egyenlet szétválik a megmaradó impulzusmomentum l, m kvantumszámairól szóló sajátfüggvényekre; a szögfüggő tényezővel egyszerűsítve, megkapjuk a *radiális Schrödinger-egyenletet*:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r) \right] R_l(r) = E R_l(r), \quad (9.25)$$

ahol felismerhetjük a hengersizmetrikus esetben már megismert centrifugális potenciált, a gömbszimetriának megfelelő impulzusmomentum-sajátértékkel.

A radiális Schrödinger-egyenlet megoldásai a $V(r)$ potenciál részleteitől és a radiális hullámfüggvényre vonatkozó határfeltételektől függenek. A hidrogénatom konkrét példáját a következő fejezet mutatja be.

Nem felületesség, hanem roppant fontos körülmény, hogy a radiális hullámfüggvényt nem $R_{l,m}(r)$, hanem egyetlen indextől függő $R_l(r)$ alakba írtuk. Ez fizikailag indokolt előrelátása volt annak a ténynek, hogy a (9.25) egyenletben az \hat{L}_z -re utaló m mágneses kvantumszám nem jelenik meg; a centrifugális potenciál csak az \hat{L}^2 -hez tartozó l mellékkvantumszámot tartalmazza. Ennek oka, amint már említettük, a gömbszimmetria: az energiasajátértékek nem is függhetnek az impulzusmomentum vektorának irányától, csak az abszolút értékétől.

9.4. Szimmetria és szimmetriasértés: paritás; mágneses kvantumszám *kontra* propellerek és dáiák

Ismerkedjünk a gömbfüggvények természetrajzával! Először intézzük el a (9.18) függvények viselkedését a gömb középpontjára való tükrözéskor. Három dimenzióban, derékszögű koordinátákban ez mindhárom koordináta előjelváltását, gömbi koordinátákban pedig a

$$\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta; \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi \quad (9.26)$$

helyettesítést jelenti. Ilyenkor a következő változások történnek a gömbfüggvények tényezőiben:

$$\begin{aligned} e^{im\varphi} &\rightarrow e^{im\varphi} (-1)^{|m|}; \\ \cos(\vartheta) &\rightarrow -\cos(\vartheta) \Rightarrow \\ P_{l,m}(\cos \vartheta) &\rightarrow P_{l,m}(\cos \vartheta) (-1)^{l-|m|}. \end{aligned} \quad (9.27)$$

Ezeket összeszorozva azt kapjuk, hogy tértükrözéskor

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \rightarrow Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) (-1)^l, \quad (9.28)$$

vagys a gömbfüggvények paritását egyedül az l kvantumszám párossága határozza meg. Ez az eredmény fontos lesz a kiválasztási szabályok tárgyalásában (lásd a 13.3. pont végén).

Az $l = 0$, teljesen gömbszimmetrikus $Y_{0,0} \equiv 1/\sqrt{4\pi}$ hullámfüggvényeket hagyományosan s -pályáknak nevezzük,⁵ az $l = 1$ -eseket p -pályáknak⁶, az $l = 2$ -eseket d -pályáknak⁷.

A legegyszerűbb nemtriviális példát a p -pályák jelentik:

$$\begin{aligned} Y_{1,0}(\varphi, \vartheta) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \equiv p_z(\varphi, \vartheta), \\ Y_{1,\pm 1}(\varphi, \vartheta) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \vartheta. \end{aligned} \quad (9.29)$$

Az elsőnek tényleg propellerformája van, a másodikoknak inkább úszógumi. A két utóbbiból azonban könnyű valós lineáris kombinációkat készíteni, amelyek már propellerek:

$$\begin{aligned} \frac{Y_{1,-1} - Y_{1,1}}{\sqrt{2}} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \varphi \equiv p_x(\varphi, \vartheta); \\ \frac{Y_{1,-1} + Y_{1,1}}{\sqrt{2}i} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \sin \varphi \equiv p_y(\varphi, \vartheta). \end{aligned} \quad (9.30)$$

Könnyű belátni, hogy a (9.29) egyenletbeli három függvényt tetszőleges komplex együtthatókkal lineárkombinálva, tetszőleges térbeli irányba mutató piskótát lehet kikeverni.

⁵ Ál-szófejtés szerint „szférikus”, de az elnevezés olyan régi, hogy akkor még nem is tudták, hogy ezek szférikusak.

⁶ Marx György szerint „propeller” vagy „piskóta”.

⁷ „dália”

Nagyobb l impulzusmomentumú pályák valós kombinációiban hasznos eligazodást teremt, hogy általában l csomófelület szabdalja szögfüggésüket pozitív és negatív tartományokra. A komplex bázisfüggvényekre (\hat{L}_z -sajátfüggvényekre) ez a geometriai számlálás nem működik.

Amíg érintetlen a gömbszimmetria, mindegy, hogy milyen lineárisan független kombinációkat használunk bázisfüggvényekként. Ahogy valami külső hatás – *perturbáció* – megszünteti a szigorú gömbszimmetriát, a célszerű bázisfüggvények azok, amelyek a perturbáció szimmetriájához igazodnak:

- z irányú mágneses térben⁸ a (9.29) komplex hullámfüggvények írják le kifejezően a Zeeman-effektust: bennük különböző köráramok folynak, különböző mágneses momentummal, így a mágneses térben különböző energiasajátállapotokká válnak;
- ha az atom vagy ion egy kristályba épül be, ott a gömbszimmetriától eltérő lokális elektromos terek hatnak rá; az $l = 1$ -es piskóták vagy a nagyobb l -hez tartozó, cizelláltabb töltéeloszlású valós kombinációk be tudnak állni az elektromos vonzási irányokba, így találva rá az energiasajátállapotokra. Ilyen állapotokban nem folyik köráram; a pályamozgáshoz tartozó Zeeman-effektus *kifagy*. Ezt jól ismerik a mágneses rezonanciával foglalkozók: kristályban az elektronnak csak a spinje ad rezonanciajelet, a pályája nem; ezért is az a módszer neve, hogy ESR (elektron spin rezonancia).

Említésre érdemes még a (9.21) függvényben a $\sin \vartheta^{|m|}$ tényező: nagy $|m|$ a z tengely körüli gyors pörgésnek felel meg, ilyenkor a centrifugális erő a tengelyre merőleges egyenlítői síkba húzza a hullámfüggvényt; ezt láthatjuk $\sin \vartheta^{|m|}$ szögfüggésén, amely nagy $|m|$ -re $\vartheta \approx \pi/2$ körül kicsúcsosodik.

9.5. Az impulzusmomentum spektruma és mátrixelemei

Mindazt, amit a gömbfüggvények tulajdonságain keresztül megtudtunk az impulzusmomentumról, megtudhatjuk differenciálegyenletek és speciális függvények nélkül is, tisztán algebrai úton: a felcserélési relációkból levezetett algebrai egyenletek megoldásával. Az algebrai út olyat is ad, amire a gömbfüggvények képtelenek: betekintést a spin fizikájába. Itt az ideje, hogy megismerjük ezt a módszert.

Megelőlegezve a részecskék belső impulzusmomentumának, a spinnek a létezését, tartsuk fenn az \hat{L} jelölést a mozgásból eredő pálya-impulzusmomentumra, az \hat{S} jelölést a spinre, és a mindezekből összetevődő, teljes im-

⁸ Nem a mágneses tér tudja, hogy neki z irányúnak kell lennie, hanem mi forgatjuk a mágneses tér irányába a z -tengelyt.

impulzumomentum operátorát jelöljük \hat{J} -vel. Ennek legáltalánosabb definíciója, hogy ő a forgás unitér transzformációjának generátora: \vec{u} egységvektorú tengely körüli α szögű forgásnál ki kell számítani a tengelyre való vetület $\hat{J}_{\vec{u}}$ operátorát, és az elfordulás unitér operátora

$$\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \hat{J}_{\vec{u}}}. \quad (9.31)$$

Mivel az egymás utáni, különböző tengelyek körüli forgások geometriája teljesen meghatározza a \hat{J} operátorok felcserélési relációit, most is igaz lesz, hogy

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= i\hbar \hat{J}_z \\ [\hat{J}_y, \hat{J}_z] &= i\hbar \hat{J}_x \\ [\hat{J}_z, \hat{J}_x] &= i\hbar \hat{J}_y, \end{aligned} \quad (9.32)$$

ahonnan most is következik, hogy a $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ operátor felcserélhető \hat{J} mindhárom vektorkomponensével. A játszma most is az lesz, hogy keressük az önadjungált \hat{J}^2 és \hat{J}_z operátorok közös $|\lambda, m\rangle$ normált sajátvektorait és sajátértékeit:

$$\hat{J}^2 |\lambda, m\rangle = \hbar^2 \lambda |\lambda, m\rangle, \quad \hat{J}_z |\lambda, m\rangle = \hbar m |\lambda, m\rangle. \quad (9.33)$$

A spektrum algebrai feltárásához vezessük be a

$$\hat{J}_{\pm} := \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \quad (\hat{J}_- = (\hat{J}_+)^{\dagger}) \quad (9.34)$$

léptető operátorokat, amelyek hasonló szerepet játszanak az analízisben, mint a keltő és eltüntető operátorok a harmonikus oszcillátor esetén: az m kvantumszámot léptetik $m \pm 1$ -re. Ez a léptető tulajdonság a

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] = \pm\hbar \hat{J}_{\pm}; \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_{\pm}] = 0 \quad (9.35)$$

felcserélési relációkon alapul, amelyek (9.32) közvetlen következményei; ezek alkalmazásával kapjuk, hogy

$$\hat{J}_z \hat{J}_{\pm} |\lambda, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{J}_{\pm} |\lambda, m\rangle, \quad (9.36)$$

vagyis $\hat{J}_{\pm} |\lambda, m\rangle \propto |\lambda, m \pm 1\rangle$.

Ez még csak arányosság: a kapott vektor nem normált. A korrekt normáláshoz még egy operátor-relációt kell levezetnünk: a (9.34) definícióból és a (9.32) felcserélési relációkból következik, hogy

$$\hat{J}_{\pm} \hat{J}_{\mp} = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \pm \hbar \hat{J}_z. \quad (9.37)$$

Ennek felhasználásával induljunk ki egy normált $|\lambda, m\rangle$ sajátvektorból, léptessük, majd normáljuk újra:

$$\begin{aligned} \|\hat{J}_{\pm} |\lambda, m\rangle\|^2 &= \langle \lambda, m | \hat{J}_{\mp} \hat{J}_{\pm} |\lambda, m\rangle = \langle \lambda, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z |\lambda, m\rangle \\ &= \hbar^2 (\lambda - m^2 \mp m) = \hbar^2 (\lambda - m(m \pm 1)), \end{aligned} \quad (9.38)$$

a helyesen normált léptetett sajátvektorok pedig:

$$|\lambda, m \pm 1\rangle = \frac{\hat{J}_{\pm} |\lambda, m\rangle}{\hbar \sqrt{\lambda - m(m \pm 1)}}. \quad (9.39)$$

Jegyezzük meg, hogy a négyzetgyök előjelét szabadon választhatjuk, sőt még egy tetszőleges egységnyi abszolút értékű komplex számmal is megszorozhatjuk az eredményt, csak a későbbiekben tartanunk kell magunkat választásunkhoz.

Eddig minden automatikusan ment, de λ -ról még nem tudunk semmit. Most kell elkezdenünk gondolkodni.

Mindenekelőtt, $\hbar^2 \lambda = \langle \lambda, m | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 | \lambda, m\rangle \geq 0$, mert mindhárom tagja külön is ≥ 0 : pl. $\langle \lambda, m | \hat{J}_x^2 | \lambda, m\rangle = \|\hat{J}_x |\lambda, m\rangle\|^2$, mivel \hat{J}_x önadjungált. A jobboldal szemlátomást nem negatív.

Nézzünk rá viszont a (9.38) formulára: a léptető operátorok hatására m kezdeti értékétől egységnyi lépésekben megy felfelé és lefelé. $m(m \pm 1)$ előbb-utóbb túlnő λ értékén, és akkor a norma negatívba megy át, ami lehetetlen. A sajátértékeket az választja ki, hogy egy adott λ mellett a sajátvektorok generálása leálljon egy m_{max} maximális és egy m_{min} minimális értéknél, ahol $m_{max}(m_{max} + 1) = \lambda$, és $m_{min}(m_{min} - 1) = \lambda$.

A két feltétel akkor teljesülhet, ha $m_{max} = -m_{min}$. Jelöljük ezt a közös értéket j -vel, ekkor

$$\lambda = j(j+1); \quad m = -j, -j+1, -j+2, \dots, j-2, j-1, j. \quad (9.40)$$

Most jön a csattanó: m -nek egész lépésekben kell eljutnia $-j$ -től $+j$ -ig, és ez két esetben lehetséges: ha j egész szám, vagy ha félegész!

Az első esetet jól ismerjük a pálya-impulzusmomentum elméletéből, ekkor $j = l = 0, 1, 2, \dots$. Félegész értékek ott nem kerülnek elő, de a természet leleménye rátalált erre a lehetőségre is a spinhez kapcsolódó jelenségkörben. Ezzel foglalkozik a 12. fejezet.

Írjuk le még a normált léptetett sajátvektorokat a λ sajátérték megtalált azonosításával:

$$|j, m \pm 1\rangle = \frac{\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}}. \quad (9.41)$$

Ebből leolvashatjuk a léptető operátorok mátrixelemeit:

$$\begin{aligned}(\hat{J}_+)_{m+1,m}^j &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}; \\(\hat{J}_-)_{m-1,m}^j &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}.\end{aligned}\tag{9.42}$$

Ezekből, mint játékkockákból, felépíthetjük a $\hat{J}_x = (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)/2$, $\hat{J}_y = (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)/2i$ operátorok mátrixelemeit is. Eredményeinket a $j = \frac{1}{2}$ esetre bőségesen fogjuk használni a feles spin elméletében.

A csoportelmélet szempontjából az egy-egy l mellékkvantumszámhoz tartozó, különböző m mágneses kvantumszámú állapotok a forgáscsoport egy-egy irreducibilis ábrázolását „feszítik ki”. A csoportelméleti módszerek igazi játéktere ott nyílik meg, ahol több részecske impulzusmomentumai kombinálódnak egy összetett részecske, atom, molekula, atommag vagy kristály állapotainak bonyolult impulzusmomentum-dzsungelévé, amelynek kísérleti adathalmazában a csoportelmélet jól kézreálló bozótvgó késként segít rendet teremteni.

Annak az eredménynek, hogy a (9.40) formulák szerint az impulzusmomentum négyzetének sajátértékei $\hbar^2 j(j+1)$ alakúak, ahol spin nélkül a j kvantumszám nemnegatív egész, van egy egyszerű alkalmazása: ebből következik, hogy egy Θ tehetetlenségi nyomatékú merev test (*rotátor*) forgási energiája $\hbar^2 j(j+1)/2\Theta$ alakban kvantálódik. Ezt az egyszerű modellt kiterjedten alkalmazzák a molekulák rotációs színképének értelmezésénél.

10. fejezet

A hidrogénatom

A hidrogénatom kötött stacionárius állapotainak és energiasajátértékeinek meghatározása volt a Schrödinger által megoldott első nemtriviális feladatok egyike. Akárcsak a harmonikus oszcillátor 5.6. pontban leírt megoldása, ez is a Sommerfeld-féle polinom-módszeren alapul, és erősíti azt az érzésünket, hogy a speciális függvények alaposabb ismeretétől az ember jobb elméleti fizikussá válik. Schrödinger erre a felismerésre nem magától jutott el: vele egy intézetben, egy folyosón volt a szobája a nagy matematikus Hermann Weylnek; tőle kért és kapott segítséget a hidrogénatom egyenletének megoldásához.

A megoldás ismertetésében indulhattunk volna a nulláról is, de az impulzusmomentum azóta kifejlődött elmélete mélyen bevilágított az első lépések – a megoldás szögfüggésének feltárása – fizikai értelmébe, úgy hogy kár lett volna enélkül, a parciális differenciálegyenletek pusztán gyakorlófeladatokként bemutatni a számítást. Így viszont mostanra már csak egy egyváltozós közös differenciálegyenlet, az előző fejezetben levezetett radiális egyenlet megoldása maradt hátra.

10.1. A radiális Schrödinger-egyenlet megoldása Coulomb-potenciálra

Tekintsük a protont rögzített ponttöltésnek,¹ és induljunk ki az általa létrehozott Coulomb-potenciálban mozgó elektron radiális Schrödinger-egyenletéből: (9.25) szerint

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \right] R_l(r) = E R_l(r), \quad (10.1)$$

¹ A proton mozgásának figyelembevétele nem triviális, de nem is nehéz, lásd a 15.2. pontban.

ahol e az elemi töltés, és ϵ_0 a vákuum dielektromos állandója. Vegyük észre, hogy az egyenletet megszorozva r -rel és bevezetve az

$$r R(r) =: u(r) \quad (10.2)$$

jelölést, erre a függvényre közönséges egydimenziós Schrödinger-egyenletet kapunk:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} u''(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} - E \right) u(r) = 0. \quad (10.3)$$

Dimenziótlanjuk ezt az egyenletet! A benne szereplő fizikai állandókból alkothatunk egy hosszúságdimenziójú kombinációt, ez az (1.9) egyenletben bevezetett r_B Bohr-sugár, és egy energiadimenziójú kombinációt, ez az (1.10) egyenletben bevezetett Ry Rydberg-állandó. Vezessük be a $\rho = r/r_B$ dimenziótlán távolságot és az $\epsilon = E/Ry$ dimenziótlán energiát! Ezzel az egyenlet univerzális alakot ölt:

$$-\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} - \epsilon \right) u = 0. \quad (10.4)$$

Ennek az egyenletnek megfelelő határfeltételekkel való megoldása adja meg az ϵ dimenziótlán energia kötött állapotoknak megfelelő sajátértékeit. Visszaemlékezve az 1. fejezetben megismert Rydberg-formulára, ha $-1/n^2$ jön ki, akkor nyert ügyünk van.

Melyek a megfelelő határfeltételek? $\rho \rightarrow \infty$ -re nyilvánvalóan az $u \rightarrow 0$ feltételt kell kikötni, különben a hullámfüggvény nem lesz normálható (négyzetesen integrálható). Bonyolultabb a $\rho \rightarrow 0$ határ kérdése, mert ott a normálás nem ad elég támpontot: ha $u(\rho) \rightarrow a \neq 0$, akkor az origó körül $R(\rho) \propto u(\rho)/\rho \approx a/\rho$. Ez bár végtelenhez tart, de négyzetesen integrálható. Mégsem jó, mert $\Delta(1/\rho) = 4\pi \delta(\vec{\rho})$ („a ponttöltés potenciálja”), így az origóban nem elégíti ki a Schrödinger-egyenletet. Emiatt a kirovandó feltétel a $\rho \rightarrow 0$ határon is $u \rightarrow 0$.

A (10.4) egyenletben $\rho \rightarrow \infty$ esetén a zárójelben a $-\epsilon$ tag dominál; az ennek megfelelő aszimptotikus megoldás $\exp(\pm\alpha\rho)$ alakú, ahol $\alpha = \sqrt{-\epsilon} = \sqrt{|\epsilon|}$ (a négyzetgyök pozitív értéke). A négyzetes integrálhatóságot a két előjel közül a lecsengő exponenciális, $\exp(-\alpha\rho)$ biztosítja.

Véges ρ -ra az aszimptotikus alakot korrigálni kell:

$$u(\rho) = e^{-\alpha\rho} (a_s \rho^s + a_{s+1} \rho^{s+1} + \dots) \quad (10.5)$$

A megoldás további menete is követi a harmonikus oszcillátorra az 5.6. pontban leírt gondolatmenetet. A fenti próbafüggvényt behelyettesítve a

(10.4) egyenletbe, a zárójelben levő hatványsor együtthatóira rekurziós formulát kapunk:

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1) - l(l+1)} a_k. \quad (10.6)$$

Ha $k \rightarrow \infty$, akkor az iterációs összefüggés így egyszerűsödik le: $a_{k+1} = [2\alpha/(k+1)]a_k$, aminek megoldása $a_k \propto (2\alpha)^k/k!$, ami éppen $\exp(+2\alpha\rho)$ hatványsora. Ez elrontja az optimista módon posztulált $\exp(-\alpha\rho)$ lecsengést, kivéve ha valamilyen $k = n$ értéknél elvágjuk az iterációt. Ehhez az kell, hogy teljesüljön

$$\alpha n - 1 = 0, \quad (10.7)$$

vagyis

$$\alpha = \sqrt{-\varepsilon} = \frac{1}{n}, \quad (10.8)$$

amiből

$$\varepsilon = \varepsilon_n = -\frac{1}{n^2} \Rightarrow E_n = -\frac{Ry}{n^2}. \quad (10.9)$$

Erre vártunk: megkaptuk a Rydberg-formulát! A benne szereplő $n = 1, 2, \dots$ szám neve: *főkvantumszám*.

Ha rászántunk egy pillanatot a meghatódásra, folytassuk a radiális hullámfüggvény megismerésével. Egyelőre annyit tudunk, hogy

$$u(\rho) = e^{-\alpha\rho}(a_s \rho^s + \dots + a_n \rho^n). \quad (10.10)$$

Szerepel benne egy minimális s kitevő, amit a $\rho \rightarrow 0$ körüli határfeltételből kell kitalálni. Ott $l \neq 0$ esetén a (10.4) egyenletben a legalacsonyabb fokú, ρ^{s-2} tagok dominálnak; az ő együtthatóikból az adódik, hogy

$$s(s-1) = l(l+1). \quad (10.11)$$

Ez s -re másodfokú egyenlet, két megoldással: $s = l+1$ és $s = -l$. Az első a jó; a második nem elégíti ki a határfeltételt $\rho \rightarrow 0$ -nál.

Foglaljuk össze az eredményt, most már a teljes $R(\rho) = u(\rho)/\rho$ radiális hullámfüggvényre: a normálási faktortól eltekintve, amit itt nem fogunk meghatározni,

$$R(\rho) = e^{-\rho/n}(a_l \rho^l + a_{l+1} \rho^{l+1} + \dots + a_{n-1} \rho^{n-1}). \quad (10.12)$$

Egy valamit ránézésre is leolvashatunk az eredményből: adott n főkvantumszám mellett az l *mellékvantumszám* maximális értéke $n-1$. Másrésztől l mint az impulzusmomentum nagyságát mérő kvantumszám (\hat{L}^2 sajátértékei: $\hbar^2 l(l+1)$) legkisebb értéke $l=0$, így lehetséges értékei: $l =$

$0, 1, \dots, n-1$. Ezek mindegyikéhez az m mágneses kvantumszámnak $m = -l$ -től $+l$ -ig $2l+1$ különböző értéke tartozik. Ez összesen

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (10.13)$$

ortonormált energiasajátállapotot jelent, amelyek mindegyikének energiája $-Ry/n^2$. A 12. fejezetben látni fogjuk, hogy ez a szám még az elektron feles spinje miatt megkettőződik, tehát a hidrogénatom minden energiasajátértéke $2n^2$ -szeresen elfajult. Ez az optikai spektrumban néhány tucat állapotot jelent, de a mikrohullámú spektrumban, ahol $n \approx 50$ körüli főkvantumszámok közötti átmeneteket látunk, többzszereses elfajulás nehezíti a kvantumállapotok pontos beazonosítását, ill. pontos preparálását.

Az elfajulást többnyire szimmetria okozza. Itt az adott l -hez tartozó különböző m -ek közötti elfajulást már többször megbeszéltük: ez a *forgásszimmetria* következménye: m az impulzusmomentum-vektor különböző irányú beállításait indexeli, ezek között pedig centrális (gömbszimmetrikus) potenciál esetén nem lehet energiában különbség.

Másképpen áll a dolog az adott n -hez tartozó különböző l -ek közötti elfajulással. Ehhez nem tartozik nyilvánvaló fizikai szimmetria, mondhatjuk „véletlen elfajulásnak” is, amely csak a radiális potenciál speciális alakjára (az $1/r$ Coulomb-potenciálra, és még a gömbszimmetrikus harmonikus oszcillátor r^2 -es potenciáljára is) teljesül. Valóban, a hidrogéntől eltérő atomok spektrumában, ahol az elektronfelhő töltéseloszlása miatt a Coulomb-erők potenciálja nem $1/r$ alakú, az azonos n -hez tartozó, de különböző l mellékkvantumszámú állapotok energiái jelentősen különválnak. A hidrogénatom precíz $1/r$ -es potenciáljában fellépő elfajulás mögé lehet azért találni, ha nem is fizikai, de matematikai szimmetriát: a (10.4) egyenlet egy meghatározott változótranszformációval önmagába megy át; ennek tulajdonítható az l szerinti elfajulás, amely tehát innen nézve nem is annyira „véletlen”.

Érdeemes hangsúlyozni, hogy pl. egy l értékhez nem $2l+1$, hanem végtelen sok, sőt, kontinuum számosságú különböző kvantumállapot tartozik, hiszen a különböző szuperpozíciók együtthatóit folytonosan változtathatjuk. Amit a fentiekben és más hasonló esetekben össze lehet számolni, az egy *bázis dimenziószáma*: a Hilbert-tér egy alterében található lineárisan független vektorok – célszerűen: ortonormált bázisvektorok – száma.

Jegyezzük meg még, hogy a már emlegetett mikrohullámú spektroszkópiában bonyolultabb atomoknak is megjelennek olyan magasan gerjesztett hidrogénszerű állapotai, amelyekben egyetlen elektron emelkedik ki magasan a pozitív „iontörzs” fölé, amely a többi elektronokból és a magból áll. A

kiemelkedő elektron az iontörzset a magasból majdnem pontszerűnek látja, és emiatt a spektruma is közel áll a hidrogénatom Rydberg-spektrumához. Ezeket az ún. *Rydberg-atomokat* az utóbbi évtizedben előszeretettel használták a kvantummechanika alapkérdéseire és informatikai alkalmazásaira irányuló kísérleteknél.



TEXTS DON'T GROW ON TREES!
AUTHORS' RIGHTS AWARENESS CAMPAIGN

© Geszti Tamás

11. fejezet

Mozgás mágneses térben

Mielőtt a pálya-impulzusmomentumról (9.1. pont) és az impulzusmomentum általános elméletéről (9.5. pont) továbblépnénk a részecskék belső impulzusmomentuma: a spin megismerése felé, közelebbi ismeretséget kell kötnünk azzal a jelenségkörrel, amely a spin felfedezését lehetővé tette: a töltött részecskékre ható mágneses mező hatásairól kell beszélnünk.

A mágneses mezőben mozgó töltött részecskék dinamikája szép, érdekes és fontos fejezete a kvantummechanikának, amely a régóta ismert Zeeman- és Stern–Gerlach-effektus, valamint a neutronspinnel kapcsolatos látványos interferenciaeffektusok mellett az utóbbi időben a szilárdtestfizika számos jelenségében kapott döntő szerepet. Különösen izgalmas fejlemény az Aharonov–Bohm-effektus, amely a mágneses vektorpotenciál kvantummechanikai szerepét helyezte új megvilágításba.

Ez a fejezet olyan jelenségekről szól, amelyekben a mágneses vektorpotenciált klasszikus külső erőtérek tekinthetjük. Az eddigiekből már megtanultuk, hogy ez akkor megengedhető, ha az elektromágneses tér magasan gerjesztett, koherens állapotban van. Kísérleteinkben ez ingyen hull az ölünkbe: az erős mágnesek éppen ilyen állapotot hoznak létre, akár tudunk róla, akár nem.

11.1. Töltött részecske Lagrange-függvénye és Hamilton-operátora mágneses mező jelenlétében

A Lorentz-erő merőleges a sebességre, emiatt nem végez munkát: ezen az úton nem lehet bevezetni „mágneses energiát”. Hogy kerülnek be a mágneses hatások a Hamilton-operátorba?

A választ már a Schrödinger-egyenlet bevezetésénél említettem: kétség esetén vissza kell menni a klasszikus mozgásegyenlethez – azt ismerjük: ott jelenik meg a Lorentz-erő. A mozgásegyenlethez meg kell konstruálni az $\mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}})$ Lagrange-függvényt, ebből megkapjuk az \vec{r} koordinátához konjugált $\vec{p} = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{\vec{r}}$ impulzust, végül a $\mathcal{H} = \dot{\vec{r}} \cdot \vec{p} - \mathcal{L}$ Hamilton-függvényt. Ebben

\vec{r} -et és \vec{p} -t a felcserélési relációt kielégítő operátorokkal helyettesítve, megkapjuk a Hamilton-operátort.

A q töltésű, M tömegű pontszerű testre ható Lorentz-erőt reprodukáló Lagrange-függvényt ismerjük a klasszikus elektrodinamikából:

$$\mathcal{L} = \frac{M\vec{v}^2}{2} - qV(\vec{r},t) + q\vec{v} \cdot \vec{A}(\vec{r},t), \quad (11.1)$$

ahol $\vec{A}(\vec{r},t)$ a vektorpotenciál, amely a $\vec{B}(\vec{r},t)$ mágneses indukciót határozza meg a $\vec{B} = \text{rot } \vec{A} \equiv \vec{\nabla} \times \vec{A}$ összefüggésen keresztül. Egy adott \vec{B} mágneses indukciót különböző $\vec{A}(\vec{r})$ vektorpotenciálokból lehet származtatni, amelyek egymásba egy „mértéktranszformációval” vihetők át (lásd alább, a 11.3. pontban).

A Lagrange-függvényből a kanonikus impulzus

$$\vec{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}} = M\vec{v} + q\vec{A}, \quad (11.2)$$

a Hamilton-függvény pedig

$$\mathcal{H} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2M} + qV(\vec{r}) \quad (11.3)$$

(az első tag az $Mv^2/2$ kinetikus energia; a vektorpotenciál a *sebesség* kifejezésén keresztül jelenik meg). Írjuk le a (11.2) összefüggés inverzét is:

$$\vec{v} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}} = \frac{1}{M} (\vec{p} - q\vec{A}) \quad (11.4)$$

a sebesség, amelynek az a jelentősége, hogy vele arányos az elektromos áramsűrűség, ami a mágneses mező forrása,¹ vagyis mágneses mező jelenlétében ő a megfigyelhető mennyiség, nem a kanonikus impulzus.

A kvantummechanikára való áttérés úgy történik, hogy a fenti formulákban a kanonikus impulzusnak és a helyvektornak egy-egy operátort feleltünk meg, amelyek kielégítik a $[\hat{p}, \hat{r}] = (\hbar/i)\mathbb{1}$ felcserélési relációt. A klasszikus Hamilton-függvénynek megfelelő Hamilton-operátort úgy kapjuk meg, hogy az összeg négyzetének kiszámításánál megőrizzük a felcserélhetetlen \hat{p} és $\hat{A} = \vec{A}(\hat{r})$ operátorok sorrendjét:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} - \frac{q}{2M} (\hat{p} \cdot \hat{A} + \hat{A} \cdot \hat{p}) + \frac{q^2}{2M} \hat{A}^2 + q\hat{V}, \quad (11.5)$$

¹ Gondoljunk a $\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j}$ Maxwell-egyenletre, amely a klasszikus fizika egyik legerősebb pillérének, az Ampère-szabálynak matematikai megfogalmazása.

ahol $\hat{V} = V(\hat{\vec{r}})$. A sebesség operátorának felírásánál nincs gondunk a sorrenddel:

$$\hat{v} = \frac{1}{M} (\hat{\vec{p}} - q\hat{\vec{A}}); \quad (11.6)$$

ennek megfelelően a (7.22) áramoperátorban is $\hat{\vec{p}}$ helyett a $\hat{\vec{p}} - q\hat{\vec{A}}$ kombináció jelenik meg.

A következőkben $\vec{B} = (0, 0, B_z)$ mágneses indukciójú homogén mágneses mezőre szorítkozunk. Egy lehetséges vektorpotenciál-függvény, amely ezt szolgáltatja,

$$\hat{\vec{A}} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \hat{\vec{r}}), \quad (11.7)$$

amelynek komponensei;

$$\hat{A}_x = -B_z \hat{y}/2; \quad \hat{A}_y = B_z \hat{x}/2; \quad \hat{A}_z = 0. \quad (11.8)$$

Ez kielégíti a Coulomb-mértéknek nevezett $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ feltételt. Emiatt, mivel $\vec{\nabla}$ egy konstans szorzótól eltekintve az impulzus operátora, a *Coulomb-mértékben* elvégezhetjük a következő átalakítást (általában nem!):

$$\begin{aligned} -\frac{q}{2M} (\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{p}}) &= -\frac{q}{M} \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{p}} \\ &= -\frac{q}{2M} (\vec{B} \times \hat{\vec{r}}) \cdot \hat{\vec{p}} = -\frac{q}{2M} \vec{B} \cdot (\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}) = -\frac{q}{2M} B_z \hat{L}_z. \end{aligned} \quad (11.9)$$

Itt már ráismerhetünk, hogy ez az egész tag egy $\hat{\mu}_z = \gamma \hat{L}_z$ nagyságú mágneses momentum potenciális energiája a z irányú mágneses mezőben, ahol $\gamma := q/2M$ a *giromágneses arány*. Egy töltött részecske körmozgása, mint köráram a klasszikus fizika szerint is mágneses momentumot kelt, éppen ekkora giromágneses aránnyal.² Elektronra a giromágneses arány $\gamma_{el} = 0.9 \times 10^{11} \text{ Cb/Kg} = 0.9 \times 10^{11} \text{ Hz/Tesla}$. \hat{L}_z sajátértékei $m\hbar$ alakúak, ahol az m egész szám a mágneses kvantumszám. Ha $m = 1$ és $L_z = \hbar$, az elektron pályamozgásához tartozó mágneses momentum nagysága $\mu_B = e\hbar/2M \approx 0.9 \times 10^{-23} \text{ J/Tesla}$, a „Bohr-magneton”.

Helyettesítsük be a kapott eredményt a Hamilton-operátorba:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2M_e} - \frac{\mu_B}{\hbar} B_z \hat{L}_z + \frac{e^2}{2M_e} \hat{A}^2 + eV. \quad (11.10)$$

² A klasszikus elektrodinamika szerint egy A területet befogó I köráram által létrehozott mágneses momentum $\mu = A \times I$. Ha az áramot egy körpályán $v/(2r\pi)$ gyakorisággal körbejáró q töltés okozza, $I = qv/(2r\pi)$. Ekkor $\mu = r^2\pi \times qv/(2r\pi) = qrMv/(2M) = (q/2M)L$.

Ez a Hamilton-operátor a Schrödinger-egyenleten keresztül jelenségek sokaságát írja le. Az első és utolsó tagot már sokszor láttuk; tekintsük át a közbelső, mágneses hatásokat leíró tagokat!

A második, B_z -ben lineáris tagot *Zeeman-energiának* is nevezik. Homogén mágneses mezőben ez az energia a dipólmomentumnak \vec{B} irányára való vetületétől, vagyis L_z -től függ, ami a kvantummechanika szerint diszkrét $m \hbar$ értékeket vesz fel: l mellékkvantumszám esetén ez $2l + 1$ különböző energiasajátértékhez vezet, ami az atom színeképvonalainak $2l + 1$ közeli színeképvonalra való felhasadásában mutatkozik meg. Ezt nevezik *Zeeman-effektusnak*, és első megfigyelése 1896-ban történt, jóval a kvantummechanikára utaló felfedezések előtt.

Amennyiben B_z inhomogén, a mágneses dipólus potenciális energiája a hely függvénye, tehát az atomra *erő* hat; ez okozza a látványos *Stern–Gerlach-effektust* (1922). Ilyenkor egy kályhában elpárologtatott anyag gőzéből blendék között kiengedett éles atomnyaláb válik szét $2l + 1$ ágra, amint átröpül egy inhomogén mágnes pólusai között, hogy végül $2l + 1$ foltot hagyjon az útjába tett üveglapon.

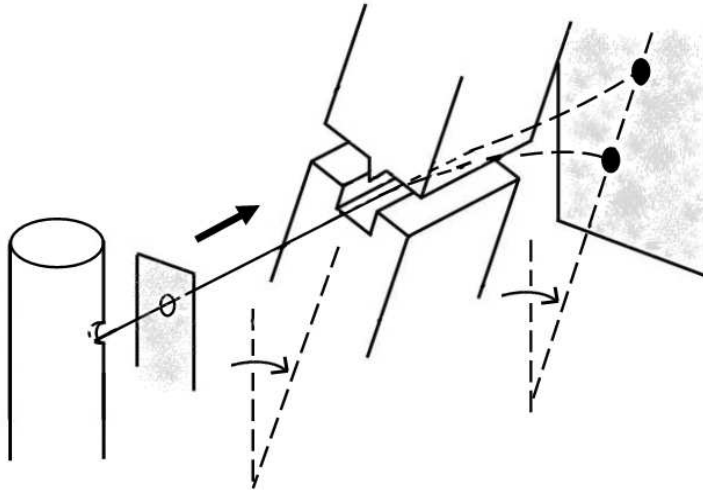
A (11.10) egyenlet harmadik, A^2 -es tagja a vektorpotenciál (11.8) kifejezésének megfelelően $= (e^2/2M) B_z^2 (x^2 + y^2)$. Itt az utolsó tényező átlagának nagyságrendje atomokra a_B^2 , ahol a_B a Bohr-rádiusz. Az ennek megfelelő energia csak 10^5 Tesla erősségű mágneses térnél válik összemérhetővé az előző Zeeman-taggal. Mivel 1 Tesla már igen erős mágneset jelent, ennek a tagnak a járuléka földi körülmények között ritkán jut szerephez, csak az atomok gyenge *diamágnességében* figyelhető meg. Asztrofizikai körülmények között, pl. neutroncsillagokban előfordul 10^5 Tesla nagyságrendű mágneses mező.

Fémekben azonban, ahol az elektronok az egész fémdarabot bejárják, a Bohr-rádiusz helyébe a fémminta makroszkopikus mérete kerül: a fémek diamágnessége erős effektus, markáns kvantummechanikai tulajdonságokkal. Ezzel foglalkozunk a következő pontban.

Végül visszatérve a kiinduló (11.3) Hamilton-operátorhoz, egy meglepő tulajdonságot fedezhetünk fel: az impulzust a mágneses vektorpotenciállal összekapcsoló mértékinvarianciát. Ennek szenteljünk a fejezet utolsó pontját.

A homogén mágneses térben mért Zeeman-effektus és az inhomogén térben megfigyelt Stern–Gerlach-effektus azt a meglepő eredményt hozta, hogy a (11.10) Hamilton-operátor nem írja le helyesen a kísérleteket: a színeképvonalak néha a mágneses tér bekapcsolásakor *két* vonallá hasadnak fel; ezt hívták eleinte „anomális” Zeeman-effektusnak. Hasonlóan, a Stern–Gerlach-nyaláb *két* ágra válik szét. Ennek nem szabadna így lennie: ha az l pálya-

impulzusmomentum 0, nem lehetne sem felhasadás, sem szétválás; ha $l = 1$, annak háromféle beállása ($m = 1, 0, -1$) hármas felhasadást adna.



11.1. ábra. A Stern–Gerlach-effektusban (1922) egy inhomogén mágnes pólusai között átrepülő ezüstatomok nyalábja kettéválik, és két foltot hagy az útjába tett üveglapon. Ha a mágnest elforgatjuk, a foltok vele forognak. Ez a feles spin legközvetlenebb kísérleti bizonyítéka.

Uhlenbeck és Goudsmit (1925) jutott először arra a gondolatra, hogy e furcsa jelenségek oka az elektron „tengely körüli pörgése” lehet, amit ők neveztek el spinnek, és ők mondták ki azt is, hogy ez olyan, mintha $2l + 1 = 2$ lenne, vagyis a pörgésnek $\hbar/2$ nagyságú impulzusmomentum felelne meg. Hogy ezt hogyan is kell elképzelni anyaghullámok esetén, és mi minden következik belőle, annak szenteljük az egész következő fejezetet.

Itt, egyetlen elektronra specializálva, már csak annyit villantunk fel, hogy miképpen változik meg a Hamilton-operátor a spinnel kapcsolatos tagok hozzáadásától. Ehhez azonban még valamit kell tudnunk: azt, hogy a spinhez tartozó giromágneses arány $\gamma_{el-spin} = e/M$, ami éppen kétszerese a pályamozgáshoz tartozóknak,³ vagyis az elektronspin $\hbar/2$ impulzusmomentumához is μ_B mágneses momentum tartozik. Ezt az adatot már Einstein és De

³ Pontosabban: 2.0023318428-szor akkora; az eltérést a Dirac-egyenleten túlmenő sugárzási korrekciók okozzák.

Haas 1916-os kísérlete tartalmazta, akik egy torziós inga átmágnesezésekor fellépő perdületet mérték meg, de hogy a vártnál kétszerte nagyobb eredmény a spinnel kapcsolatos, az csak jóval később derült ki. Az elektronspin nagyságát a hozzá tartozó mágneses jelenségkörrel együtt pontosan leírja az elektron relativisztikus kvantummechanikai egyenlete, a Dirac-egyenlet.⁴

Végül a spin hatásait is tartalmazó Hamilton-operátort ilyen alakban kapjuk meg:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M_e} - \frac{\mu_B}{\hbar} B_z (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) + \frac{e^2}{2M_e} \hat{A}^2 + eV + \lambda \hat{L} \cdot \hat{S}, \quad (11.11)$$

ahol \hat{S} a spintől eredő impulzusmomentum operátora.

Az utolsó tagot „kézzel tettük be” az egyenletbe, a levezetésből nem következett. A neve: *spin-pálya kölcsönhatás*. Ez relativisztikus eredetű járuléka az energiához, amelynek létezése egy elektron esetén leolvasható a Dirac-egyenletből. Hatása a nehezebb atomok színképében jól látható; sok-elektron-rendszerekben, pl. félvezető vékony rétegekben még jelentősebb effektusok okozója lehet. Kvalitatív magyarázata az, hogy az elektromos mezőben mozgó elektron a maga mozgó koordinátarendszerében (indukált) mágneses mezőt érez, ami a spinre hat.

11.2. Szabad mozgás: a ciklotron-pályák kvantálása, Landau-szintek

A fémekben várható diamágneses effektusok feltárását kezdjük azzal, hogy megoldjuk egyetlen elektron időfüggetlen Schrödinger-egyenletét. Használva a (11.2) és (11.8) formulákat, az egyenlet a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} & \frac{M}{2} (\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2 + \hat{v}_z^2) |\psi\rangle \\ & \equiv \frac{1}{2M} \left(\hat{p}_x + \frac{qB_z}{2} \hat{y} \right)^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{qB_z}{2} \hat{x} \right)^2 + \hat{p}_z^2 \Big| \psi \rangle = E |\psi\rangle, \end{aligned} \quad (11.12)$$

ahol \hat{v} a (11.6) egyenletben definiált sebességoperátor. Áttérve a koordinátareprezentációra, először szabaduljunk meg az értelmetlen \hat{p}_z^2 operátortól, a hullámfüggvényből válasszuk le ennek sajátfüggvényét, az energiából pedig a megfelelő kinetikus energiát:

$$\langle x, y, z | \psi \rangle \equiv \Phi(x, y, z) = e^{(i/\hbar) p_z z} f_{p_z}(x, y); \quad E = \frac{p_z^2}{2M} + E_{x,y}, \quad (11.13)$$

⁴ A Dirac-egyenletről rövid áttekintést adunk a G. függelékben.

amivel az (x, y) síkbeli mozgás kétdimenziós Schrödinger-egyenlete:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{x,y} f_{p_z}(x, y) &\equiv \frac{1}{2M} \left(\hat{p}_x + \frac{q B_z}{2} \hat{y} \right)^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{q B_z}{2} \hat{x} \right)^2 f_{p_z}(x, y) \\ &= E_{x,y} f_{p_z}(x, y).\end{aligned}\quad (11.14)$$

$\hat{H}_{x,y}$ két olyan operátor négyzetösszege, amelyek kommutátora az egységoperátor valamilyen számmal megszorozva, így a megoldásra közvetlenül alkalmazhatjuk a harmonikus oszcillátorra a 8. fejezetben megismert algebrai módszert. A dimenziótlanítás eredménye:

$$\hat{H}_{x,y} = \hbar \omega_c \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (11.15)$$

ahol

$$\omega_c = \frac{q B_z}{M} \quad (11.16)$$

a ciklotron-frekvencia, a keltő és eltüntető operátorok definíciója pedig

$$\hat{a} = \frac{M}{\sqrt{2\hbar B_z}} (\hat{v}_x + i \hat{v}_y); \quad \hat{a}^\dagger = \frac{M}{\sqrt{2\hbar B_z}} (\hat{v}_x - i \hat{v}_y). \quad (11.17)$$

A fenti analízist Landau végezte el. A (11.15) Hamilton-operátor sajátértékeit a harmonikus oszcillátor ismeretében további számolás nélkül meg tudjuk mondani:

$$E_n = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (11.18)$$

Ezeket az energiasajátértékeket *Landau-szinteknek* nevezzük. Tiszta fémekben, nagyon alacsony hőmérsékleten és erős mágneses mezőben, ahol az elektronok képesek a $2\pi/\omega_c$ idő többszöröséig szabadon, ütközés nélkül mozogni, a Landau-féle kvantálásnak sokféle jelét lehet megfigyelni, kezdve a diamágneses szuszceptibilitás oszcillációtól a mágneses térerősség függvényében (*De Haas–Van Alphen-effektus*), a mágneses ellenállásváltozás és a Hall-feszültség oszcillációjáig (*kvantum Hall-effektus*).

A harmonikus oszcillátorra emlékeztető spektrum a négyzetösszegeből eredő matematikai véletlen. Itt a klasszikus határesetben *körmozgásról* van szó: a $q B_z$ v Lorentz-erő tart egyensúlyt az Mv^2/r centrifugális erővel; ez határozza meg a körmozgás $\omega_c = qB_z/M$ körfrekvenciáját, amely független

a körpálya sugarától; ezt használja ki a ciklotron működése is. A körmozgást Bohr szerint kvantálva visszakapjuk a (11.18) Landau-szinteket, persze a „zérusponttrezgéshez” hasonló $1/2$ nélkül.

A Landau-féle teljes kvantummechanikai tárgyalás, amelyet pontos szilárdtestfizikai mérések sokasága támaszt alá, ennél sokkal részletesebb leírást ad, amelyben az is a kvantálás részévé válik, hogy a hullámfüggvény örvényei a minta síkjában kristályrácshoz hasonlóan helyezkednek el. A szemléletes képeket azonban óvatosan fogadjuk: erősen függhetnek a vektorpotenciálra választott függvényalaktól; más szóval: a mesék nem invariánsak a mértéktranszformációval szemben. Ezzel a kérdéssel részletesebben foglalkozik a következő pont.

11.3. A mértékinvariancia és a vektorpotenciál realitása: Aharonov–Bohm-effektus, fluxuskvantálás

A klasszikus elektrodinamika mértékinvarianciája azt jelenti, hogy ha a vektorpotenciálhoz hozzáadjuk egy tetszőleges helyfüggő skalár gradiensét:

$$\vec{A} \Rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\chi, \quad (11.19)$$

attól a $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ mágneses indukció nem változik.

A kvantummechanikában ez a művelet fel kell hogy keltse a gyanakvásunkat, mert az áramsűrűség operátora a sebességgel arányos, amelynek operátora $(\hat{p} - q\hat{A})/M$, ez pedig szemelláthatóan megváltozik a mértéktranszformációtól. A sebességgel arányos áramsűrűség pedig nem változhat, hiszen ő a forrása a mágneses mezőnek!

A megoldás a koordináta-reprezentációban kézenfekvő: mivel \hat{p} -nek a $(\hbar/i)\vec{\nabla}$ művelet felel meg, a hullámfüggvényhez hozzátehetünk egy megfelelő helyfüggésű *fázisfaktort*, amelynek gradiense helyrehozza a változást:

$$\psi \Rightarrow e^{i\varphi(\vec{r})} \psi. \quad (11.20)$$

Hogyan kell megválasztani a $\varphi(\vec{r})$ fázist? Egyszerre elvégezve a (11.19) és (11.20) műveleteket, a sebesség várható értékével ez történik:

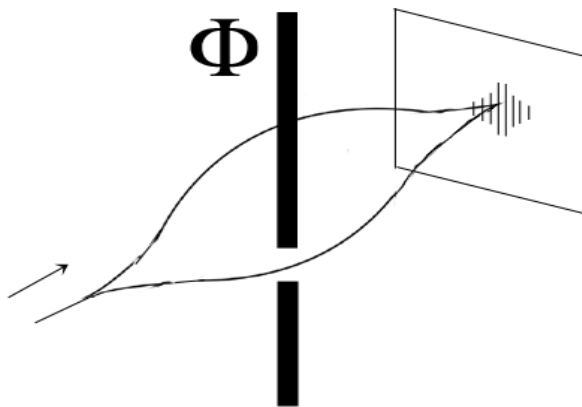
$$\begin{aligned} \frac{1}{M} \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\vec{A} \right) \psi d^3r \Rightarrow \\ \frac{1}{M} \int \psi^* e^{-i\varphi} e^{i\varphi} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \hbar(\vec{\nabla}\varphi) - q\vec{A} - q(\vec{\nabla}\chi) \right) \psi d^3r, \end{aligned} \quad (11.21)$$

ami akkor lesz változatlan, ha $\varphi(\vec{r}) = (q/\hbar)\chi(\vec{r})$, vagyis a vektorpotenciál (11.19) mértéktranszformációjához a hullámfüggvény

$$\psi \Rightarrow e^{\frac{i}{\hbar}q\chi} \psi \quad (11.22)$$

mértéktranszformációja tartozik.

Használjuk fel most megszerzett tudásunkat annak a különös felfedezésnek a leírására, amit a sokasodó kísérleti ellenőrzések ellenére is sokan sokáig vonakodtak elhinni. Ez az *Aharonov–Bohm-effektus*: az a jelenség, hogy ha egy kettéváló elektronhullám körbezár egy mágneses fluxust, majd összetalálkozva interferál, az interferenciacsíkok eltolódnak a fluxus változásával *akkor is, ha az elektronhullám helyén a mágneses indukció mindenütt 0* (11.2. ábra).



11.2. ábra. Aharonov–Bohm-effektus: ha a kettéváló, majd egyesülve interferáló elektronhullám által körbezárt területet átdöfő mágneses fluxust hozunk létre, az interferenciacsíkok a fluxussal arányosan eltolódnak akkor is, ha az elektron helyén a mágneses indukció mindvégig nulla marad.

A jelenségben az a nagyon meglepő, hogy a mágneses hatások az elektron mozgását éppen a vektorpotenciálon keresztül érintik. Azelőtt a vektorpotenciált csak afféle segédmenyiségnek tekintették, amely a $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ mágneses indukción kívül nem jelent semmit. Az Aharonov–Bohm-effektussal az derült ki, hogy fizikai jelentéssel nemcsak a mágneses indukció rendelkezik, hanem a vektorpotenciál más mértékinvariáns kombinációi is!

Egy ilyen mértékinvariáns kombináció pedig, amelynek önálló fizikai jelentése van,

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{r} = \int (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{f} = \int \vec{B} \cdot d\vec{f} = \Phi, \quad (11.23)$$

vagyis az integrációs kontúr által közbezárt fluxus, ami átdöfi a kontúrra feszített integrációs felületet, és természetesen akkor is lehet nullától különböző, ha a kontúr helyén sehol sincs mágneses indukció.

Az Aharonov–Bohm-fáziseltolást éppen ez az $\vec{A}(\vec{r}, t)$ -től nemlokálisan függő, de mértékinvariáns mennyiség határozza meg; ezt látjuk be az alábbiakban.

A bizonyítás azon a ravasz észrevételen alapul, hogy ha az elektronhullám helyén mindenütt $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = 0$, akkor található olyan mértéktranszformáció, amely után az elektronhullám helyén mindenütt teljesül $\vec{A} = 0$ is.

Valóban, mivel $\vec{A}(\vec{r})$ rotációmentes, származtatható egy $F(\vec{r})$ skalárpotenciál negatív gradienseként. Fel is írhatjuk ezt a potenciált:

$$F(\vec{r}) = - \int^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}'. \quad (11.24)$$

Ha éppen ezt választjuk a mértéktranszformáció skalárfüggvényének: $\chi(\vec{r}) = F(\vec{r})$, akkor a vektorpotenciál a (11.19) egyenlet szerint így transzformálódik:

$$\vec{A}(\vec{r}) \Rightarrow \vec{A}(\vec{r}) + \vec{\nabla} F(\vec{r}) = 0. \quad (11.25)$$

Ezzel egyidejűleg transzformálnunk kell azonban a hullámfüggvényt is:

$$\psi(\vec{r}) \Rightarrow \exp\left(\frac{i}{\hbar} q F(\vec{r})\right) \psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) \quad (11.26)$$

vagyis az eredménynek meg kell egyeznie a mágneses fluxus nélküli hullámfüggvénnyel, hiszen most már az elektronhullám helyén vektorpotenciál sincs!

Fordítsuk meg a formulát, hogy leolvashassuk a mágneses fluxus (pl. ferromágneses túrkristály) behelyezésével a hullámfüggvényen fellépő fáziseltolódást:

$$\psi(\vec{r}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \int^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}'\right) \psi_0(\vec{r}) \quad (11.27)$$

Az interferenciában a két út közötti fáziskülönbséget, vagyis a körintegrált látjuk csíkok alakjában:

$$\Delta\phi = \oint \frac{q}{\hbar} \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{r} = \frac{q}{\hbar} \Phi. \quad (11.28)$$

Hány csíkkal tolódik el az interferenciakép a fluxus behelyezése (bekapcsolása) következtében? A válasz:

$$\frac{\Delta\phi}{2\pi} = \frac{\Phi}{\Phi_0}; \quad \Phi_0 := \frac{h}{q}. \quad (11.29)$$

A jobboldalon álló kombináció neve *fluxuskvantum*. Szupravezető, vagy akár nem szupravezető nanostruktúrák tulajdonságai a fluxuskvantum függvényében sokszor mutatnak periodikus változásokat; szupravezetőben ezekből azt olvashatjuk le, hogy a töltéshordozó egységek $q = 2e$ töltésű, két elektrontól álló kötött „Cooper-párok”. Félvezető nanostruktúrákban gyakran észlelnek Aharonov–Bohm típusú interferenciát.

Az Aharonov–Bohm-fáziseltolódás „topologikus fázis”: nem függ az elektron által befutott pálya pontos alakjától, csak attól, hogy a pálya megkerüli-e a fluxust vagy nem. Topologikus fáziseltolódások a kvantumfizika más területein is előfordulnak.



TEXTS DON'T GROW ON TREES!
AUTHORS' RIGHTS AWARENESS CAMPAIGN

© Geszti Tamás

12. fejezet

Spin

A spinre utaló mágneses kísérleteket, a színeképvonalak kettéhasadását a Zeeman-effektusban és az atomnyalábok kettéválását a Stern–Gerlach-effektusban az előző fejezet elején ismertük meg. Itt még tegyünk hozzá annyit, hogy a Stern–Gerlach kísérletben a mágneses momentumnak tipikus „Neumann-mérése” történik (lásd a 6.2. pontban), amit az üveglapon megjelenő folt mint detektor zár le.

Amit a Stern–Gerlach kísérletben kettéválasztunk, az nem keveréke, hanem kvantummechanikai szuperpozíciója kétféle mágneses momentumnak: ha az inhomogén mágnezt elforgatjuk, a két folt az üveglapon vele fordul. Erről a furcsaságról az elméletnek mindenképpen számot kell adnia.

Uhlenbeck és Goudsmit (1925) a mágneses momentumot az elektron, mint elektromosan töltött golyócska pörgésének tulajdonította, hasonlóan ahhoz, ahogy a Föld is forog, miközben a Nap körül kering. Ők vezették be a *spin* (pörgés) szót is. Ez végérvényesen összekapcsolta a jelenségekört az impulzusmomentum kvantumelméletével. Miután azonban de Broglie és Schrödinger óta az elektront nem repülő golyócskának, inkább terjedő hullámnak látjuk, a spinre is más hasonlatot kell keresnünk, mint egy golyó pörgését. Egy hullám cirkuláris polarizációjára gondolni már sokkal közelebb visz a dolog lényegéhez, csak nem kell nagyon szó szerint vennünk: a spin „forgástengelye” nincs a hullám terjedési irányához kötve, hanem a térben szabadon orientálódhat, amint azt az elfordított Stern–Gerlach-mágnes esete mutatja.

12.1. A feles spin kvantumelmélete: kétkomponensű spinorok és Pauli-mátrixok

Az impulzusmomentum általános elméletében (9.5. pont), amely a felcserélési relációk algebrai elemzésén alapul, készen áll a lehetőség olyan impulzusmomentum-sajátállapotok létezésére, melyeknek bázisa kétféle orientációból áll; ezek komplex szuperpozícióiból lehet kikeverni minden más irányt. Spinről lévén szó, jelöljük ennek a speciális, a részecske belső tulajdonságá-

nak számító, pályamozgást nem igénylő impulzusmomentumnak az operátort \hat{S} -sel. Vektorkomponenseinek felcserélési relációi megegyeznek a (9.32) egyenletekkel, viselve azoknak minden következményét. Mindenekelőtt, \hat{S}_z -nek két sajátértéke van: $+\hbar/2$ és $-\hbar/2$. \hat{S}^2 egyetlen sajátértéke $\hbar^2 s(s+1) = (3/4)\hbar^2$, ahol $s = 1/2$.

A megfelelő sajátvektorok annyira alapvetően fontos tartalmat hordoznak, hogy megérdemlik a saját, stabil jelölést, nem is egyet: Dirac-féle ket-vektor jelölésükből is legalább kétféle van forgalomban, szuperpozícióikat pedig kézenfekvő kételemű oszlopvektorként írni. A jelöléskészlet tehát:

$$\begin{aligned} |1/2, +1/2\rangle &=: |\uparrow\rangle \equiv |+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |1/2, -1/2\rangle &=: |\downarrow\rangle \equiv |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (12.1)$$

Az első a z tengely mentén „felfelé álló spin”, a második a „lefelé álló spin”. Szuperpozícióikat így írhatjuk:

$$|\chi\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle \equiv \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (12.2)$$

ahol α és β komplex számok; a normálás megköveteli, hogy

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (12.3)$$

Hamarosan látni fogjuk, hogy egy ilyen komplex szuperpozíció a háromdimenziós tér meghatározott irányába mutató spinvektort ír le.

A Hilbert-tér feles spinű alterében lakó ilyen kétkomponensű oszlopvektor, amely a háromdimenziós térben való forgáskor meghatározott módon transzformálódik, külön nevet kapott: *spinor*; bővebben: *Pauli-spinor* (mivel másféle spinor is van).

Szokjuk meg, hogy a spinvektor operátora vektor a háromdimenziós térben, és spinorokra ható 2×2 -es mátrix a Hilbert-térben. A sajátvektorok bázisán, a sajátértékek ismeretében közvetlenül felírhatjuk, hogy az \hat{S}_z operátort a következő 2×2 -es mátrix ábrázolja:

$$\hat{S}_z \Rightarrow \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}. \quad (12.4)$$

A (9.42) formulák segítségével, $j = 1/2$ és $m = \pm 1/2$ behelyettesítésével könnyű felírni a léptető operátorok mátrixát is:

$$\hat{S}_+ \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_- \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}. \quad (12.5)$$

Ezekből épül fel $\hat{S}_x = (\hat{S}_+ + \hat{S}_-)/2$ és $\hat{S}_y = (\hat{S}_+ - \hat{S}_-)/2i$ operátora:

$$\hat{S}_x \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_y \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (12.6)$$

Hogy ne kelljen mindig ennyit írni, vezessük be a nevezetes *Pauli-mátrixokat*:

$$\begin{aligned} \sigma_x &:= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; & \sigma_y &:= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \\ \sigma_z &:= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; & \mathbb{1} &:= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (12.7)$$

Ezek segítségével a spinoperátorok komponensei tömören így írhatók:

$$\hat{S}_l \Rightarrow \frac{\hbar}{2} \sigma_l; \quad l = x, y, z. \quad (12.8)$$

A Pauli-mátrixok könnyen belátható tulajdonsága, hogy $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1}$, amiből következik, hogy σ_x, σ_y és σ_z sajátértékei egyaránt ± 1 , emiatt természetesen \hat{S}_x, \hat{S}_y és \hat{S}_z sajátértékei $\pm\hbar/2$. Jegyezzük meg a megfelelő sajátvektorokat is:

$$\begin{aligned} |+\rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} & |-\rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ |+\rangle_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} & |-\rangle_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (12.9)$$

A Pauli-mátrixokkal való ismerkedést kerekítsük le a felcserélési relációikkal: a (9.32) egyenletekből triviálisan következik

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \varepsilon_{jkl} \sigma_l. \quad (12.10)$$

Talán kevésbé triviálisak az *antikommutátorok*:

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} \equiv \sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = \delta_{jk}. \quad (12.11)$$

Hogy ebben a pontban ne csak új fogalmak szótára legyen, számoljuk ki egy tetszőleges φ, ϑ polárszögekkel megadott irányba mutató spinállapotnak megfelelő spinor komponenseit!

Ez a spinor a $+\hbar/2$ sajátértékhez tartozó sajátvektora lesz az adott irányba mutató $(\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta)$ egységvektorra vetített spinvektor-operátornak. Írjuk fel az operátor mátrixalakját:

$$\begin{aligned}\hat{S}_{\varphi, \vartheta} &= \sin \vartheta \cos \varphi \hat{S}_x + \sin \vartheta \sin \varphi \hat{S}_y + \cos \vartheta \hat{S}_z = \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(\sin \vartheta \cos \varphi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin \vartheta \sin \varphi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos \vartheta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{12.12}$$

A kapott 2×2 -es mátrixot diagonalizálva, megkapjuk a sajátvektorokat:

$$|+\rangle_{\varphi, \vartheta} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi/2} \sin \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}; \quad |-\rangle_{\varphi, \vartheta} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \sin \frac{\vartheta}{2} \\ -e^{i\varphi/2} \cos \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}\tag{12.13}$$

Ellenőrizzük, hogy tényleg arra mutatnak-e, amerre kell: $\langle \pm | \hat{S}_x | \pm \rangle = \pm (\hbar/2) \sin \vartheta \cos \varphi$; $\langle \pm | \hat{S}_y | \pm \rangle = \pm (\hbar/2) \sin \vartheta \sin \varphi$, ahogy vártuk.¹

12.2. Spinorforgatás, kvázispin, qubit

Itt az ideje elmeditálnunk azon, hogy a (12.13) formulákban félszögek jelennek meg. Ez nem kevesebbet jelent, mint hogy ha teljesen, 2π -vel körbeforgatjuk a φ , ϑ szögek bármelyikét, akkor bár a spinvektor átlaga visszatér kiinduló értékéhez, a kvantummechanikai állapotvektor nem: neki kétszeres körbejárásra, 4π körbefordulásra van szüksége, hogy egyszer visszaérjen!

Ez nem csalás, nem tévedés: mágneses mezőben megpörgetett spinű neutronok interferenciájával közvetlenül meg lehet figyelni a 4π periodicitást.² Az egész a feles spin furcsa játéka: mivel pl. a z tengely körüli α forgás unitér operátora $\exp((-i/\hbar)\hat{J}_z\alpha)$ és feles spinre $J_z = (\hbar/2)\sigma_z$, így

$$\hat{R}_z(\alpha) = \exp\left(-i \frac{\alpha}{2} \sigma_z\right) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix},\tag{12.14}$$

ami tényleg 4π fordulat után jut el az egységoperátorhoz. Hogy ezt interferenciakísérletekben látni is lehet, az a kvantummechanika váratlan szépségei közé tartozik.

¹ Ha ez az eredmény nem akar kijönni, annak nagy valószínűséggel az az oka, hogy az olvasó elfelejtette a bra-vektorban a komplex számokat konjugálni.

² *Badurek et al.*, 1976.

Tanuljunk meg egy hasznos trükköt: a fenti módon felépülő unitér operátort nagyon könnyű átírni 2×2 -es mátrix alakjába, akkor is, ha ott nem σ_z , hanem egy tetszőleges \vec{u} irány körül forgató $\sigma_{\vec{u}}$ mátrix áll. A trükk arra épül, hogy – amint azt a Pauli-mátrixok megismert tulajdonságaiból könnyű belátni – tetszőleges irány esetén teljesül $\sigma_{\vec{u}}^2 = \mathbb{1}$, emiatt $\sigma_{\vec{u}}$ minden páros hatványa is $\mathbb{1}$, és minden páratlan hatványa $\sigma_{\vec{u}}$. A mátrix exponenciális függvényét viszont hatványsora definiálja. A hatványsorban szétválasztva a páros és páratlan hatványokat, ezt kapjuk:

$$\hat{R}_{\vec{u}}(\alpha) = \exp\left(-i \frac{\alpha}{2} \sigma_{\vec{u}}\right) = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \mathbb{1} - \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \sigma_{\vec{u}}. \quad (12.15)$$

A feles spin szemléletének és matematikájának hasznossága nem korlátozódik a feles spinű elektronra és más elemi részecskékre, hanem minden *két-állapotú* kvantumrendszerre, gyakran használt szóval: *kvázi-spinre*, amelynek dinamikája két állapot szuperpozíciójának fejlődéséből áll.

Az ilyen rendszerek, ha a szuperpozíció koherenciáját elég sokáig fenn tudjuk tartani, sok mindenre használhatók, leginkább információkezelésre. A két állapotba egy bit információt lehet belekódolni: az egyikbe az igent, a másikba a nemet. A kvantummechanika ehhez a szuperpozíciót teszi hozzá. Igen és nem szuperpozíciói: ez a kvantum-bit, elterjedt tömör nevén: *qubit*.

A szuperpozíciók megsokszorozzák az információkezelés lehetőségeit: ez a *kvantum-informatika* álma. A megvalósulás legfőbb korlátja pedig a koherencia elvesztése: a környezet mint zajforrás elmosza a szuperpozíciót, hamarabb, mint hogy a kvantum-számítógép a számítás végére érne. A remélt előnyök azonban óriásiak; a kutatás intenzíven folyik. A területről az olvasó rövid áttekintést találhat az F. függelékben.

Kétállapotú kvantumrendszereket találni egyáltalán nem könnyű feladat. Mivel az atomoknak és egyéb valóságos fizikai rendszereknek sok állapotuk van, ezekből a kísérletezőnek valahogyan ki kell tudnia választani kettőt. Ennek módja annyi, ahányféle rendszer létezik. Tipikus megközelítések: nagyon alacsony hőmérséklettel kizárni a gerjesztett állapotok sokaságát; nagy jóságú rezonátort élesen ráhangolni két állapot energiakülönbségére.

12.3. Feles spin állandó mágneses térben: Larmor-precesszió és Rabi-oszcilláció

Az előző fejezetben már megemlítettük, hogy bár a spin nem köráram és nem is egy elektromosan töltött golyócska pörgése, $\hat{\mu} = \gamma \hat{S}$ mágneses momentum tartozik hozzá. Elektronra a γ giromágneses arány – apró korrekcióktól eltekintve³ – kétszer akkora, mint ha a spin köráram lenne. A neutronnak nincs is töltése, de mégis van feles spinjéhez kapcsolódó mágneses momentuma, ami mögött a benne megbúvó töltött kvarkok hatása rejlik.

Ha a spint B_z homogén mágneses mezőbe helyezzük, a két spinbeállítás energiája különválnak. A rendszer kezdőállapotától függően oszcillál a két energiasajátállapot között, ami – most már tudjuk – a spinvektor irányának folytonos változását jelenti.

A megfelelő klasszikus jelenség az, hogy a mágneses dipólus vektora az $\omega_L = \gamma B$ „Larmor-frekvenciával” körbejárva kúpot ír le a z tengely körül, ez a *Larmor-precesszió*. Most belátjuk, hogy *átlagértékben* a kvantummechanika szerint is ugyanez történik.

Valóban, a mágneses mezőbe helyezett dipólus Hamilton-operátora

$$\hat{H}_{Larmor} = -\hat{\mu} \cdot \hat{B} = -\gamma \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z B = -\frac{\hbar \omega_L}{2} \hat{\sigma}_z. \quad (12.16)$$

Ennek sajátvektorai az $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ és $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ spinbázisvektorok, és a hozzájuk tartozó sajátértékek $-(\hbar/2)\omega_L$, ill. $(\hbar/2)\omega_L$. Ezekből felépíthető az időfüggő Schrödinger-egyenlet általános megoldása: ha (φ, ϑ) a $t = 0$ -beli kezdőállapothoz tartozó spinvektor-orientáció, akkor

$$|\Psi_t\rangle = \begin{pmatrix} a e^{+i\omega_L t/2} \\ b e^{-i\omega_L t/2} \end{pmatrix}, \quad (12.17)$$

ahol $a = \cos(\vartheta/2) \exp(-i\varphi/2)$ és $b = \sin(\vartheta/2) \exp(i\varphi/2)$.

A kapott állapotvektorral kiszámíthatjuk (feladat!), hogy a spinkomponensek átlagai így fejlődnek az időben:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_t | \hat{S}_x | \Psi_t \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \vartheta \cos(\varphi - \omega_L t) \\ \langle \Psi_t | \hat{S}_y | \Psi_t \rangle &= -\frac{\hbar}{2} \sin \vartheta \sin(\varphi - \omega_L t) \\ \langle \Psi_t | \hat{S}_z | \Psi_t \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \vartheta, \end{aligned} \quad (12.18)$$

³ A sok tizedesjegyre megmért korrekciók nem közvetlen hatásaikban fontosak, hanem azért, mert sok tizedesjegyre értjük is őket, és ezzel visszaigazolják, hogy jó úton járunk.

amiről az, aki idáig eljutott a könyv olvasásában, biztosan ránézésre látja, hogy pontosan úgy mozog, ahogy a klasszikus Larmor-precessziótól elvárjuk.

Akkor hát a kvantummechanika tett-e hozzá ehhez a jelenséghez valamit? Igen: azt, hogy mikroszkópikus kvantumrendszerek esetén ezek az átlagok az oszcilláló \hat{S}_x és \hat{S}_y spinkomponensek $\pm\hbar/2$ értékű véletlen mérési eredményeinek statisztikájából rajzolódnak ki.

Kvázi-spinek, vagyis koherens kétállapotú rendszerek nyelvén az eddigiek azt jelentették, hogy ha a rendszer kezdeti állapota nem energiasajátállapot, hanem két különböző energiához tartozó energiasajátállapot (itt: \hat{S}_z -sajátállapotok) szuperpozíciója, akkor minden *nem* megmaradó mennyiség (itt: \hat{S}_x és \hat{S}_y) átlaga oszcillálni fog, a két energiasajátérték különbségének megfelelő frekvenciával. A természetnek ezt a rengeteg változatban eljátszott játékát nevezzük *Rabi-oszcillációnak*, Rabi nyomán, aki repülő atomok és neutronok mágneses spektroszkópiájában először azonosította a jelenséget.⁴

Az eddigi leírásban azonban van egy esetlegesség: az, hogy éppen a két energiasajátvektort választottuk bázisnak. Ha pl. menet közben változtatjuk a mágneses tér irányát, amint az éppen Rabi kísérleteiben is történt, célszerű a leírást fejről a talpára állítani: ne az energiasajátvektorokat, hanem azt válasszuk bázisnak, amit mérni akarunk, és amelyben a kezdeti állapotot preparálni tudjuk!

Finomítsuk ennek megfelelően a jelölést: a (12.1) formulákban felsorolt lehetőségek ne maradjanak mind ekvivalensek, hanem a

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (12.19)$$

jelölést tartsuk fenn a preparálható-mérhető bázisvektorok számára, a két ortonormált energiasajátvektor pedig ezen a bázison legyen

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix}, \quad (12.20)$$

ahol α és β valósak és $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. A sajátvektorokhoz tartozó energiasajátértékek legyenek E_+ ill. E_- , és definiáljuk az

$$\mathcal{R} = \frac{E_+ - E_-}{\hbar} \quad (12.21)$$

⁴ Lásd: [8], 7. kötet, 87.3. pont.

Rabi-frekvenciát. Ekkor egy kezdeti $|\uparrow\rangle$ bázisvektor így fejlődik az időben:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \alpha \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \alpha \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} + \beta \begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} \begin{pmatrix} \alpha^2 + \beta^2 e^{i\mathcal{R}t} \\ \alpha\beta(1 - e^{i\mathcal{R}t}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (12.22)$$

Innen leolvashatjuk annak valószínűségét, hogy t idő után a mérés a rendszert a kezdeti $|\uparrow\rangle$ állapotban találja:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\uparrow(t) = 1 - \mathcal{P}_\downarrow(t) &= \left| \alpha^2 + \beta^2 e^{i\mathcal{R}t} \right|^2 \\ &= |\alpha^2 - \beta^2|^2 + 4\alpha^2\beta^2 \cos^2 \frac{\mathcal{R}t}{2}. \end{aligned} \quad (12.23)$$

Ez tényleg \mathcal{R} frekvenciával oszcillál; az oszcilláció amplitúdója akkor a legnagyobb a háttérhez képest, ha $\alpha^2 = \beta^2 = 1/2$. Ez teljesül nyilvánvalóan, amikor a z -tengely körüli Larmor-precessziót az (x, y) síkban figyeljük meg.

Rabi-oszcillációk előfordulnak a részecskefizikában is, valahányszor a gyorsítóban vagy a természetben preparált kezdőállapotról „kiderül”, hogy nem stacionárius állapot. Ennek nevezetes példája a *neutrínóoszilláció*: a neutrínó – a feles spin kétféle beállításával analóg módon – háromféle „íz” (elektron, müon, tau) szuperpozícióiban létezik. Egy adott környezetben meghatározott szuperpozíciók felelnek meg az energiasajátállapotoknak, ahol az energiasajátértékek nyugalmi tömegükben térnek el egymástól. A neutrínókat keltő reakciókban viszont nem energiasajátállapotok, hanem tiszta ízek keletkeznek, ezért lép fel az oszcilláció a különböző ízek között. Ennek kísérleti bizonyítékai most kezdenek statisztikailag meggyőzővé gyűlni.⁵

12.4. Repülő feles spin

A spint néha egy kristályban rögzített atom hordozza, de sokszor – pl. magában a Stern–Gerlach kísérletben – egy röplő atom. Ilyenkor a spin úgy jelenik meg, mint a folytonosan változó koordináták mellett egy új, kétértékű szabadságfok.

⁵ A neutrínóoszilláció elméletéről lásd a [13] könyben a 9.4. pontot.

Ez megkétszerezi a bázisvektorokat: pl. koordináta-spin reprezentációban egy feles spinű részecske állapotát $|\vec{r}, \sigma\rangle$ bázisvektorok szerint lehet sorbafejteni, amelyek a helyvektor operátora mellett sajátvektorai a $\hat{\sigma}_z$ operátornak is, $\sigma = \pm 1$ sajátértékkel.

Nézzük az alaplóműveleteket! A spintől is függő hullámfüggvény:

$$\Psi_{\sigma}(\vec{r}, t) = \langle \vec{r}, \sigma | \Psi(t) \rangle. \quad (12.24)$$

Jól használható a kétkomponensű spinor-írás mód is:

$$\langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle = \begin{pmatrix} \Psi_{+}(\vec{r}, t) \\ \Psi_{-}(\vec{r}, t) \end{pmatrix}. \quad (12.25)$$

Két állapotvektor skalárszorzata a spinfüggő hullámfüggvényekkel kiszámolva:

$$\begin{aligned} \langle \phi(t) | \Psi(t) \rangle &= \sum_{\sigma} \int d^3 r \phi_{\sigma}^{*}(\vec{r}, t) \Psi_{\sigma}(\vec{r}, t) \\ &= \int d^3 r \phi_{+}^{*}(\vec{r}, t) \Psi_{+}(\vec{r}, t) + \int d^3 r \phi_{-}^{*}(\vec{r}, t) \Psi_{-}(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (12.26)$$

A részecske megtalálásának valószínűség-sűrűsége:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_{\sigma} |\Psi_{\sigma}(\vec{r}, t)|^2. \quad (12.27)$$

Annak valószínűsége, hogy a részecskét akárhol, de +, ill. – spinbeállással fogjuk megtalálni:

$$P_{\pm}(t) = \int |\Psi_{\pm}(\vec{r}, t)|^2 d^3 r. \quad (12.28)$$

Ha a részecskére, atomra, ionra vagy molekulára spinfüggő erők, tipikusan mágneses mezők hatnak, ezt a formalizmust kell használnunk spin és pálya együttes mozgásának leírására. Homogén mágneses térben csak a spin pörög; erről szól a következő pont. Inhomogén mágneses térben a mágneses momentumra $\vec{V}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = (\vec{\mu} \cdot \vec{V})\vec{B}$ erő hat; ez okozza magát a Stern–Gerlach-effektust is. A létrejövő mozgás elmélete az előző fejezetben bemutatott (11.11) Hamilton-operátoron alapul, amely a (12.25) állapot időbeli fejlődését vezérlő Schrödinger-egyenleten⁶ keresztül meghatározza a repülő spinek dinamikáját, és még sok más jelenséget.

Képzeljünk el egy homogén mágneses térben mozgó neutron. Elképzelhetjük úgy, hogy a röpülő hullámcsomagon ül a neutron spinje és pörög. Ha

⁶ A spinfüggő erőket is tartalmazó nemrelativisztikus Schrödinger-egyenletet először Pauli írta fel, ezért Pauli-egyenletnek is nevezik.

azonban a neutront jól monokromatizáltuk, ami a neutroninterferencia kísérleteknél szokásos, akkor a hullámcsomag hosszabb, mint az az út, amelyen a Larmor-precesszió spin egyet körbefordulna.

Ilyenkor a valósághoz közelebb áll egy másfajta kép,⁷ amely a síkhullámokból összetevődő stacionárius állapothoz áll közelebb. Eszerint ha a neutron egy d hosszúságú szakaszon halad a mágneses mezőben, ott a spin (12.16) potenciális energiája miatt megváltozik a mozgás hullámszáma, mégpedig a két spin-komponensre különbözőképpen:

$$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2M} = \frac{\hbar^2 k_{\pm}^2}{2M} \mp \frac{\hbar\omega_L}{2}, \quad (12.29)$$

amit gyenge mágneses térre sorbafejthetünk ω_L szerint; az eredmény:

$$k_{\pm} \approx k_0 \pm \frac{\omega_L}{2 v_{csop}}, \quad (12.30)$$

ahol $v_{csop} = \hbar k/M$ a csoportsebesség. A két részhullám között a d hosszúságú szakaszon felvett fáziskülönbség tehát

$$\Delta\varphi = (k_+ - k_-) d = \omega_L t, \quad t = \frac{d}{v_{csop}}, \quad (12.31)$$

ami megegyezik a repülő hullámcsomag képéből adódó eredménnyel.

A fenti képből az optikában képzett olvasónak biztosan a kettős törés, esetleg a mágneses térre való tekintettel a Faraday-effektus jut eszébe. Itt és most azonban kvantummechanikáról beszélünk, és fontosabb egy másik asszociáció. Ami itt történik, az hasonlít a Stern–Gerlach-effektushoz, amennyiben a két részhullám spinbeállításától függően különbözőképpen mozog. Ez azonban *gyenge Stern–Gerlach*, amelyben a hullámcsomagok nem válnak szét, hanem együtt maradva interferálnak; ez okozza a spin Larmor-precesszióját.

12.5. A feles spin állapotainak mérése (rekonstrukciója)

A kvantumállapot nem tartozik a „mérhető fizikai mennyiségek” közé, de mérésekkel meg lehet határozni. Neumann János könyve szerint ehhez sokszor azonosan újra kell preparálni a kvantumállapotot, és különböző „mérhető fizikai mennyiségeket” sorozatban mérni rajta.

⁷ Mezei Ferenc, 1988

A kvantumállapot mérésének – divatos szóval: rekonstrukciójának – újabbban egy kicsit másféle stratégiája alakult ki: ugyanazt a mérhető mennyiséget mérjük sokszor, de előtte különböző unitér (koherens, a Schrödinger-egyenletnek megfelelő) műveleteket, tipikusan: forgatások sorozatát végezzük a rendszeren. Ezzel, mintha az állapotvektort körbejárva, sokféle irányból néznénk rá, emlékezetünkben (a mérésfeldolgozást végző számítógép memóriájában) kirajzolódik minden részlete. Hasonló műveletsorozatot követ az orvosi tomográfia is, ezért az eljárás másik használatos neve: a kvantumállapot tomográfiája.

A feles spin állapotát két szám határozza meg: a ϑ és φ polárszögek. A fenti stratégia szerint mindig az \hat{S}_z spinkomponenst mérjük egy Stern–Gerlach méréssel.

Amikor közvetlenül a forrásból jövő spines részecskén végezzük el a Stern–Gerlach analízist, abból a ϑ szöget lehet megmérni: $P_{\uparrow} = \sin^2(\vartheta/2)$. Ha a Stern–Gerlach mágneses szeparátor előtt a részecskenyalábot áteresztjük egy x irányú elektromágnes tekercsen, amely az x irány körül adott szöggel elforgatja a spint, az utána következő Stern–Gerlach \hat{S}_z mérés eredményében megjelenik a másik polárszög is.

Gyakorlat: számoljuk végig részletesen a feles spin állapotának rekonstrukcióját.

12.6. Mágneses rezonancia

A (12.18) átlagok kimérésének, és ezen keresztül az ω_L frekvencia pontos meghatározásának létezik hatékonyabb módja is, mint a \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z komponensek direkt detektálása. Ez a *mágneses rezonancia* módszere: az anyagminta helyén az állandó mágneses mezőre merőleges, $\omega \approx \omega_L$ körüli frekvenciával oszcilláló mezőt is létrehozunk. Ha a frekvenciát pontosan eltaláljuk, a rendszer rezonanciaszerűen energiát vesz fel az oszcilláló mezőből. A tipikus frekvenciák elektronspin esetén a mikrohullámok, magspinek esetén a rádiófrekvenciák tartományába esnek. A módszer a legpontosabb anyagvizsgálati eszközök közé tartozik, amely finoman feltérképezi az atomok helyén különböző okokból fellépő mágneses mezőket. A magrezonanciára nagyfelbontású képalkotó orvosi diagnosztikai eszköz (MRI: Magnetic Resonance Imaging) épül.

A jelenség időfüggő perturbációs számítással (13.2. pont) könnyen leírható, mint a spektroszkópia kiterjesztése az optikai tartományból a kisebb frekvenciák felé. A perturbációs számítás odáig követi a mozgást, amíg egy kvantumrendszer *elkezd* átmenni az egyik stacionárius állapotból a másikba. A közönséges spektroszkópiában vizsgált atomok és molekulák elektronjai

eközben a környezeti kölcsönhatások (mondhatjuk így is: zajok) következtében gyorsan elveszítik kvantummechanikai koherenciájukat, és a perturbációszámításból kapott átmeneti valószínűség teljes jellemzését adja a kapott spektrumoknak. Az 1940-es években azonban Felix Bloch úttörő munkái nyomán kiderült, hogy az atommagok spinje a környezettől különlegesen jól elszigetelt kvantumrendszert alkot, amelynek hosszú életű koherenciája miatt jobb elméleti leírást kapunk, ha egyenleteinkkel a rádiófrekvenciás térben szabadon pörgő spin képét rajzoljuk ki. Ez a „mágneses indukció” jelenségköre, amely oda-vissza átmenetek gazdag kombinációit mutatja fel a kvantummechanikai koherencia élettartama alatt.

Az elméleti leírást megkönnyíti egy olyan trükk, amely éppen az ellenkezője a kölcsönhatási kép⁸ filozófiájának: ülünk bele a Larmor-precesszióval együttforgó koordinátarendszerbe; ezzel a perturbálatlan mozgást nem hogy nagyfrekvenciájúvá, hanem éppen mozdulatlaná transzformáljuk.⁹

Induljunk ki egy $(B_x, B_y, B_z) = (B_1 \cos(\omega t + \delta), -B_1 \sin(\omega t + \delta), B_0)$ mágneses mezőből, amelynek (x, y) vetülete a (12.18) Larmor-precesszióval egyező irányban forog. A hozzá tartozó Hamilton-operátor:

$$\hat{H}(t) = -\frac{\hbar}{2} [\omega_L \hat{\sigma}_z + \Omega \hat{\sigma}_u(t)] \quad (12.32)$$

ahol $\omega_L = \gamma B_0$, $\Omega = \gamma B_1$,

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_u(t) &= \cos(\omega t + \delta) \hat{\sigma}_x - \sin(\omega t + \delta) \hat{\sigma}_y \\ &= e^{\frac{i}{2}(\omega t + \delta)\hat{\sigma}_z} \hat{\sigma}_x e^{-\frac{i}{2}(\omega t + \delta)\hat{\sigma}_z} \end{aligned} \quad (12.33)$$

a $-(\omega t + \delta)$ szöggel elforgatott $\hat{\sigma}_x$ operátor, és felhasználtuk a forgatás operátorának (12.14) alakját.

Írjuk fel a Schrödinger-egyenletet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \\ &= -\frac{\hbar}{2} \left[\omega_L \hat{\sigma}_z + \Omega e^{\frac{i}{2}(\omega t + \delta)\hat{\sigma}_z} \hat{\sigma}_x e^{-\frac{i}{2}(\omega t + \delta)\hat{\sigma}_z} \right] |\psi(t)\rangle. \end{aligned} \quad (12.34)$$

Most térünk át a Larmor-precesszióval együttforgó koordinátarendszerre, ami kvantummechanikában azt jelenti, hogy bevezetjük a

$$|\phi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{2}(\omega t + \delta)\hat{\sigma}_z} |\psi(t)\rangle \quad (12.35)$$

⁸ Lásd a D. függelékben.

⁹ Lásd pl.: [15].

transzformált állapotvektort. Az inverz transzformáció:

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(\omega t + \delta)\hat{\sigma}_z} |\phi(t)\rangle; \quad (12.36)$$

ezt felhasználva megkapjuk $|\phi(t)\rangle$ Schrödinger-egyenletét a forgó koordináta-rendszerben:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = -\frac{\hbar}{2} [(\omega_L - \omega) \hat{\sigma}_z + \Omega \hat{\sigma}_x] |\phi(t)\rangle. \quad (12.37)$$

Ez a keresett egyenlet: a forgó koordináta-rendszerben, pontos $\omega = \omega_L$ rezonancia esetén, az állapotvektor $\Omega = \gamma B_1$ körfrekvenciával forog oda-vissza a spin-fel és spin-le bázisállapotok között. Ha a forgó mágneses teret adott t hosszúságú impulzusokban kapcsoljuk be, tetszésünk szerint végezhetünk pl. $\Omega \Delta t = \pi/2$ vagy π szögű spinforgatást. Ezekre a műveletekre és kombinációikra a magrezonancia-spektroszkópia bonyolult és roppant hatékony stratégiái épülnek.

Ha a feles spin állapotait egy bit információ fizikai hordozójának tekintjük, a π spinforgatás jelenti a „nem” logikai kaput, a $\pi/2$ forgatás pedig egy olyan műveletet – az ún. „Hadamard kaput,” – amely a klasszikus információkezelésben nem létezik, csak a kvantuminformációban: igen és nem koherens szuperpozíciójának létrehozását.

13. fejezet

Perturbációszámítás

A Schrödinger-egyenletet általában nehéz megoldani. Nemcsak hatványokból és trigonometrikus függvényekből nem lehet összerakni a megoldásait, de többnyire még a legnagyobb könyvekben vagy adatbázisokban megtalálható speciális függvényekből sem, amelyek pedig az emberiség egyik folyamatosan gyarapodó kultúrkincsét alkotják. A numerikus megoldások, a belőlük felépülő függvénygrafikonokkal, nagyon sok információt adnak a dolgok természetéről, de sokan úgy érzik, egy kis formula azért mégiscsak sokkal jobb lenne, akkor is, ha nem olyan pontos.

Ekkor kezd az ember közelítő módszerek után nézni, és ezek között előkelő helyen áll a perturbációszámítás. Az az alapgondolata, hogy a bonyolult problémák sokszor közel állnak valami kevésbé bonyolulthoz, csak valami kis zavaró körülmény – perturbáció – teszi őket bonyolulttá. Kézenfekvő stratégia: oldjuk meg először a közeli egyszerűt, és használjuk ki, hogy a perturbáció viszont kicsi. Ezt Rayleigh fejlesztette matematikai módszerré akusztikai és optikai hullámok tárgyalására, és Schrödinger vette át a kvantummechanika céljaira.

Rayleigh ilyen kérdéseket vizsgált: hogyan változik meg egy dob hangja attól, hogy membránjára egy kis baracklevél kerül? Schrödinger pedig illet: hogyan változik meg egy atom színképe, ha mágneses mezőbe tesszük?

Azért az ördög nem alszik; nem minden kicsiny perturbáció, ami annak látszik. Ha az atomra nem mágneses, hanem elektromos tér hat, annak csak egyik következménye a színképvonalak eltolódása, a *Stark-effektus*. A másik az, hogy a csökkenő potenciál oldalán a Coulomb-potenciál átjárhatóvá lesz a kialagutazni vágyó elektron számára: a tér előbb–utóbb *ionizálja* az atomot, ami a külső áramkörben elektronsokszorozás útján mérhető jelet adhat. Ennek gyakorisága nemcsak az elektromos térerősségtől függ erősen, hanem az elektron kezdeti bezárt állapotától is, ezért az effektust semleges atomok állapot-szelektív detektálására lehet használni.

Ebben a fejezetben viszont célunk megtanulni a perturbációszámítást, ami nélkül a kvantummechanika nem lenne az, ami.

13.1. Időtől független perturbációszámítás: elfajult és el nem fajult eset

Írjuk a Schrödinger-féle energiasajátérték-egyenletet mátrixalakba:

$$\sum_n H_{mn} c_n = E c_m \quad (\forall m), \quad (13.1)$$

ahol c_m az állapotvektor kifejtési együtthatója valamilyen $|m\rangle$ bázison: $|\psi\rangle = \sum_m c_m |m\rangle$, és $H_{mn} = \langle m | \hat{H} | n \rangle$ a Hamilton-operátor mátrixeleme ugyanezen a bázison.

Legyen $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$, és próbáljuk kihasználni azt, hogy

- \hat{H}_0 sajátérték–problémáját meg tudjuk oldani,
- \hat{W} valamilyen gyenge hatásnak felel meg.

Egy operátor aszerint gyenge vagy erős, hogy milyen függvényre hat, de a gyenge hatást jól jellemzi, ha az operátor mátrixelemei kicsinyek:

$$W_{mn} \ll (H_0)_{mn}.$$

A kicsiség kihasználásának Rayleigh-tól eredő trükkje, hogy írjunk be egy dimenziótlan λ „kis paramétert”:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{W}, \quad (13.2)$$

ami később visszkapja $\lambda = 1$ értékét, de először sorbafejtünk a hatványai szerint, és ilyen sorfejtés alakjában keressük a (13.1) egyenlet megoldását. A λ^0 rendet \hat{H}_0 ismert megoldása adja.

Akkor viszont bázisnak érdemes \hat{H}_0 ismert sajátvektorait használni: legyen

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle; \quad (H_0)_{mn} = E_m^{(0)} \delta_{mn}. \quad (13.3)$$

Ezen a bázison a (13.1) egyenlet így alakul:

$$(E_m^{(0)} - E) c_m + \lambda \sum_n W_{mn} c_n = 0. \quad (13.4)$$

Most jön a λ hatványai szerinti sorfejtés, az E_m sajátértékben is, a c_m állapotvektorban is (az elsőben λ^2 rendig, a másodikban λ^1 rendig követjük a megoldás menetét):

$$\begin{aligned} E &= E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots, \\ c_m &= c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} + \dots \end{aligned} \quad (13.5)$$

Írjuk be ezeket a (13.4) Schrödinger-egyenletbe:

$$(E_m^{(0)} - E^{(0)} - \lambda E^{(1)} - \lambda^2 E^{(2)} - \dots)(c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} + \dots) + \lambda \sum_n W_{mn}(c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)} + \dots) = 0. \quad (13.6)$$

A következő lépés természetesen adódik: össze kell gyűjteni λ különböző hatványainak együtthatóit, nullától felfelé haladva.

A nulladik rend ezt adja:

$$(E_m^{(0)} - E^{(0)}) c_m^{(0)} = 0, \quad \forall m. \quad (13.7)$$

Ez az a pont, ahol különválnak a perturbációs számítás „elfajult” és „nem elfajult” esete. Az elfajulás kérdése a \hat{H}_0 operátorra vonatkozik; elfajult esetről akkor beszélünk, ha az $E_m^{(0)}$ perturbálatlan energiasajátértékek között azonosak is vannak.

13.1.1. Perturbációs számítás nem elfajult esetben

Ha az $E_m^{(0)}$ sajátértékek mind különböznek egymástól, akkor a (13.7) egyenlet megoldása triviális: vagy $E^{(0)} = E_m^{(0)}$, vagy $c_m^{(0)} = 0$. Induljunk ki mondjuk az i -edik perturbálatlan sajátállapotból, ezt válasszuk nulladik közelítésnek:

$$E^{(0)} = E_i^{(0)}, \quad c_m^{(0)} = \delta_{im}. \quad (13.8)$$

Ettől kezdve a megoldás akadálytalanul megy a maga útján. A (13.6) egyenletből is vegyük ki először az $m = i$ sort: akkor a nulladrendű tagok éppen kiesnek, és ez marad:

$$\left. \begin{aligned} &(-\lambda E^{(1)} - \lambda^2 E^{(2)} - \dots)(1 + \lambda c_i^{(1)} + \dots) \\ &+ \lambda \left(W_{ii}(1 + \lambda c_i^{(1)} + \dots) + \sum_{n \neq i} W_{in}(\lambda c_n^{(1)} + \dots) \right) = 0. \end{aligned} \right) \quad (13.9)$$

Elérkeztünk az első eredményhez. A λ^1 rendű tagokból leolvashatjuk az $E_i^{(0)}$ perturbálatlan energia elsőrendű perturbációját:

$$E^{(1)} = W_{ii} = \langle i | \hat{W} | i \rangle = \int \phi_i^*(\vec{r}) \hat{W} \phi_i(\vec{r}) d^3 r. \quad (13.10)$$

Ez érdekes és megjegyzésre feltétlen érdemes eredmény: a perturbáló operátort a *perturbálatlan* sajátállapotokra átlagolva kapjuk az energia elsőrendű

korrekcióját. Ez az eredmény különösen a statisztikus fizikában futott be óriási karriert: ezen alapul a lineáris válasz és a fluktuáció-disszipáció tételek egész fegyvertára.

Még mindig az $m = i$ sornál maradva: ha a (13.10) eredményt visszaírjuk a (13.9) egyenletbe, onnan már csak másodrendű tagokat kapunk; ezekből

$$E^{(2)} = \sum_{n \neq i} W_{in} c_n^{(1)}. \quad (13.11)$$

A továbblépéshez már a (13.6) egyenlet $m \neq i$ soraira van szükségünk: felhasználva, hogy $E^{(0)} = E_i^{(0)}$,

$$\begin{aligned} (E_m^{(0)} - E_i^{(0)} - \lambda E^{(1)} - \lambda^2 E^{(2)} - \dots)(\lambda c_m^{(1)} + \dots) \\ + \lambda \left(W_{mi}(1 + \lambda c_i^{(1)} + \dots) + \sum_{n \neq i} W_{mn}(\lambda c_n^{(1)} + \dots) \right) = 0. \end{aligned} \quad (13.12)$$

Innen a λ^0 és λ^1 tagokat megtartva kapjuk meg következő eredményünket, az állapotvektor elsőrendű korrekcióit:

$$c_m^{(1)} = \frac{W_{mi}}{E_i^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (13.13)$$

Ezt visszaírva a (13.11) formulába, végül megkapjuk az E_i energiasajátérték másodrendű perturbációját:

$$E^{(2)} = \sum_{n \neq i} \frac{|W_{in}|^2}{E_i^{(0)} - E_n^{(0)}}. \quad (13.14)$$

Ezen a ponton kell megkérdeznünk, hogy mi is a feltétele annak, hogy a perturbációs sorfejtésnek valami esélye legyen a konvergenciára, vagyis hogy a sorfejtés első 1-2 tagjából tényleg megértsünk valamit a világ működéséről. A válasz legvilágosabban a (13.13) egyenletből látszik: a perturbáció átmeneti mátrixelemeinek kell kicsinek lenniük a perturbálatlan energiaszintek különbségéhez képest: a perturbációs számítás jól működik, ha

$$\left| \frac{W_{mi}}{E_i^{(0)} - E_m^{(0)}} \right| \ll 1. \quad (13.15)$$

Egy esetben biztosan nem működik az eddigi eljárás: ha \hat{H}_0 elfajult, vagyis ha az energianevezők között nullák vannak. Ám ez az eset sem reménytelen, csak hozzá kell igazítani a módszert. Erre térünk most át.

13.1.2. Perturbációs számítás elfajult esetben

Ha az $E_m^{(0)}$ perturbálatlan energiaszintek között azonosak is vannak, a (13.7) egyenlet nem határozza meg a $c_m^{(0)}$ együtthatókat; erre is a következő λ^1 rendet kell felhasználni. Mivel a (13.8) választás most nem használható, a (13.10) egyenlet is elbonyolódik:

$$\sum_n W_{mn} c_n^{(0)} = E^{(1)} c_m^{(0)}, \quad (13.16)$$

vagyis a helyes nulladrendű állapotvektorokat úgy kapjuk meg, hogy az elfajult altéren a *perturbáció* operátorát diagonalizáljuk.

Hogy ezt hogy kell csinálni, azt mindenki tudja, aki a mátrixműveletek és a Hilbert-tér elemeit egyszer megtanulta. Vegyünk egy p -szeresen elfajult $E_i^{(0)}$ sajátértéket és a hozzá tartozó $|i1\rangle, |i2\rangle, \dots, |ip\rangle$ bázisvektorokat, ezekkel számoljuk ki a perturbáció $W_{rs}^i = \langle ir | \hat{W} | is \rangle$ mátrixelemeit; végül oldjuk meg a p -edfokú karakterisztikus egyenletet:

$$\begin{vmatrix} W_{11}^i - E^{(1)} & W_{12}^i & W_{13}^i & \dots & | \\ W_{21}^i & W_{22}^i - E^{(1)} & W_{23}^i & \dots & | \\ W_{31}^i & W_{32}^i & W_{33}^i - E^{(1)} & \dots & | \\ \vdots & & & \ddots & | \end{vmatrix} = 0, \quad (13.17)$$

amely az $E^{(1)}$ elsőrendű energiakorrekció sajátértékeit szolgáltatja.

Az elfajult perturbációs számítás alkalmazásainak se szeri, se száma. Az alapjelenség az, hogy a szimmetria okozta elfajulást *feloldja* egy kevésbé szimmetrikus perturbáció; az alappélda a Zeeman-effektus, ahol egy gömbölyű atom különböző m mágneses kvantumszámhoz tartozó elfajult szintjeit bontja szét a mágneses mező, amelynek iránya van, tehát nem gömbszimmetrikus.

A különböző elfajult altérek sokaságában való eligazodáshoz nagy segítséget jelenthetnek a csoportelméleti módszerek; segítségükkel megtalálhatjuk a perturbáció valamilyen szimmetriaművelettel szemben invariáns altéreit, és a perturbáló mátrix a diagonális mentén blokkokra bomlik szét, amelyek karakterisztikus egyenleteit egyenként oldhatjuk meg.

Elfajulás nemcsak szimmetria miatt jöhet létre, hanem akkor is, ha egy λ paramétertől függő Hamilton-operátor két perturbálatlan sajátértéke, $E_m^{(0)}(\lambda)$ és $E_n^{(0)}(\lambda)$ a paraméter függvényében valahol keresztezné egymást. Amint azt Wigner Jenő és Neumann János nem túl számos közös munkájuk egyikében megmutatta, ilyenkor a rendszer hiper-érzékennyé válik a perturbációkra, amelyek – hacsak valami okból nem ugyanott tűnnek el – az el-

fajulást feloldják és a keresztezést eltűntetik. Ez a híres „nem-keresztezés szabálya” (angolul: non-crossing rule).

A kis perturbáció miatt elkerült keresztezésnek számtalan példája van a molekulák fizikájában, ahol az elektronspektrumok esetén a hangoló paraméter szerepét a magok pillanatnyi helyzete játssza el. Bonyolult rendszerek, mint amorf (nem-kristályos) szilárd anyagok vagy nehéz atommagok spektrumában az energiaszintek véletlenszerűnek látszó eloszlásában is döntő szerepe van az elkerült keresztezésnek: emiatt a teljesen véletlen Poisson-eloszláshoz képest jóval ritkábban kerül két szint egymás közvetlen közelébe; a szintek energiában mért *távolságának* eloszlása meredeken levág a nulla közelében. Ezt a „szint-statisztika” nevű kutatási területet is Wigner Jenő indította útjára.

13.2. Időtől függő perturbációk; kölcsönhatási kép; a Fermi-féle aranyszabály

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásának is fontos módszere a perturbációszámítás: a $(d/dt)|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$ egyenlet megoldása

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{W}(t), \quad (13.18)$$

alakú időfüggő Hamilton-operátor esetén, a λ „kis paraméter” hatványai szerint haladó sorfejtés segítségével. A módszer első változatát Dirac dolgozta ki; később hihetetlenül gazdag és hatékony technika épült rá, amellyel elméleti fizikusok seregei bontogatják az ismeretlen világ falait.

Az, hogy mikor elég „gyenge” a perturbáció ahhoz, hogy a sorfejtés konvergáljon és már az alacsony rendek is jó közelítést jelentsenek, itt még nehezebb kérdés, mint az energiasajátérték problémájának perturbációs kezelésénél. Kis változások is felhalmozódhatnak hosszú idő alatt, úgy hogy az időfüggő perturbációszámítás alapvetően rövid idejű változásokra érvényes. Vannak azonban minősített esetek, amikor a módszer jobb, mint ebből az óvatoskodó meggondolásból hinnénk:

- hosszú időkre általában a környezeti hatások miatt elromlik a szuperpozíciók koherenciája, emiatt romlik az esélye a hosszú idejű változások felhalmozódásának;
- folytonos spektrumú rendszerekben van egy közbenső időskála, amelyen az eredmények leegyszerűsödnek, de a perturbációszámítás még jól működik. Erre vonatkozik a Fermi-féle aranyszabály (lásd alább).

13.2.1. Dirac módszere

Most is a Schrödinger-egyenlet mátrixalakját használjuk. \hat{H}_0 sajátvektorainak ($\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$) bázisán kifejtve az állapotvektort ($|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$), a (13.18) Hamilton-operátorral a Schrödinger-egyenlet:

$$\dot{c}_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \left(E_m c_m(t) + \lambda \sum_n W_{mn}(t) c_n(t) \right). \quad (13.19)$$

A megoldást hatványsor alakjában keressük:

$$c_m(t) = c_m^{(0)}(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \dots, \quad (13.20)$$

ahol a nulladik rend gyors, de triviális változást ír le:

$$c_m^{(0)}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} c_m(0). \quad (13.21)$$

A továbblépés kézenfekvő útja a közönséges differenciálegyenletek megoldásának az a módszere, amit „állandók variálásának” neveznek; operátorok nyelvén megfogalmazva ebből lett a „kölcsönhatási kép” (lásd a D. függelékben). Vezessük be a

$$b_m(t) := e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} c_m(t) \quad (13.22)$$

menyiséget, amely az előző egyenlet szerint λ^0 rendben állandó; ez az az „állandó”, amit „variál” a perturbáció jelenléte. Felhasználva a (13.19) és (13.21) egyenleteket és a (13.22) definíciót, ezt kapjuk:

$$\begin{aligned} \dot{b}_m(t) &= -\frac{i}{\hbar} \lambda \sum_n e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} W_{mn}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} b_n(t) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \lambda \sum_n e^{i\omega_{mn}t} W_{mn}(t) b_n(t), \end{aligned} \quad (13.23)$$

ahol bevezettük az $\omega_{mn} := (E_m - E_n)/\hbar$ jelölést.

A perturbációszámítás λ^1 -rendű közelítését egyszerűen akkor kapjuk, ha a jobboldalon $b_n(t)$ -t kezdeti értékével, $b_n(0) = c_n(0)$ -val közelítjük minden t -re. Ekkor az egyenletet közvetlenül integrálhatjuk az idő szerint: beírva a $\lambda = 1$ értéket,

$$b_m(t) \approx -\frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t e^{i\omega_{mn}t'} W_{mn}(t') dt' c_n(0). \quad (13.24)$$

Legyen a kezdeti állapot egy \hat{H}_0 -sajátállapot: $c_n(0) = \delta_{in}$. Annak a valószínűsége, hogy egy későbbi t pillanatban a rendszert egy különböző, $f \neq i$ végállapotban találjuk, más szóval: az átmenet valószínűsége, a (13.24) egyenlet alapján¹

$$P_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t') dt' \right|^2. \quad (13.25)$$

Az eredmény tartalma roppant szemléletes.² A perturbálatlan Hamilton-operátor „nagy” abban az értelemben, hogy az ω_{mn} frekvenciák határozzák meg a leggyorsabb változások időskáláját. Emiatt az integrandus gyorsan oszcillál, és eredője közel lesz a semmihez, *kivéve* ha a $W_{fi}(t)$ perturbáció ugyanilyen frekvenciával oszcillál! Akkor ugyanis, ha mondjuk $W_{fi}(t) = W_{fi}^0 \sin(\omega_{fi}t)$, ennek $(i/2) \exp(-i\omega_{fi}t)$ összetevője kompenzálja az integrandusban levő $\exp(i\omega_{fi}t)$ tényezőt, kettejük szorzata konstans, integrálja pedig nagy és az idővel arányosan növekszik.

Ezt a magyarázatot adja az időfüggő perturbációs számítás az időben periodikus külső mező – legtöbbször: *fény* – által okozott kvantumátmenetek rezonanciaszerű viselkedésére. Nincsen ebben semmi ugrásszerű, minden az időben folytonos Schrödinger-egyenlet szerint történik, de mégis, az átmenetek gyorsak, ha $h\nu$ a Bohr-feltételnek megfelelően eltalálja a kezdeti és végállapot energiakülönbségét.

Akkor is, ha a bejövő-perturbáló fényt „klasszikus” külső hatásnak tekintjük, ami bár korlátozott érvényű, de hasznos közelítés, a Bohr-feltételről eszünkbe kell hogy jusson az energia megmaradása egyetlen foton elnyelődésénél és kisugárzásánál. Az energia–idő határozatlansági relációból azt sejtjük, hogy a rezonancia annál élesebb lesz, minél hosszabb időt engedünk a fény által keltett átmenetnek. Az egyfotonos folyamatok és az erős fényben lejátszódó átmenetek közötti pontos kapcsolatot azonban csak az elektromágneses tér kvantumelmélete alapján lehet feltárni. Ezzel foglalkozunk a 13.3. pontban.

¹ Az „i” és „f” indexek hagyományosak és beszédesek: az angol „initial” (kezdeti), ill. „final” (végső) szavak rövidítései.

² Érdemes odafigyelni arra, hogy ha a kezdőállapot *nem* egyetlen perturbálatlan energia-sajátállapot, hanem mondjuk kettőnek a szuperpozíciója, akkor egy közös végállapotba való átmenet valószínűségében a két forrásból jövő „réshullámok” interferálhatnak: az átmeneti valószínűség értelmetlenné látszó fogalma csak egyszerű esetekben felel meg klasszikus valószínűségi számításra nevelkedett szemléletünknek.

13.2.2. Átmenetek a folytonos spektrumban; a Fermi-féle arany szabály

A 13.2.1. alpont végén említett speciális eset: az időben periodikusan változó külső perturbáció annyira fontos, hogy megérdemli az alaposabb vizsgálatot.³ Legyenek tehát $|i\rangle$ és $|f\rangle$ most is a perturbálatlan \hat{H}_0 sajátállapotai, és a perturbáció átmeneti mátrixelemei legyenek ilyen alakúak:

$$W_{fi}(t) = W_{if}^*(t) = W_{fi} \cdot 2 \cos \omega t = W_{fi} [\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)]. \quad (13.26)$$

Helyettesítsük be ezt a (13.25) formulába:

$$\begin{aligned} P_{fi} &= \frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t \left(e^{i(\omega_{fi} + \omega)t'} + e^{i(\omega_{fi} - \omega)t'} \right) dt' \right|^2 \\ &= \frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \\ &= \frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} \left| e^{i(\omega_{fi} + \omega)\frac{t}{2}} \frac{\sin \left[(\omega_{fi} + \omega)\frac{t}{2} \right]}{(\omega_{fi} + \omega)\frac{t}{2}} + e^{i(\omega_{fi} - \omega)\frac{t}{2}} \frac{\sin \left[(\omega_{fi} - \omega)\frac{t}{2} \right]}{(\omega_{fi} - \omega)\frac{t}{2}} \right|^2 \cdot t^2. \end{aligned} \quad (13.27)$$

Ezen a ponton konkretizáljuk élesebben, hogy miről is beszélünk. A fenti formulák akkor hasznosak, ha a $\hbar\omega_{fi}$ perturbálatlan energiakülönbségek sűrűn helyezkednek el az energiatengelyen, vagyis ha a rendszernek kvázifolytonos spektruma van.⁴ Ennek megfelelően, nézzük az eredményt adott $\omega > 0$ frekvenciájú külső jel esetén ω_{fi} függvényében.

A (13.27) egyenlet sor végén megjelenő kifejezésnek elég hosszú idő, $\omega t \gg 1$ esetén⁵ ω függvényében két csúcsa van.

- Az első csúcs a spektrumnak azon a részén jelentkezik, ahol $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar \approx -\omega$. Mivel értelemszerűen $\omega > 0$, ez a csúcs olyan átmeneteket választ ki, amelyekre $E_i > E_f$, vagyis ahol a kezdeti állapot *gerjesztett*, és a periodikus külső hatás a rendszert energiában *lefelé* nyomja, miközben a felszabaduló energiakülönbség hozzáadódik a

³ Érdemes hangsúlyozni, hogy itt és a következőkben mindig a Schrödinger-képben számolunk: az operátorok időfüggése csak a külső terek explicit időfüggéséből ered.

⁴ A kritérium két szomszédos frekvencia közötti távolságra: $\Delta\omega \ll 1/t \ll \omega$. Ha az idő túl hosszú, a rendszer érezni kezdi, hogy a spektrum diszkrét: elértük a klasszikus mechanikából ismert „Poincaré-ciklusok” idejét.

⁵ Ennyi idő kell, hogy igazán kiderüljön, hogy a bejövő jel periodikus volt.

külső tér energiájához! Ezt nevezzük Einstein nyomán *indukált emisszió*nak vagy *stimulált emisszió*nak. Ez a folyamat erősíti a bejövő jelet. Ezen alapul a lézer működése: az erősítő köré csak tükrökből álló visszacsatolás kell, hogy oszcillátorrá váljék.

- A második csúcs $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar \approx \omega$ esetén jelenik meg: ez akkor működik, ha $E_f > E_i$, vagyis ha a végállapot magasabban van energiában, mint a kezdeti állapot. Ilyenkor a periodikus külső hatás a rendszert gerjeszti, miközben a rendszer a megfelelő energiakülönbséget elnyeli a külső térből. Ez az *abszorpció* esete.

A csúcsok szélessége az első zérushelyek távolságában mérve $\Delta\omega = 4\pi/t$, vagyis energiában:

$$\Delta E = 4\pi \frac{\hbar}{t}. \quad (13.28)$$

Ez nyilvánvalóan az energia–idő határozatlansági reláció egyik megjelenése: ahogy az idő halad, a rezonanciaszerűen kiválasztott végállapotok egyre élesebben választódnak ki a kontinumból, adott E_i energiájú kezdőállapot esetén két lehetséges energiaérték körül: $E_i + \hbar\omega$, ahova abszorpcióval juthat el a rendszer, és $E_i - \hbar\omega$, ahova indukált emisszióval.⁶

Ha teljesül a már többször említett $t \gg \omega^{-1}$ feltétel, a két spektrális csúcs jól különválik egymástól, így nem interferálnak, és a (13.27) végeredményben tagonként lehet négyzetre emelni:

$$\begin{aligned} P_{fi} &= \frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} \left[g \left((\omega_{fi} - \omega) \frac{t}{2} \right) + g \left((\omega_{fi} + \omega) \frac{t}{2} \right) \right]^2 t^2 \\ &= \frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} \left[g \left((E_f - E_i - \hbar\omega) \frac{t}{2\hbar} \right) + g \left((E_f - E_i + \hbar\omega) \frac{t}{2\hbar} \right) \right]^2 t^2, \end{aligned} \quad (13.29)$$

ahol

$$g(y) := \frac{\sin^2 y}{y^2}; \quad \int g(y) dy = \pi. \quad (13.30)$$

⁶ Az abszorpciónak és indukált emisszióknak klasszikus fizikai megfelelője is van: az elektromosan töltött oszcillátor a rezonancia-frekvencián oszcilláló külső elektromos tétől felvesz vagy lead energiát aszerint, hogy a térhez képest fázisban siet vagy késik.

Amint már megbeszéltük, t növekedésével a csúcsok beszűkülnek, miközben integráljuk változatlan marad:

$$\begin{aligned} P_{fi} &\Rightarrow \frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} \pi \left[\delta\left((E_f - E_i - \hbar\omega) \frac{t}{2\hbar}\right) + \delta\left((E_f - E_i + \hbar\omega) \frac{t}{2\hbar}\right) \right] t^2 \\ &= \frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} \frac{2\pi\hbar}{t} [\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) + \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)] t^2, \end{aligned} \quad (13.31)$$

ahol kihasználtuk, hogy $\delta(ax) = |a|^{-1}\delta(x)$. Végző rendezés után kapjuk a híres *Fermi-féle arany szabályt*:

$$P_{if}(t) \approx w_{if} \cdot t, \quad (13.32)$$

ahol w_{if} az *időegységre eső átmeneti valószínűség*:

$$w_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{if}|^2 [\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) + \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)]. \quad (13.33)$$

Külön esetként kell megemlíteni a *konstans* (0-frekvenciájú) *perturbáció* esetét. Ilyenkor a két csúcs természetesen egyáltalán nem válik szét, hanem azonosak lévén, mindvégig erősítik egymást. Ha most a kölcsönhatási mátrixelemet

$$W_{fi}(t) = W_{if}^*(t) = W_{fi} = \text{const.} \quad (13.34)$$

alakban vesszük fel (2-es szorzó nélkül!), akkor az eredmény, összhangban a (13.25) formulával,

$$w_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{if}|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (13.35)$$

Mindkét változatra vonatkozó megjegyzés, hogy a deltafüggvények a konkrét feladatokban nem a frekvenciák éles hangolását fejezik ki, hanem kezdeti- vagy végállapotok folytonos eloszlásából való válogatást. A példákat bőven kínálja a sugárzási és szórási folyamatok elmélete.

A Fermi-féle arany szabályt rengeteget alkalmazzák a világban lejátszódó legkülönbözőbb folyamatok leírására. A belőle számolt átmeneti valószínűség teljesen beleillik a valószínűségszámítás klaszikus fogalmkörébe. Mielőtt az olvasó elraktározza, mint egy kiváló minőségű csavarhúzó, foglaljuk össze még egyszer a korlátait:

- Nagyon rövid időre az átmeneti amplitúdó sok különböző energiájú végállapotra lineárisan kezd növekedni az idővel, az átmeneti valószínűség pedig ennek megfelelően kvadratikusan. A (13.33) szerinti energiaválogatás és a kiválasztott állapotok lineárisan növekvő feltöltése $t \gg 1/|\omega_{fi}|$ idő után áll be.

- A levezetésnél hallgatólagosan feltettük, hogy a megcélzott végállapotok üresek. Hosszú időre, amikor $t \cdot w_{if}$ egységnyi nagyságrendűvé lép elő, ez már nem igaz, így a lineáris szakasz csak korlátozott időszakra érvényes. Ez elég súlyos korlátozásnak látszik, de a helyzet sokszor nem ennyire komoly: ha az átmenettel egyidejűleg környezeti kölcsönhatások is működnek, amelyek a koherenciát folyamatosan lerontják, az a Fermi-aranszabály alkalmazhatóságát messze kitolhatja a hosszú idő felé. Ezeknek a hosszú időkre feljavított aranszabály-alkalmazásoknak jólműködő keretét jelenti a master-egyenletek módszere; lásd az E. függelék.
- A fentiekben két korlát közé szorítottuk az alkalmazhatóság idejét: $|\omega_{if}|^{-1} \ll t \ll w_{if}^{-1}$. Hogy ez az intervallum ne legyen üres, ahhoz az kell, hogy $|\omega_{if}| \gg w_{if}$ legyen. Ez összhangban van azzal, hogy az egész módszer a perturbációs számításon alapul; ha a perturbáció átmeneti mátrixelemei nagyok, $w_{if} \propto |W_{if}|^2$ olyan nagy lehet, hogy nem marad „aranszabályos” időintervallum.
- Ha már a kezdeti pillanatban több \hat{H}_0 sajátállapot szuperpozíciójából indulunk, ezek fejlődése interferálhat egymással; ilyenkor az átmeneti valószínűség fogalma nem használható, vissza kell mennünk a kvantummechanikai amplitúdókhoz.

Végül számoljuk ki annak valószínűségét, hogy egy ω frekvenciájú perturbáció hatására a rendszer kezdőállapotából *akárhová* átmegy, pl. egy gerjesztett atom akármilyen végállapotba kisugározva gerjesztési energiáját, átmegy az alapállapotba. Mivel a Fermi-aranszabály érvényességi határán belül a különböző átmenetek nem interferálnak, így valószínűség számítási értelemben független eseményeknek tekinthetők, és valószínűségeik összeintegrálódnak. Ez az átalakítás is kettéágazik a fentiek szerint: véges ω frekvenciájú perturbációra

$$\begin{aligned} \sum_f P_{if}(t) &\approx t \int w_{if} \rho(E_f) dE_f \\ &= t \frac{2\pi}{\hbar} \langle |W_{if}|^2 \rangle_f (\rho(E_i + \hbar\omega) + \rho(E_i - \hbar\omega)), \end{aligned} \quad (13.36)$$

időben állandó perturbáció esetén pedig ugyanígy,

$$\sum_f P_{if}(t) = t \frac{2\pi}{\hbar} \langle |W_{if}|^2 \rangle_f \rho(E_i), \quad (13.37)$$

ahol $\rho(E)$ a végállapotok sűrűsége az energiatengelyen, $\langle \dots \rangle_f$ pedig a mátrixelem négyzetének végállapotok szerinti átlagolását jelzi. Néha ezeket a formulákat is Fermi-féle aranszabálynak nevezik.

13.3. Abszorpció, indukált és spontán emisszió

Einstein a Planck-féle sugárzási törvény elemzéséből jött rá, hogy a fény–anyag kölcsönhatásban⁷ három elemi folyamatot lehet megkülönböztetni:

- *Abszorpció:* egy atom⁸ a beeső fény hatására E_i energiájú kezdeti állapotából $E_f > E_i$ energiájú állapotba gerjesztődik, az ehhez szükséges energiát a fényből veszi fel, miközben teljesül az elnyelés $E_f - E_i = h\nu$ Bohr-feltétele; a folyamat gyakorisága arányos a beeső fény intenzitásával.
- *Indukált emisszió:* egy atomot E_i energiájú *gerjesztett* állapotából a beeső fény lenyom egy $E_f < E_i$ energiájú állapotba, miközben teljesül a kisugárzás $E_i - E_f = h\nu$ Bohr-feltétele; a felszabaduló energia sugárzás alakjában koherensen hozzáadódik a beeső fényhez, azzal azonos hullámmódban. Ennek a folyamatnak a valószínűsége is arányos a beeső fény intenzitásával, ami a kisugárzott energia által felerősítve halad tovább; ez az alapfolyamata a lézerek működésének.⁹
- *Spontán emisszió:* gerjesztett állapotú atomok előbb vagy utóbb akkor is visszatérnek alapállapotukba, ha előtte a környezetben nem volt jelen sugárzás. Az ilyenkor emittált sugárzás is megfelel az $E_i - E_f = h\nu$ feltételnek; semmilyen környezeti mozgással nem koherens; bármilyen hullámmódban észlelhető.

Hogy mindez hogyan kapcsolódik a Planck-féle sugárzási törvényhez, arra még visszatérünk a 13.3.3. alponban. Most azonban fontosabb dolgot

⁷ Természetesen a fény is anyag; az elterjedten használt „fény–anyag kölcsönhatás” kifejezésben az „anyag” nyugalmi tömeggel rendelkező anyagot jelent, amely elektromos töltése és/vagy spin eredetű mágneses momentuma révén kerül kölcsönhatásba az elektromágneses mezővel.

⁸ Csak a rövidség kedvéért beszélünk atomról; természetesen lehet molekula, kristályos vagy nemkristályos kondenzált anyag is.

⁹ A lézer mint oszcillátor működéséhez az erősítésen kívül visszacsatolásra is szükség van, amit tükröző felületek biztosítanak. Az erősítéshez az kell, hogy az indukált emisszió folyamataiból több legyen, mint az abszorpcióból. Ez az átmeneti mátrixelemek hermitikus szimmetriája miatt (időtükroztési szimmetria) csak úgy lehetséges, ha a gerjesztett atomok többen vannak, mint az alapállapotúak. Hogy ezt a „populáció-inverzióknak” nevezett állapotot megvalósítsuk, ahhoz a rendszert folyamatosan „pumpálni” kell gerjesztett állapot felé.

kell megbeszelnünk: a három alapfolyamat „klasszikus”, ill. „kvantumos” jellegét.

Arról van szó, hogy az abszorpció és indukált emisszió folyamatait a klasszikus elektrodinamika alapján is meg lehet érteni, legalábbis nagy vonalakban: egy rezgő dipólus és a jelenlevő, ugyanolyan frekvenciájú elektromágneses sugárzás közötti energiaátadás iránya a két rezgés közötti fáziskülönbség előjelétől függ: eszerint fog vagy az elnyelés, vagy a kisugárzás dominálni.

Ha a rezgő dipólus klasszikus képéről áttérünk az atom kvantummechanikai leírására, attól még a kép tartalma változatlan marad: a gerjesztett kezdőállapotú atomot a bejövő sugárzás éppen olyan fázisban hozza rezgésbe két állapot között, hogy a kisugárzás folyamata domináljon, és fordítva: a kezdetben alapállapotú atomot olyan fázisban rezgeti meg, hogy az elnyelés legyen erősebb. Mindez egyetlen sugárzási móduson belül történik; abban a módusban érkezik a bejövő sugárzás, azt erősíti az indukált emisszió.¹⁰ Mindezt jól lehet követni akkor is, ha az elektromágneses mező kvantáltságáról átmenetileg elfelejtkezünk. Ezt tesszük meg a 13.3.1. alpontban.

A spontán emisszió keményebb dió a részletes elmélet szempontjából. Ahogy már a 2.8. és 3.4. pontokban is megjegyeztük, egy gerjesztett energiasajátállapotban az elektronsűrűség időben szigorúan állandó, nincs rezgő dipólus vagy bármilyen multipólus, a klasszikus elektrodinamika szempontjából nincs, ami sugározzon. A kvantált elektromágneses tér módusai azonban alapállapotukban is mindenütt jelen vannak és a zéruspont-rezgésben jelenlevő elektromos téren keresztül mutatják az utat, hogy egy foton felvételével gerjesztett állapotba menjenek át. Ennek matematikai kifejezése a (8.42) kölcsönhatásban jelenlevő fotonemissziós operátor, amely véges valószínűséggel visz át a zéruspont-rezgésből az egyfoton állapotba, mivel a (8.35) egyenletben bevezetett keltő operátornak a zéruspont-rezgés Gauss-hullámcsomagja felől van átmeneti mátrixeleme az egyfoton állapot felé, nem a semmitől a valami felé. A sugárzásra vonatkozó konkrétumokat a 13.3.2. alpontban beszéljük meg.

Az összes sugárzási folyamatok leírásánál van egy durva korlátozás: ha az $i \rightarrow f$ átmenetnek megfelelő elektromos töltésszcillációnak nincsen dipólmomentuma, akkor az erős dipólsugárzás nem jelenik meg, se emisszióban, se abszorpcióban. Emögött többnyire az atomi állapotok szimmetriái rej-

¹⁰ Amikor a fény egy módusból elnyelődik és azonnal egy másik módusba sugárzódik vissza, az a *fényszórás* jelensége. Ez jóval gyengébb folyamat, mint az indukált emisszió; a kvantummechanikai perturbációs számítás szerint is csak a sorfejtés magasabb rendjében jelenik meg.

tőznek. Ez a *kiválasztási szabályok* témaköre, amellyel a 13.3.4. alpontban foglalkozunk.

13.3.1. Félklasszikus sugárzáselmélet

Kiindulópontunk a kölcsönhatási Hamilton-operátor (8.42) egyenletbeli *második* kifejezése, amelyben azonban az $\vec{E}(\vec{r}, t)$ elektromos térerősséget a fény intenzitása által meghatározott klasszikus mennyiségnek tekintjük. Induljunk ki monokromatikus (élesen meghatározott frekvenciájú) fényből, és használjuk a dipólközelítést is, amelynek értelmében a térerősséget az atom \vec{r}_0 helyén felvett $\vec{E}(\vec{r}_0, t) = \vec{E}_\omega \cos(\omega t)$ értékével helyettesítjük:

$$\hat{W}(t) = -\hat{\vec{P}} \cdot \frac{\vec{E}_\omega}{2} [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}]. \quad (13.38)$$

Ez olyan operátor, amely a sugárzás klasszikus leírása miatt csak a töltött részecskerendszer (pl. egy atom elektronfelhője) $|\Psi\rangle$ kvantumállapotára hat. A fenti egyenletben

$$\hat{\vec{P}} = \sum_{j=1}^n q_j \hat{\vec{r}}_j \quad (13.39)$$

a folyamatban résztvevő töltött részecskék együttesének dipólmomentum operátora.

Összehasonlítva a (13.26) formulával, leolvassuk az oszcilláló kölcsönhatás amplitúdójának átmeneti mátrixelemét:

$$W_{if} = -\frac{\vec{E}_\omega}{2} \cdot \vec{P}_{if} \quad (13.40)$$

ahol

$$\vec{P}_{if} = \int \Psi_f^* \hat{\vec{P}} \Psi_i d^3n_r \quad (13.41)$$

a dipólmomentum átmeneti mátrixeleme a részecskerendszer i és f energiasajátállapotai között.

A (13.40) mátrixelemet behelyettesítve a Fermi-féle aranyszabály (13.33) formulájába, megkapjuk az időegységre vonatkozó átmeneti valószínűséget:

$$\begin{aligned} w_{if} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|\vec{E}_\omega \cdot \vec{P}_{if}|^2}{4} [\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) + \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)] \\ &\approx \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{|\vec{E}_\omega|^2}{4} \frac{|P_{if}|^2}{3} [\delta(\omega_{fi} - \omega) + \delta(\omega_{fi} + \omega)], \end{aligned} \quad (13.42)$$

ahol a második lépésben – a térben szabadon forgó atomot feltételezve – kiátlagoltunk a dipólmomentum lehetséges beállási irányaira,¹¹ és a deltafüggvényekben áttértünk az ω változókra.

A két deltafüggvényes tag közül az első $E_f - E_i$ energiának a fényből való elnyelését (abszorpcióját) írja le, a második $E_i - E_f$ energiának a sugárzás jelenléte által kiváltott, indukált emisszióját, amely erősíti a beeső fényt. Egy adott $i \rightarrow f$ átmenetben az első folyamat akkor valósul meg, ha $E_f > E_i$, a második akkor, ha $E_f < E_i$. Az elnyelt, ill. kisugárzott fény energiája éppen egy fotonnyi, de erről a félklasszikus elméleti leírás nem vesz tudomást; $\hbar\omega$ csak mint az atomos rendszer által felajánlott frekvenciaskála jelenik meg.

A hosszú hullámokra érvényes dipólközelítést a továbbiakban is fenntartjuk. Azonban hogy közelítsünk a reális helyzetekhez és megszabaduljunk a deltafüggvényektől, lépünk tovább a monokromatikus beeső fényről a folytonos spektrális eloszlású fényre:

$$\vec{E}(t) = \int d\omega \vec{E}_\omega \cos(\omega t + \varphi_\omega), \quad (13.43)$$

amelyhez az elektromágneses hullámok elmélete szerint

$$u(\omega) = \frac{\epsilon_0}{2} |E_\omega|^2 \quad (13.44)$$

frekvencia és térfogat szerinti energiasűrűség tartozik.

Ezzel a (13.42) átmeneti valószínűség kiintegrálható a frekvencia szerint, és a deltafüggvények kiválasztják a megfelelő frekvenciájú energiasűrűséget. Az eredmény legfeltűnőbb tulajdonsága az, hogy két tagja megegyezik egymással: külön-külön mindkettő

$$\begin{aligned} w_{ind.em.} = w_{absz} &= \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{|P_{if}|^2}{3} \frac{1}{4} \frac{2}{\epsilon_0} u(|\omega_{if}|) \\ &= \frac{\pi}{\hbar^2} \frac{|P_{if}|^2}{3\epsilon_0} u(|\omega_{if}|), \end{aligned} \quad (13.45)$$

ami azt jelenti, hogy adott beeső sugárzásra az abszorpció, ill. az indukált emisszió időegységre eső valószínűsége megegyezik egymással; hogy melyik következik be ezzel a valószínűséggel, az csak azon múlik, hogy a kezdeti állapot az alacsonyabb vagy a magasabb energiájú.

Egy kicsit mélyebbre nézve, a két valószínűség egybeesése azon múlik, hogy $\hat{W}(t)$ és benne \hat{P} önadjungált, ezért $|P_{if}|^2 = |P_{fi}|^2$, ami végső soron az unitér időfejlődés időtükrözési szimmetriáját fejezi ki.

¹¹ Az \vec{E} és \vec{P} által bezárt ϑ szögére $\overline{\cos^2(\vartheta)} = 1/3$.

A (13.45) formulák alább, a 13.3.3. alpontban felbukkannak, mint Einstein-féle átmeneti valószínűségek.

13.3.2. Spontán emisszió

Ebben a folyamatban az atom egy i gerjesztett állapotból átmegy egy alacsonyabb energiájú f állapotba, miközben a környező foton-módusok összességében megjelenik egyetlen foton.

Az atom–foton rendszer kezdeti állapota: $|i, 0\rangle$, ahol a „0” azt jelenti, hogy az összes foton-módusok alapállapotban (a „zéruspont-rezgés” állapotában) vannak. A végállapot $|f, 1_k\rangle$ állapotok szuperpozíciója, ahol 1_k azt jelenti, hogy a k módus 1 foton állapotba kerül, a többi megmarad a 0 foton alapállapotban.

Ahhoz, hogy megkaphassuk az időegységre jutó átmeneti valószínűséget, amit Einstein nyomán A_{fi} -vel jelölünk, először ki kell számolnunk a (8.42) fény-anyag kölcsönhatás átmeneti mátrixelemét, amelyben most az elektromos térerősséget is operátornak kell tekintenünk. Konkrét alakját a (8.41) formulából olvashatjuk le, amelyből – a Schrödinger-képnek megfelelően – elhagyjuk az időfüggő tényezőket. Mivel egy foton *emisszióját* akarjuk leírni, a kiszámítandó mátrixelemekbe a térerősségből csak a keltő operátoros tagok fognak járulékot adni:

$$\begin{aligned} W_{fi}^k &= \langle f, 1_k | -\hat{P} \cdot \hat{E} | i, 0 \rangle = -i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0}} \vec{P}_{fi} \cdot \langle 1_k | -\hat{a}_k^\dagger | 0_k \rangle e^{i\omega t} \vec{u}_k^*(\vec{r}) \\ &= i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0}} e^{i\omega t} \vec{P}_{fi} \cdot \vec{u}_k^*(\vec{r}), \end{aligned} \quad (13.46)$$

ahol $\omega = \omega_{if} = (E_i - E_f)/\hbar$ az emittált foton frekvenciája.

Most kell megmondanunk, milyen foton-módusokról beszélünk: feltételezve, hogy az atom nagy, üres térben lebeg, minden fényvisszaverő vagy fényelnyelő faltól távol, válasszuk egy nagy V térfogatra normált, a határokon ciklikus határfeltételeket kielégítő $\vec{e}_k \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r})$ vektori síkhullámok teljes rendszerét, ahol \vec{e}_k a polarizációs vektor. Mivel azonban az atomot, akár csak az előző alpontban, kicsinek gondoljuk a fény hullámhosszához képest, most is használhatjuk a dipólközelítést, amelynek értelmében $\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r})$ helyfüggését az atom méretein belül elhanyagoljuk:

$$\vec{u}_k(\vec{r}) \approx \frac{1}{\sqrt{V}} \vec{e}_k. \quad (13.47)$$

Ezt behelyettesítve a mátrixelem kifejezésébe, négyzetre emelve és az előző alpont mintájára elvégezve a polarizációs skalárszorzat irány szerinti átlago-

lását is, végül ezt kapjuk:

$$|W_{fi}|^2 = \frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0} \frac{|P_{fi}|^2}{3} \frac{1}{V}. \quad (13.48)$$

Az időegységre eső átmeneti valószínűséget a Fermi-féle aranyszabály (13.37) alakjából akarjuk kiszámítani, de ehhez szükségünk van még a foton-végállapotok energia szerinti sűrűségére is. Tudjuk, hogy a ciklikus határfeltételek mellett egy skalár módusnak a fázistér egy $h^3 = (2\pi\hbar)^3$ térfogatú cellája felel meg; a transzverzális polarizáció még megkettőzi a módusok számát. Végül az állapotsűrűség így adódik:

$$\rho(\hbar\omega) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} 2 \frac{4\pi p^2 dp}{\hbar d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3 \hbar}, \quad (13.49)$$

ahol figyelembe vettük, hogy fotonokra $p = \hbar k = \hbar\omega/c$.

Most már csak szoroznunk kell egyet: a (13.37) egyenlet szerint

$$A_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \rho(\hbar\omega) = \frac{|P_{fi}|^2 \omega^3}{3\pi \varepsilon_0 \hbar c^3}. \quad (13.50)$$

Ez a végeredményünk a szabadba sugárzó atom esetére, amely spontán emisszióval egy soha vissza nem térő fotont bocsát ki. Ezt a fotont bárhol, bármilyen irányban detektálhatjuk; ennek megfelelően az atomra gyakorolt visszalökése is akármilyen irányú lehet, így a spontán emisszió egyfajta szinonimája lett a véletlen zajnak.

Ez azonban nem a teljes igazság. A kísérleti kvantumoptikában egyre nagyobb szerephez jutnak azok az esetek, amelyekben a spontán emisszió nem a szabadban megy végbe, hanem egy nagy jóságú tényezőjű optikai vagy mikrohullámú rezonátorban, amelynek egy módusa élesen ráhangolódik egy atomi átmenetre. Ilyenkor – ha a rezonátor elég jó – a foton többször oda-vissza járhat az atom és a rezonáns módus között. Ez érdekes példája a koherens kvantumjelenségekben gyakori *Rabi-oszcillációnak*, amit mágneses rezonanciára vonatkozóan a 12.3. pontban ismertünk meg. A két helyzetben az a közös, hogy a kísérletileg létrehozott kezdőállapot – itt: $|i, 0\rangle$ – nem energiasajátállapot, emiatt a rendszer oszcillációra kényszerül a csatolt atom–foton rendszer igazi energiasajátállapotai között, amelyek a jelen esetben $|i, 0\rangle$, és $|f, 1\rangle$ meghatározott szuperpozíciói: az ún. *felöltözött atomok*. Erre a szituációra természetesen a perturbációs leírás és a Fermi–aranyszabály közvetlenül nem alkalmazható; külön kell kézzel megoldani az egyszerű oszcillációs dinamika Schrödinger-egyenletét.

A szabadba sugárzó atom esetében is túlléphetünk a perturbációs számítás keretein, amint azt Wigner és Weisskopf alapvető munkája (1930) megmutatta: a csatolt atom–foton rendszer Schrödinger-egyenletének van olyan közelítő megoldása, amely gerjesztett atomból és alapállapotú fotonteréből¹², mint kezdeti állapotból kiindulva, exponenciális lecsengéssel közelít az alapállapotú atom és egy kisugárzott foton aszimptotikus végállapota felé. A (13.50) átmeneti valószínűséget ebben a számításban úgy kapjuk meg, mint az exponenciális lecsengés inverz időállandóját.

Tekintsük át röviden a módszer működését.¹³ Állítsuk elő az állapotvektort

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_f t} b_0(t) |i, 0\rangle + \sum_{k \neq 0} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_f + \hbar\omega_k)t} b_k(t) |f, 1_k\rangle \quad (13.51)$$

alakban; akkor¹⁴ a (13.23) egyenletek ilyen alakot öltenek:

$$\begin{aligned} \dot{b}_0(t) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{k \neq 0} e^{i(\omega_{if} - \omega_k)t} W_{0k} b_k(t), \\ \dot{b}_k(t) &= -\frac{i}{\hbar} e^{-i(\omega_{if} - \omega_k)t} W_{k0} b_0(t), \end{aligned} \quad (13.52)$$

ahol $W_{0k} = i \sqrt{\hbar\omega_k/2\varepsilon_0} \vec{P}_{fi} \cdot \vec{u}_k^*(\vec{r})$, és ω_k a k -adik módusba emittált foton frekvenciája, amely nem feltétlenül esik egybe az atomi átmenet frekvenciájával. A feladat része éppen a kijövő foton spektrális intenzitáseloszlásának meghatározása.

Integráljuk (13.52) második egyenletét a $b_k(0) = 0$ kezdeti feltétellel, $b_0(t)$ -t adottnak tekintve, és az eredményt helyettesítsük vissza az első egyenletbe. Ekkor az alábbi zárt integro-differenciálegyenletet kapjuk $b_0(t)$ -re:

$$\begin{aligned} \dot{b}_0(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \sum_k e^{i(\omega_k - \omega_{if})(t-t')} |W_{0k}|^2 b_0(t') dt' \\ &\approx - \left[\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t \sum_k e^{i(\omega_k - \omega_{if})(t-t')} |W_{0k}|^2 dt' \right] b_0(t) \\ &= - \left[\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty \sum_k e^{i(\omega_k - \omega_{if})\tau} |W_{0k}|^2 d\tau \right] b_0(t). \end{aligned} \quad (13.53)$$

¹² „foton–vákuumból”, ami – mint azt már unalomig hangsúlyoztuk – nem a semmit, hanem a minden módus zéruspont-rezgés állapotát jelenti.

¹³ Ez haladóknak szól; első olvasáskor kihagyható. Második olvasáskor az olvasó már haladó.

¹⁴ Mivel most nem perturbálunk, így $\lambda = 1$.

Az első sorból a másodikra térve hajtottuk végre a Wigner–Weisskopf közelítést, amely utóbb számtalan alakváltozatban jelent meg; az olvasó felismerheti pl. a sűrűségmátrix master-egyenletének Markov-közelítésében, amelyet az E. függelékben mutatunk be. A közelítés azt használja ki, hogy

1. a sokféle ω_k frekvenciájú exponenciális tag $|W_{0k}|^2$ kölcsönhatási mátrix-elemekkel súlyozott összege olyan gyorsan lecseng $t - t'$ növekedésével, hogy ezalatt $b_0(t')$ csak keveset változik, emiatt $b_0(t)$ -vel helyettesíthető és az integrálból kiemelhető;
2. ugyanezen okból az integrálás alsó határa 0-ból $-\infty$ -be vihető.

Végül az utolsó sorban áttértünk a $\tau = t - t'$ integrációs változóra, hogy eltüntessük a zárójeles kifejezés látszólagos időfüggését.

Ennek az időintegrállal és összegezéssel definiált kifejezésnek válasszuk külön a valós és imaginárius részét; akkor a fenti egyenlet így írható:

$$\dot{b}_0(t) = \left(-\frac{\gamma}{2} - \frac{i}{\hbar} \delta E_i \right) b_0(t), \quad (13.54)$$

aminek a $b_0(0) = 1$ kezdeti feltételhez tartozó megoldása

$$b_0(t) = e^{-\frac{\gamma}{2}t} e^{-\frac{i}{\hbar} \delta E_i t}, \quad (13.55)$$

vagy felhasználva a (13.22) egyenletet,

$$c_0(t) = e^{-\frac{\gamma}{2}t} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_i + \delta E_i) t}. \quad (13.56)$$

A szereposztás világos: γ az exponenciális lecsengés együtthatója,¹⁵ δE_i pedig az i atomi állapot energiájának eltolódása („renormálása”) a sugárzási térrel való kölcsönhatás következtében. Az állapotonként különböző mértékű eltolódás jelenségét felfedezőjéről *Lamb-féle eltolódásnak* (angolul: *Lamb-shift*) nevezik.

A csillapítás és az eltolódás mértékének kiszámítására a (13.53) egyenlet utolsó sorában használjuk a

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{i\omega \tau} d\tau = \pi \delta(\omega) + i \mathcal{P} \frac{1}{\omega} = \hbar \pi \delta(\hbar\omega) + i \mathcal{P} \frac{1}{\omega} \quad (13.57)$$

¹⁵ $P_0(t) = |c_0(t)|^2 = e^{-\gamma t}$

összefüggést, amely nem egészen közismert, de némi türelemmel bebizonyítható.¹⁶ Az eredmény:

$$\begin{aligned}\gamma &= \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|W|_{\omega_{if}}^2} \rho(\hbar\omega_{if}), \\ \delta E_i &= \mathcal{P} \int \frac{\overline{|W|_{\omega}^2} \rho(\hbar\omega)}{\omega - \omega_{if}} d\omega,\end{aligned}\quad (13.58)$$

ahol $\overline{|W|_{\omega}^2}$ az ω frekvenciájú fotonmódusok valamelyikébe történő emisszióhoz tartozó kölcsönhatási mátrixelem-négyzetnek a módusokra vett átlaga.

A gerjesztett állapot γ bomlási állandójára kapott eredmény egybeesik a spontán emisszió időegység alatti valószínűségére kapott (13.50) kifejezéssel, de most látjuk, hogy ez nem csak a kisugárzás kezdetekor, hanem a teljes exponenciális lecsengés időtartama alatt érvényes. A δE_i vonaleltolódás kifejezéséről érdemes megjegyezni, hogy a főérték-integrálba olyan átmenetek adnak járulékot, amelyekben az energia megmaradása *nem* teljesül. Ezek a járulékok a kölcsönhatást második rendben tartalmazzák, összhangban a kétlépéses folyamattal: egy „virtuális foton” kisugárzódik, majd újra elnyelődik. A hiányzó energia a nevezőben az újraelnyelésig eltelt időt méri, az energia-idő határozatlansági relációnak megfelelően.

Térjünk vissza végül a (13.52) egyenletek második sorához. A jobboldalon helyettesítsük be a (13.55) eredményt, és integráljuk az idő szerint, $b_k(0) = 0$ kezdeti feltétellel. Az eredmény:

$$b_k(t) = \frac{i}{\hbar} \frac{\exp\{-[i(\overline{\omega}_{if} - \omega_k) + (\gamma/2)]t\} - 1}{i(\overline{\omega}_{if} - \omega_k) + (\gamma/2)}, \quad (13.59)$$

ahol bevezettük az $\overline{\omega}_{if} = (E_i + \delta E_i - E_f)/\hbar$ renormált átmeneti frekvenciát.

Hosszú időre a számlálóban az exponenciális tényező lecseng, csak az állandó marad meg. Ennek négyzete:

$$|b_k(\infty)|^2 = \frac{1/\hbar^2}{(\overline{\omega}_{if} - \omega_k)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (13.60)$$

annak valószínűsége, hogy a kisugárzott foton éppen a k módusban, ω_k frekvenciával jelenik meg. Ez a jellegzetes, a γ^{-1} ideig tartó atomi átmenet

¹⁶ $\int_0^t e^{i\omega\tau} d\tau = (e^{i\omega t} - 1)/(i\omega) = i(1 - \cos\omega t)/\omega + \sin\omega t/\omega$. Ha ez egy folytonos ω -függvény integráljában jelenik meg, növekvő t -re $\cos\omega t$ minden véges ω körül egyre gyorsabban oszcillál, így az integrálba csak $1/\omega$ ad járulékot. $\omega \approx 0$ körül azonban $(1 - \cos\omega t)/\omega \approx (t^2/2)\omega$, ami kivágja $\omega \approx 0$ szimmetrikus környezetét; ez együtt éppen a $\mathcal{P}(1/\omega)$ főértéket definiálja. A valós tagban $\int(\sin\omega t/\omega) = \pi$; $t \rightarrow \infty$ esetén a függvény $\pi \delta(\omega)$ -vá keskenyedek.

(renormált) frekvenciája körül a határozatlansági relációnak megfelelő $\gamma/2$ szélességű csúcsot mutató sugárzási spektrum a Wigner–Weisskopf módszer nevezetes eredménye.

Gyakorlat: végezzük el a jelen alpont elején leírt perturbatív számítást olyan kezdeti állapotból indulva, amelyben egyetlen módban 0 helyett $N \gg 1$ foton van jelen. Igazoljuk, hogy ekkor a minden módba sugárzó spontán emisszióhoz hozzáadódik a magasan gerjesztett módba történő indukált emisszió, amelynek erőssége összhangban van az előző alpontban kapott (13.45) féلكlasszikus eredménnyel.

13.3.3. A Planck-törvény Einstein-féle levezetése

Einstein abból a megfontolásból jutott el a spontán és indukált (stimulált) emisszió megkülönböztetéséhez, hogy enélkül érthetetlen, hogyan kerül termikus egyensúlyba a hősugárzás az üreg falával. A megfontolás reprodukálására a (13.45) eredményben az energiasűrűségről térjünk át az effektív fotonszám-sűrűségekre:¹⁷

$$n(\nu) = 2\pi \tilde{n}(\omega) = 2\pi \frac{u(\omega)}{\hbar \omega}, \quad (13.61)$$

ahol még Einstein hagyományossá vált jelölése kedvéért áttértünk a $\nu = \omega/2\pi$ frekvencia szerinti effektív fotonszám-sűrűségekre. Ezzel a (13.45) formula így írható:

$$W_{ind.em.} = W_{absz} = B_{fi} n(\nu), \quad (13.62)$$

ahol

$$B_{fi} = B_{if} = \frac{|P_{if}|^2}{3\epsilon_0} \frac{\omega}{2\hbar}. \quad (13.63)$$

A (13.62) formula beszédes jelentése: B_{fi} az időegységre eső valószínűsége annak, hogy egy foton elnyelődik vagy indukált emisszióval még egy foton születik aszerint, hogy a jelenlevő ν frekvenciájú sugárzásra rezonáló atomi átmenetnek az atom az alján vagy a tetején tartózkodik.

Mielőtt tovább mennénk, vegyük észre, hogy a B_{fi} együttható az átmeneti mátrixelemet ugyanolyan kombinációban tartalmazza, mint a spontán emisszió A_{fi} együtthatója; a pontos kapcsolat:

$$A_{fi} = \frac{2\omega^2}{\pi c^3} B_{fi} = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} B_{fi}. \quad (13.64)$$

¹⁷ Azért „effektív” fotonszám-sűrűség, mert amint a 8. fejezetben többször hangsúlyoztuk, a körülöttünk járó sugárzás általában nem fotonszám-sajátállapotban, hanem sok különböző fotonszámú állapot koherens szuperpozíciójában jelenik meg.

És most vissza a hőszugárzáshoz!¹⁸ Modellezzük a falat különálló atomokkal; közülük N_n legyen egy n gerjesztett állapotban és N_m az m alapállapotban. Az atomok oda-vissza járnak a két állapot között, $\nu = (E_n - E_m)/h$ frekvenciájú fotonokat cserélgetve az üreggel, de eközben változatlanok kell maradniuk a T hőmérsékletnek megfelelő

$$\frac{N_n}{N_m} = \exp\left(-\frac{E_n - E_m}{k_B T}\right) = \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \quad (13.65)$$

egyensúlyi gerjesztési aránynak.

Einstein arra jött rá, hogy ezt az abszorpció ellenében csak a spontán és indukált emisszió együttese képes biztosítani:

$$[A_{nn} + B_{nn} n(\nu)] N_n = B_{nm} N_m, \quad (13.66)$$

ahonnan felhasználva a $B_{mn} = B_{nm}$ unitér szimmetriát, valamint a (13.64) és (13.65) arányokat, ezt kapjuk a fotonok egyensúlyi eloszlására:

$$n(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{\nu^2}{\exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}, \quad (13.67)$$

ami $h\nu$ -vel megszorozva visszaadja az (1.3) Planck-törvényt.

13.3.4. Dipólátmenetek kiválasztási szabályai

Már a 2.8. pont végén szóba került, hogy egy $i \rightarrow f$ átmenet akkor csatolódik az elektromágneses sugárzáshoz, ha rezgő dipólusa van. Az időtől függő perturbációs számítás ezt egyszerű technikai kérdéssé teszi: a (11.5) egyenletben hanyagoljuk el a vektorpotenciálban kvadrátikus tagot, vagyis – a sugárzást klasszikusnak tekintve – legyen egy q töltésű részecske (elektron) esetén a kölcsönhatási Hamilton-operátor a

$$\hat{W}(t) = -\frac{q}{M} \vec{p} \cdot \vec{A}(t) = q \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \quad (13.68)$$

dipól-kölcsönhatás.¹⁹ Ekkor azok az $i \rightarrow f$ átmenetek nyelik el és bocsátják ki erősen a sugárzást, amelyekre nézve a fenti kölcsönhatás átmeneti mátrix-eleme $W_{fi} \neq 0$. Ezeket *megengedett átmeneteknek* nevezzük.

¹⁸ Einstein még nem ismerte az elektromágneses mező kvantálását, ezért a fordított irányban járta végig ugyanezt az utat.

¹⁹ A két alakot a hatásban egy idő szerinti parciális integrálás köti össze, mivel Coulomb-mértékben $\vec{E} = -\partial\vec{A}/\partial t$.

Amelyik átmenetre a dipól-mátrixelem eltűnik, azok a *tiltott átmenetek*. Ezek is bekövetkezhetnek, de csak a csatolás magasabb rendjében: vagy a multipól-sorfejtés egy kisebb, mondjuk kvadrupól tagján keresztül, vagy a dipólcsatolás szerinti perturbációszámítás magasabb rendjében, vagy a (11.5) operátor itt elhanyagolt kvadratikus (diamágneses) tagjából származóan.

Hogy egy adott átmenet megengedett vagy tiltott, azt általában egyszerűen kimondható, de nem annyira egyszerűen megkapható *kiválasztási szabályok* kötik össze azokkal a kvantumszámokkal, amelyek a kvantumállapotok szimmetriáját osztályozzák; a további részletek ismeretére nincs szükség.

Van egy egyszerű szabály, amely a paritással kapcsolatos: a \hat{d} dipólmomentum *vektor*, tehát a koordinátáknak páratlan függvénye. Ezért egy $\langle f | \hat{d} | i \rangle = \int \Psi_f^* \hat{d} \Psi_i d^3N_r$ átmeneti mátrixeleme csak akkor lehet 0-tól különböző, ha a teljes integrandus nem páratlan, vagyis ha Ψ_i és Ψ_f közül az egyik páros, a másik páratlan.

A további kiválasztási szabályok általában nem ennyire egyszerűek. Egy atom vagy molekula dipólmomentumának operátora $\hat{d} = \sum_l q_l \hat{r}_l$, ahol q_l az l -edik töltött részecske töltése. Az elektronok elmozdulásai sokszorosai az atommagokénak, úgyhogy az utóbbiak helyzetét az elektronátmenetek spektrumának vizsgálatánál többnyire rögzített klasszikus paraméternek lehet tekinteni. Hogy egy sokelektron-rendszer dipólmomentumának két adott kvantumszámokkal rendelkező állapot között van-e átmeneti mátrixeleme, annak eldöntése egy konkrét esetben lehet könnyű vagy nehéz feladat; nehezebb esetekben a csoportelméleti módszerek jó szolgálatot tesznek.

Az egyszerű eset az egy elektronos atom: a hidrogénatom. Itt a radiális hullámfüggvény gömbszimmetrikus, tehát az origóra való tükrözésnél nem változik: a főkvantumszám nem jut szerephez. A gömbfüggvényekről a 9.4. pontban megtanultuk, hogy aszerint párosak vagy páratlanok, hogy l páros vagy páratlan; ebből a fentiek miatt leszűrhetjük, hogy a megengedett dipólátmenetekben l párosságának változnia kell.

Ez már valami, de még túl sok variációt enged meg. A megfigyelt spektrumok erősebb megszorításokról árulkodnak, különösen a Zeeman-effektusban mágneses térrel felhasított színképvonalak vannak jóval kevesebben, mint lehetnének. Ennek értelmezésére komolyabban hozzá kell látnunk a számoláshoz.

A kérdés úgy vetődik fel, milyen impulzusmomentumú állapotba vihet át egy $q \vec{r} \cdot \vec{E}$ -vel arányos perturbáció egy $|l, m\rangle$ kezdeti állapotot (\vec{E} a sugárzás elektromos térerőssége). \vec{r} -nek a fény polarizációs irányába eső komponen-

sét kell néznünk; a z irányt a Zeemann-effektusnál használt mágneses tér iránya jelöli ki.

A z irányban polarizált fény esetében, mivel

$$[\hat{z}, \hat{L}_z] = [\hat{z}, (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)] = 0, \quad (13.69)$$

\hat{L}_z sajátértéke nem változhat: a megfelelő kiválasztási szabály

$$m \rightarrow m. \quad (13.70)$$

Ha a sugárzásnak van a mágneses térre merőlegesen (x vagy y irányban) polarizált komponense, akkor ezeknek a dipólkomponenseknek a kommutátorait kell kiszámolni: ellenőrizzük, hogy

$$[\hat{L}_z, (\hat{x} \pm i\hat{y})] = \pm \hbar (\hat{x} \pm i\hat{y}), \quad (13.71)$$

emiatt az $(\hat{x} \pm i\hat{y})$ kombinációk léptető operátorok: ezek a komponensek

$$m \rightarrow m \pm 1 \quad (13.72)$$

átmeneteket engednek meg.

Az l kvantumszám kiválasztási szabályait többféleképpen meg lehet kapni: gömbfüggvények szorzatait integrálva, vagy az $[\hat{L}^2, \hat{x}]$ típusú kommutátor elemzésével. Az eredmény: l egy lépésben egynél többet nem változik, viszont a paritásának változnia kell, ezért a végleges kiválasztási szabály:

$$l \rightarrow l \pm 1. \quad (13.73)$$

A tiltott átmenetek nem feltétlenül jelentenek valami negatív dolgot. Mivel ezek tiltottságuk miatt lassan következnek be, az energia-idő határozatlansági reláció miatt bennük az energia nagyon élesen meghatározott marad. Ezért a tiltott átmenetek spektroszkópiája, bár technikailag igényesebb, mint a megengedett állapotoké, különleges pontosságot ígér. Ennek nevezetes példája a Dehmelt által kitalált és azóta sok változatban megvalósított „kvantumugrás kísérlet”, más néven: „a polcra tett elektron”, amit a 17.4. pontban ismertetünk.

14. fejezet

Szórási folyamatok

14.1. Szórás kísérletek: ütközések, reakciók, rugalmatlan és rugalmas szórás, potenciálszórás

A szórásjelenségek kategóriájába rengeteg különféle folyamat tartozik, amelyekben elemi részecskéktől bonyolult molekuláig különböző mikroszkopikus tárgyak ütköznek egymásba vagy makroszkopikus akadályokba. A kvantummechanika szempontjából az bennük a közös, hogy a jelenségek anyaghullámok terjedésével írhatók le; a kísérletező igyekszik a bejövő részecskenyaláb állapotát síkhullám-szerűnek preparálni, és az ütközés helyétől gömbhullám-szerűen szétterjedő szórt részecskéket detektorokkal megszámlálni. A cél az ütközéskor lejátszódó kölcsönhatás megismerése.

A bejövő részecskék lehetnek elektronok, fotonok, alfa-részecskék, atomok, ionok, molekulák, pionok, müonok, és mindaz, amiből a fizikusok sugárforrást tudnak készíteni. Az ütköző partnerek ugyanezek lehetnek, egy másik sugárforrásból kijövő nyalámban, vagy szilárd céltárgyba foglalva.

A detektorok a detektálandó tárgyak természete szerint sokfélék lehetnek; a bejövő részecske észlelésekor többnyire elektromos impulzust adnak le, amit trükkös és némiképpen önkényes elektronikus berendezések igyekeznek felerősíteni és közben megtisztítani mindenféle eredetű zajoktól, amelyek hatásukban kétfélék: a) a detektor megszólal, pedig nem jött részecske, b) a detektor nem szólal meg, pedig jött részecske. A kvantumfizika hőskorában elterjedt ködkamrák és buborékkamrák eltűnőben vannak az elektronikus jelfeldolgozáshoz egyre jobban illeszkedő detektorrendszerek hatására.

A céltárgyak és a detektorok között analizátorok helyezkedhetnek el, amelyek a szórt részecskéket energia vagy impulzus, esetleg „belső” állapotjellemzők szerint szétválasztják, pl. elektromos és mágneses mezőkkel, a Neumann-mérés elveivel összhangban.

Az ütköző partnerek sokféle reakcióba léphetnek egymással, keletkezhetnek és eltűnhetnek, gerjesztődhetnek és le is adhatnak energiát. Szűkebb értelemben „szórásról” akkor beszélünk, ha az ütköző részecskék azonos-sága megmarad, pl. elektron jön be, és ugyanannyi elektron jön ki. Még

szűkebb kategória a „rugalmas szórás”: ilyenkor a szóródó részecske energiája változatlan marad. Ennek modellje és sokszor tartalmilag is hű leírása a „potenciálszórás”: ilyenkor a céltárgyat egy térben rögzített $V(\vec{r})$ potenciállal írjuk le, amelyen a bejövő anyag hullám szétszóródik. Ilyenkor a $\partial\psi/\partial t = (-i/\hbar)(\hat{p}^2/2M + V(\vec{r}))\psi$ időfüggő Schrödinger-egyenlet írja le a bejövő és szétszóródó hullámcsomagok mozgását.

14.2. Stacionárius potenciálszórás, szórási amplitúdó és hatáskeresztmetszet

A bejövő hullám elméletileg egyszerű és kísérletileg is jól definiált kezdőállapotát úgy lehet megteremteni, ha nagymértékben *monokromatikussá* tesszük: élesen meghatározott energiát és hullámvektort valósítunk meg rajta. A határozatlansági relációk miatt ez időben és térben nagy kiterjedésű hullámcsomaggal valósítható meg. Minél jobban sikerül, annál inkább hasonlít egy síkhullámhoz.

Ennek megfelelően a potenciálszórás standard elméleti modellje így épül fel: stacionárius állapot, amelyben egy bejövő síkhullám folyamatosan szóródik a potenciálon, és egy része a szórócentrumból kiinduló gömbhullám módjára halad tovább.

A kísérletben szabályozni tudjuk a forrásból bejövő monokromatikus nyaláb részecske-áramsűrűségét; azzal arányos lesz a szórt intenzitás is. A síkhullámot az egyszerűség kedvéért $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ alakban vesszük fel; ennek valószínűség-sűrűsége 1, valószínűség-áramsűrűsége $\vec{j}_{be} = \vec{v}_{csop} = \hbar\vec{k}/M$.

A szórócentrumból elég távol, egy adott ϑ, φ irányba ($\vartheta = 0$ a bejövő nyaláb iránya) elhelyezett detektor és a hozzá csatlakozó elektronika számolja az időegység alatt beérkező részecskéket. Az időegységenkénti beütésszám arányos a bejövő j_{be} áramsűrűséggel és a detektor által befogott $d\Omega$ térszöggel; nagysága $j_{be}d\sigma = j_{be}\sigma(\vartheta, \varphi) d\Omega$.

A már csak az eltérés polárszögeitől függő

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \equiv \sigma(\vartheta, \varphi) \quad (14.1)$$

arányt *differenciális hatáskeresztmetszetnek* nevezzük. Ezt a függvényt mérjük ki detektorrendszerrel vagy mozgatott detektorral; a kvantummechanikai tárgyalástól azt várjuk, hogy ezt kapcsolja össze a szóró potenciállal.

Milyen lesz a hullámfüggvény a szórócentrumból távol? A szórt intenzitás $1/r^2$ távolságfüggése miatt az amplitúdó $\propto 1/r$. Van még egy távolságfüggő fázisa is; az optikai hullámegyenletről tudjuk, hogy ehhez változatlan frekvencia/energia esetén (rugalmas szórásról beszélünk) változatlan nagyságú

hullámszám tartozik. Van ezenkívül irányfüggése is, ami jellemző módon függ a szóró potenciáltól és a bejövő részecske energiájától.

A stacionárius állapot hullámfüggvényét tehát a szórócentrumtól elég nagy távolságra ilyen aszimptotikus alakban keressük:

$$\psi \approx e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (14.2)$$

Az $f(\vartheta, \varphi)$ függvény neve *szórási amplitúdó*.

Mivel a kifutó gömbhullámon a csoportsebesség ugyanakkora, mint a bejövő síkhullámon, az áramsűrűségek arányát a hullámfelületen mért valószínűség-sűrűség határozza meg. Összehasonlítva a (14.1) egyenlettel, leolvashatjuk, hogy

$$\sigma(\vartheta, \varphi) = |f(\vartheta, \varphi)|^2, \quad (14.3)$$

ami a szóráselmélet alapvető formulája.

A szórási amplitúdót az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásával akarjuk meghatározni, ha ismerjük a $V(\vec{r})$ szórópotenciált; az „inverz probléma” a szórópotenciál minél pontosabb reprodukálása a mért hatáskeresztmetszet szög- és energiafüggéséből.

A Schrödinger-egyenletben az energiasajátértéket tudjuk: rugalmas szórásra ez a bejövő részecske $\hbar^2 k^2 / 2M$ kinetikus energiája. Az egyenlet tehát:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \psi. \quad (14.4)$$

Rendezzük ezt úgy, hogy nyilvánvalóvá tegye, a szóró potenciál által kiváltott kauzális hatást akarjuk vele leírni:

$$(\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) = \frac{2M}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \quad (14.5)$$

Ennek az egyenletnek keressük olyan megoldásait, amelyek a szórócentrumtól elég távol aszimptotikusan a (14.2) alakba mennek át.

Az, hogy a síkhullámhoz éppen kifutó gömbhullámot akarunk hozzátenni, a megoldásban a határfeltétel szerepét tölti be. Ez a fajta határfeltétel a *kauzalitás* fizikai elvét képviseli.

14.3. Gyors részecske szóródása: Born-közelítés

A szórási amplitúdó, majd belőle a hatáskeresztmetszet kiszámításához egy Schrödinger-egyenletet kell megoldani, ami – már megszokhattuk – általában nehéz feladat. Két határesetben azonban leegyszerűsödik: ha a bejövő

részecske nagyon gyors, vagy ha nagyon lassú. Az első tipikus játéktere a perturbációs számításnak: a gyors részecske kinetikus energiájához képest a szórócentrum hatása gyenge perturbáció. A második határeset tartalma nem ennyire nyilvánvaló; azzal a következő pontban külön foglalkozunk.

A szórási feladat legalacsonyabb rendű perturbációs megoldását nevezik *Born-közelítésnek*. Levezetésére a (14.5) egyenletet írjuk integrálegyenlet alakjába:

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{2M}{\hbar^2} \int d^3r' G(\vec{r}-\vec{r}') V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}'). \quad (14.6)$$

Ez a szóráselmélet egyik hatékony eszköze, a *Lippmann–Schwinger egyenlet*, amelyben $G(\vec{r})$ a hullámegyenlet Green-függvénye. Ez kielégíti a

$$(\Delta + k^2) G(\vec{r}) = \delta(\vec{r}). \quad (14.7)$$

differenciálegyenletet, de a megoldásba határfeltételként be kell építenünk a (14.2) feltételezést, hogy kiválasszuk a Green-függvények közül a kifutó gömbhullámot.

Kezdjük iterálni a (14.6) egyenletet, nulladik közelítésnek a bejövő hullámot tekintve:

$$\Psi(\vec{r}) \approx e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{2M}{\hbar^2} \int d^3r' G(\vec{r}-\vec{r}') V(\vec{r}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}. \quad (14.8)$$

Ez maga a Born-közelítés, de amíg ebből kitermeljük a (14.2) alakot és leolvashatjuk az $f(\vartheta, \varphi)$ szórási amplitúdót, addig még dolgozni kell.

Fogjunk hozzá. Fourier-transzformáljuk a Green-függvényt és a delta-függvényt:

$$G(\vec{r}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} G_{\vec{q}}; \quad \delta(\vec{r}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}. \quad (14.9)$$

Ezt behelyettesítve a (14.7) egyenletbe, azt kapjuk, hogy

$$G_{\vec{q}} = \frac{1}{k^2 - q^2}, \quad (14.10)$$

amivel, \vec{r} irányát választva a gömbi koordináták tengelyéül,

$$\begin{aligned} G(\vec{r}) &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{k^2 - q^2} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dq \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi q^2 \sin\vartheta \frac{e^{iqr\cos\vartheta}}{k^2 - q^2} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{k^2 - q^2} \int_{-1}^1 dy e^{iqry}, \end{aligned} \quad (14.11)$$

ahol az utolsó lépésben bevezettük az $y := \cos \vartheta$ jelölést.

Elvégezve az utolsó integrált, a Green-függvény következő alakja:

$$\begin{aligned} G(\vec{r}) &= \frac{1}{4\pi^2 i r} \int_0^\infty dq \frac{q}{k^2 - q^2} (e^{iqr} - e^{-iqr}) = \frac{1}{4\pi^2 i r} \int_{-\infty}^\infty dq \frac{q}{k^2 - q^2} e^{iqr} \\ &= \frac{-1}{8\pi^2 i r} \int_{-\infty}^\infty dq \left(\frac{e^{iqr}}{q+k} + \frac{e^{iqr}}{q-k} \right). \end{aligned} \quad (14.12)$$

Ez az a pont, ahol figyelembe kell vennünk a határfeltételt: kifutó gömbhullámra van szükségünk, befutóra nincs. Ezt komplex integrálással lehet elérni: az utolsó integrál kontúrját a felső félsík peremén zárjuk, a q -tengely mentén pedig megnézzük, melyik pólus ad kifutó hullámot, azt a kontúrton belülre vesszük, a másikat kívül hagyjuk. A nyerő pólus: $q = k$; a neki megfelelő reziduum: e^{ikr} , ez adja a gömbhullámot:

$$G_+(\vec{r}) = \frac{-1}{8\pi^2 i r} 2\pi i e^{ikr} = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}. \quad (14.13)$$

Ez a kifutó Green-függvény, amit kerestünk. Helyettesítsük be a (14.6) egyenletbe, és próbáljuk meg belelátni az elvárt aszimptotikát:

$$\frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \varphi) = \frac{2M-1}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3 r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}. \quad (14.14)$$

A tört nevezője már szinte jó: nyugodtan közelíthetjük r -rel és kiemelhetjük. A kitevőben a nagy k szorzó (nagy energiájú részecskék gyorsan mennek!) miatt pontosabban kell számolni! Figyelembe véve, hogy $r \gg r'$, az utóbbi szerint sorba fejthetünk:¹

$$k|\vec{r}-\vec{r}'| = k\sqrt{r^2 + (r')^2 - 2\vec{r}\cdot\vec{r}'} \approx kr \left(1 - \frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2} \right) = kr - \vec{k}'\cdot\vec{r}', \quad (14.15)$$

ahol felhasználtuk, hogy \vec{r} iránya egyben a kimenő hullámvektor \vec{k}' iránya is, miközben – rugalmas szórásról lévén szó – $|\vec{k}'| = |\vec{k}| = k$.

Most már csak össze kell gyűjteni a tényezőket:

$$f(\vartheta, \varphi) = \frac{-M}{2\pi\hbar^2} V_{\vec{Q}}, \quad (14.16)$$

¹ Aki azt gondolja, hogy ez az optikai diffrakció elméletéből ismert Fraunhofer-sorfejtés, nem téved.

ahol

$$\hbar\vec{Q} = \hbar\vec{k}' - \hbar\vec{k} \quad (14.17)$$

a szórócentrum által a szóródó részecskének átadott impulzus, és

$$V_{\vec{Q}} = \int d^3r' e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \quad (14.18)$$

a szóró potenciál Fourier-transzformáltja; lényegében átmeneti mátrixeleme a bejövő és egy kimenő síkhullám között.

Ez csak aláhúzza, hogy amit kiszámoltunk, az lényegében egy perturbációs sorfejtés legalacsonyabb rendje. Négyzetre emelve a (14.16) eredményt, megkapjuk a szórás differenciális hatáskeresztmetszetét:

$$\sigma(\vartheta, \varphi) = \frac{M^2}{4\pi^2\hbar^4} |V_{\vec{Q}}|^2. \quad (14.19)$$

Ugyanezt kaptuk volna a Fermi-féle aranyszabályból is. (*Gyakorlat: vezessük le!*)

14.4. Összetett tárgy szórási képe

A hosszú levezetés után pihenésül számoljuk ki Born-közelítésben sok, azonosan szóró, de különböző helyen tartózkodó tárgy (pl. atomok egy kristályban) együttes rugalmas szórásának amplitúdóját és hatáskeresztmetszetét. Legyenek a szóró atomok \vec{R}_i helyeken rögzítve; akkor az együttes szórópotenciál

$$V(\vec{r}) = \sum_i v(\vec{r} - \vec{R}_i), \quad (14.20)$$

aminek a Fourier-transzformáltja a (14.18) formulával összhangban

$$V_{\vec{Q}} = \sum_i e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{R}_i} v_{\vec{Q}}, \quad (14.21)$$

ahol

$$v_{\vec{Q}} = \int d^3r' e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}'} v(\vec{r}'). \quad (14.22)$$

Mivel a konstans szorzók nem változnak, a végeredmény a szórási amplitúdóra:

$$f(\varphi, \vartheta) = f_0(\vartheta) \sum_i e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{R}_i}, \quad (14.23)$$

ahol

$$f_0(\vartheta) = \frac{-M}{2\pi\hbar^2} v_{\vec{Q}}, \quad (14.24)$$

a hatáskeresztmetszet pedig

$$\sigma(\varphi, \vartheta) = \sigma_0(\vartheta) \sum_i \sum_j e^{-i\vec{Q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}, \quad (14.25)$$

ahol

$$\sigma_0(\vartheta) = |f_0(\vartheta)|^2. \quad (14.26)$$

Az eredmény két tényező szorzatára esik szét: egy $\sigma_0(\vartheta)$ *alakfaktorra*, amely csak az egyes atom alakjától és egyéb tulajdonságaitól függ, és egy *szervezetfaktorra*, amely az atomok térbeli elhelyezkedésére jellemző. Ha az atomok termikus mozgására átlagolunk, a szervezetfaktor lényegében a két-atom-eloszlás térbeli Fourier-transzformáltja, amit szórás kísérletekkel – legtöbbször röntgensugarak vagy neutronok szórásával – ki lehet mérni. Az utóbbi száz évben ezzel a módszerrel alapos ismereteket szereztünk a körülöttünk levő anyagok szerkezetéről. Ha még rugalmatlan szórást is megengedünk, és a szórt anyaghullámokat energia szerint is analizáljuk,² akkor nem csak a szerkezetéről, hanem az atomok kollektív mozgásáról is sok információ nyerhető.

14.5. Gömbszimmetrikus potenciál: kifejtés parciális hullámok szerint

A parciális hullámok módszere az impulzusmomentum sajátfüggvényei szerinti kifejtést jelenti. Ez a maga általánosságában minden gömbszimmetrikus potenciálra érvényes, de igazán akkor hasznos, ha a beeső részecske energiája kicsiny; ilyenkor a kis impulzusmomentumok dominálnak a kifejtésben, és a konvergencia gyors: elég néhány tagot – gyakran csak egyet – figyelembe venni.

Ami gömbszimmetrikus, az hengersizimmetrikus is, emiatt a hullámfüggvény nem függhet a φ szögtől, így csak $m = 0$ tagok szerepelnek benne:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l R_l(r) Y_l^{(0)}(\vartheta). \quad (14.27)$$

Hasznos lesz tudni, hogy

$$Y_l^{(0)}(\vartheta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta), \quad (14.28)$$

² Ennek technikái főleg neutronszórásra fejlődtek ki.

és ezzel a normálással a térszögre integrálva ezek a függvények ortonormáltak:

$$\int Y_l^{(0)}(\vartheta) Y_{l'}^{(0)}(\vartheta) d\Omega = \delta_{ll'}, \quad (14.29)$$

továbbá még annyit is, hogy

$$P_l(1) = 1, \quad \forall l. \quad (14.30)$$

Amint már a centrális potenciál kötött állapotainál megtanultuk, a radiális Schrödinger-egyenlet szingularitásait jótékonyan enyhíthi, ha bevezetjük a $\chi_l(r) := rR_l(r)$ függvényt, amely a következő radiális egyenletnek tesz eleget:

$$\chi_l'' + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2M}{\hbar^2} V(r) \right) \chi_l = 0. \quad (14.31)$$

Ez olyan, mint egy egydimenziós Schrödinger-egyenlet, és ugyanúgy megoldható. $R_l(0)$ végeességéből következik a $\chi_l(0) = 0$ határfeltétel.

$V(r) \equiv 0$ esetén a fenti egyenlet megoldásai az $R_l(r) = j_l(kr)$ „gömbi Bessel-függvények”; belőlük összerakható a bejövő síkhullám:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) Y_l^{(0)}(\vartheta). \quad (14.32)$$

A kölcsönhatás megváltoztatja az egyes radiális komponenseket, és a megváltozásokból tevődik össze az aszimptotikusan kifutó gömbhullám. Kövessük nyomon, hogy történik ez.

A gömbi Bessel-függvények aszimptotikus alakja:

$$j_l(kr) \sim \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} = \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{2i} \frac{(-i)^l}{k} - \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{1}{2i} \frac{i^l}{k}. \quad (14.33)$$

Hogyan változik meg ez a kölcsönhatástól? Túl a potenciál hatósugarán, a függvény alakja nem változhat, csak két dolog történhet vele: egy fáziseltolás és egy számmal való szorzás:

$$j_l(kr) \rightarrow C_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr} = \frac{e^{ikr}}{r} \frac{C_l e^{i\delta_l}}{2i} \frac{(-i)^l}{k} - \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{C_l e^{-i\delta_l}}{2i} \frac{i^l}{k}. \quad (14.34)$$

A jobboldalon az első tag a kifutó, a második a befutó hullám, és a kauzalitás miatt csak a kifutó hullám változhat meg, a befutó nem, ezért

$$C_l e^{-i\delta_l} = 1, \quad C_l = e^{i\delta_l}. \quad (14.35)$$

Ezzel a kifutó hullám megváltozása:

$$\frac{e^{ikr}}{r} \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2i} \frac{(-i)^l}{k} = \frac{e^{ikr}}{r} e^{i\delta_l} \sin \delta_l \frac{(-i)^l}{k}. \quad (14.36)$$

Ezt behelyettesítve a (14.32) összegbe, megkapjuk a hullámfüggvény megváltozását a $V(r)$ potenciál bekapcsolásától; ez a megváltozás tényleg egy kifutó gömbhullám, amelynek amplitúdója a keresett szórás amplitúdó:

$$f(\vartheta) = \frac{\sqrt{4\pi}}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{2l+1} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_l^{(0)}(\vartheta). \quad (14.37)$$

A szórás hossza a $V(r)$ potenciál alakját, erősségét, hatótávolságát kizárólag a $\delta_l(E)$ fázistolásokon keresztül érzi meg, amelyek karakteresen függenek az $E = \hbar^2 k^2 / 2M$ energiától. A fázistolásokat a (14.31) egyenlet kapcsolja össze a potenciálfüggvénnyel.

A radiális Schrödinger-egyenlet megoldása nélkül is szolgáltat a (14.37) formula néhány fontos általános tanulságot. Mindenekelőtt számítsuk ki a teljes (a $d\Omega$ térszögre integrált) hatáskeresztmetszetet, kihasználva a gömbfüggvények (14.29) ortonormáltságát:

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega |f(\vartheta)|^2 = \int_0^\pi d\vartheta 2\pi \sin \vartheta |f(\vartheta)|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(E). \quad (14.38)$$

Vegyük észre, hogy amennyiben a hatáskeresztmetszetben egyetlen fázistolás dominál (lásd a következő pontot), akkor az energia függvényében a hatáskeresztmetszet élénken változhat, feltűnő effektusokat okozva:

- Lassú elektronokat szórátva egy atomon, $\delta_0(E)$ dominál (lásd a következő pontot); amelyik energiánál $\delta_0(E) = n\pi$ ($n = 1, 2, \dots$), ott az atom „átlátszóvá” lesz az elektronok számára. Ez a *Ramsauer-effektus*.
- Ha valamelyik l -re egy E_0 energián $\delta_l(E_0) = (n + \frac{1}{2})\pi$, azon az energián a $\sigma_{tot}(E)$ teljes hatáskeresztmetszet rezonanciaszerű maximumot mutat. Ha a maximum félértékszélessége ΔE , ez a határozatlansági relációnak megfelelően $\hbar/\Delta E$ élettartamú, E_0 energiájú, $\hbar l$ impulzusmomentumú kvázi-kötött állapotot jelez. Ez nem csak potenciálszórásra igaz: az ismert instabil (10^{-23} s körüli élettartamú) elemi részecskék sokaságát szórás rezonanciaként fedezték fel az 1960-as években; ebből a felfedezésből nőtt ki az erős kölcsönhatások standard modellje.

Még egy alapvető általános tulajdonsága van a (14.37) szórás amplitúdónak. Számítsuk ki a 0 szöghöz tartozó értékét, vegyük figyelembe a (14.30)

tulajdonságot, és vegyük az eredmény imaginárius részét:

$$\Im f(0) = \Im \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (14.39)$$

Hasonlítsuk össze az eredményt a (14.38) formulával:

$$\Im f(0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{tot}. \quad (14.40)$$

Ennek az eredménynek külön neve van: ez az *optikai tétel*. Szavakban elmondva: a teljes szórást kötelezően *előreszórás* kíséri; az előreszórás amplitúdójának imaginárius része arányos a teljes hatáskeresztmetszettel. Ez a tétel a szórási folyamatokra a kvantummechanikai időfejlődés unitaritását, vagyis a valószínűség megmaradását fejezi ki, a következő logikával: a (14.2) formulában úgy látszik, mintha a kifutó gömbhullám megjelenése érintetlenül hagyná a befutó síkhullámot. Ez nem lehet igaz: ami egyszer kiszóródik, az nem mehet tovább. A szuperpozíció elve miatt ezt csak egyféleképpen lehet biztosítani: a továbbmenő síkhullámból interferenciával ki kell oltani annyit, amennyi kiszóródott. Ezt biztosítja az előreszóró hullám.

A (14.40) összefüggés nemcsak a levezetésben szereplő potenciálszórásra, hanem minden rugalmas és rugalmatlan szórásra vagy reakcióra is érvényes: ami bármilyen csatornán eltűnt a bejövő nyalábból, azt mind ki kell oltani előreszórással.

14.6. Alacsonyenergiás határeset: s-szórás, szórási hossz

Lassú bejövő részecskének hosszu a hullámhossza. Ha hosszabb, mint a szóró potenciál r_0 hatótávolsága, akkor a potenciál „nem érzi”, hogy honnan jött a részecske, és gömbhullám alakjában szórja vissza: ilyenkor csak s -hullám marad, és a parciális hullámok szerinti sorfejtés egyetlen tag után levágható.

A tiszta s -szórásnak szögektől nem függő, izotrop szórási amplitudó felel meg. Ezt így szokták írni:

$$f(\vartheta) = -a = -\frac{\sqrt{4\pi}}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0; \quad \sigma(\vartheta) = |a|^2, \quad (14.41)$$

ahol a neve: *szórási hossz*.

Az eddigieknek van azonban egy feltétele: a szóró potenciál hatótávolságának végesnek kell lennie. Egy nevezetes ellenpélda: Coulomb-erőkre,

amelyek karakterisztikus hosszúság nélkül, hatványfüggvény alakjában csökkenve, nagy távolságra is érezhetőek, a parciális hullámok sora rosszul konvergál.

Annak logikája, hogy a parciális hullámok impulzusmomentum szerint haladó sora akkor konvergál gyorsan, ha a bejövő részecske nagyon lassú, egy kicsit részletesebben is megérthető. A (14.31) egyenletben megjelenik a $(\hbar^2/2M)[l(l+1)/r^2]$ centrifugális potenciál, amely $l \geq 1$ esetén taszító, és a bejövő részecske nekiütközik. Ahol a centrifugális potenciál megegyezik a bejövő részecske $(\hbar^2/2M)k^2$ kinetikus energiájával, ott van a részecske visszapatannását jellemző

$$r = r_l = \sqrt{\frac{l(l+1)}{k^2}} \quad (14.42)$$

klasszikus fordulópont,³ ahol $(\hbar k r_l)^2 = \hbar^2 l(l+1)$. Ha ez a fordulópont kívül esik az r_0 hatótávolságon, a részecske nem is találkozik a potenciállal, mert a centrifugális erő messzire pörgeti: ezek a nagy impulzusmomentumú parciális hullámok nem szóródnak. Minél lassabb a részecske, annál nagyobb távolságra kell kipörögnie, hogy egy adott l impulzusmomentum kiteljen belőle: annál kisebb l -nél következik be a sor levágása.

$l = 0$ -ra nincs centrifugális potenciál: az s-hullám mindig eljut a szórócentrum aktív részébe, emiatt s-szórás mindig van. Kivéve persze a már említett Ramsauer-effektusnak megfelelő esetet, amikor egy adott energián $\delta_0 = n\pi$ (n egész), emiatt $a = 0$.

³ Természetesen a visszapatannó hullám még egy kicsit tovább szivárog, a mélységgel lecsengő evaneszcens hullám alakjában.

15. fejezet

Többrészecskes rendszerek kvantummechanikája

Ez a hosszúra nőtt fejezet sok tekintetben a lelke az egész könyvnek; az eddigiek megtanulása – bár minden része önmagában is fontos – mintha csak azt készítené elő, hogy az olvasó az itt következőket könnyebben megértse.

15.1. A kölcsönható részecskék összefonódása

A hidrogénatom elektronjának mozgását a 10. fejezetben ismertük meg, A mozgást egy $\psi_e(\vec{r}_e, t)$ hullámfüggvénnyel írtuk le, amely eleget tesz az elektron Schrödinger-egyenletének:

$$\partial_t \psi_e(\vec{r}_e, t) \stackrel{?}{=} -\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e + V(|\vec{r}_e - \vec{r}_p|) \right] \psi_e(\vec{r}_e, t), \quad (15.1)$$

ahol \vec{r}_p a proton helye.

A proton azonban, ha közel kétezerszer nehezebb is az elektronnál, maga is elemi részecske; kétségkívül a mikrovilág része, amely ugyanúgy anyag-hullámként mozog, azon belül akárhol lehet. Mozgását, gondolhatnánk teljes joggal, egy másik Schrödinger-egyenlet írja le:

$$\partial_t \psi_p(\vec{r}_p, t) \stackrel{?}{=} -\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_p + V(|\vec{r}_p - \vec{r}_e|) \right] \psi_p(\vec{r}_p, t), \quad (15.2)$$

ahol \vec{r}_e a elektron helye.

Ez így együtt nem lehet igaz. Nem tudjuk, mit írjunk az első egyenletben \vec{r}_p helyére és a második egyenletben \vec{r}_e helyére, mert ezek maguk is egy anyaghullámban vannak elkenve.

A két kölcsönható részecske mozgása tehát kibogozhatatlanul *összefonódik*: amíg kötve maradnak egy hidrogénatom alakjában, addig amerre az egyik megy, nagyjából arra megy a másik is. Schrödinger találta meg ennek megfelelő matematikai kifejezését¹: ilyenkor nincs külön hullámfüggvénye

¹ Schrödinger nemcsak a matematikai kifejezését, hanem a *nevét* is kitalálta, tőle ered maga az „összefonódás” kifejezés, németül „Verschränkung”, de a világban leginkább an-

az elektronnak és a protonnak, hanem a kettőnek együtt van egy $\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t)$ hullámfüggvénye a 6 dimenziós *konfigurációs térben*, amely egyetlen, közös Schrödinger-egyenletet elégít ki:

$$\partial_t \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{ep} \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t), \quad (15.3)$$

ahol

$$\hat{H}_{e,p} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_p + V(|\vec{r}_e - \vec{r}_p|) \quad (15.4)$$

a kölcsönható elektron–proton rendszer Hamilton-operátora.

A közös hullámfüggvényhez is tartozik egy Born-szabály. A két részecskét két detektorral lehet megtalálni: egy elektrondetektorral az \vec{r}_e hely d^3r_e környezetében, és ugyanakkor egy protondetektorral az \vec{r}_p hely d^3r_p környezetében; ilyenkor az egyidejű megtalálás valószínűsége

$$P_{ep}(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t) d^3r_e d^3r_p = |\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t)|^2 d^3r_e d^3r_p. \quad (15.5)$$

Természetesen nem tilos egyetlen detektort használni; ilyenkor a mérés statisztikáját úgy kapjuk meg, ha a nem detektált változóra kiintegráljuk a közös valószínűséget. Pl. ha az elektrondetektorunkat tartjuk meg, akkor

$$P_e(\vec{r}_e, t) d^3r_e = \left(\int |\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t)|^2 d^3r_p \right) d^3r_e. \quad (15.6)$$

A közös hullámfüggvényben kifejezett összefonódás az idő előrehaladtával a kvantummechanika legfontosabb és sok tekintetben legrejtélyesebb tulajdonságává lépett elő.

Az összefonódásnak sok közvetlen megfigyelhető következménye van; legismertebb talán a *Van der Waals-erő*: az a jelenség, hogy elektromosan semleges testek is gyengén vonzzák egymást. Ezért tapad a ceruza grafitja a papírhoz, a virágpör a méh potrohához. Az oka a két test elektronjainak összefonódása: ha az egyik test elektronja közelebb megy a másik testhez, akkor annak az elektronja távolabb megy és viszont; így is, úgy is egymást vonzó dipólusok néznek egymással szembe.

Ilyet a klasszikus statisztikus fizikában, sőt a mindennapok statisztikájában is láthatunk; a neve: *korreláció*. Kvantummechanikaivá a korrelációt az finomítja, hogy a közös hullámfüggvény *interferenciára* képes, emiatt erősítések és kioltások markánsan befolyásolják a megfigyelhető korrelációkat,

gölgul használják: *entanglement*. Ez az angol „tangle”=bozót jelentésű szóból ered, és jobban kifejezi a lényegét, mint német vagy magyar megfelelője.

ami többek között a kémiai kötések természetrajzát teszi sokkal változatosabbá; ha az ember beletanul a kvantumkémiaiába, ehhez is hozzá fog szokni.

Önmagában véve a *korreláció* nem rejtélyes: az, hogy egy egymást vonzó elektron és proton hidrogénatomként egymás közelében marad, egy cseppet sem szokatlanabb, mint az, hogy egymást kedvelő vagy nem kedvelő emberek keresik vagy kerülnek egymás közelségét. Az élesen mintázott közös interferencia azonban már magát az összefonódott partnerek egyéni *létezését* korlátozza, sokkal durvábban, mint akármi, amit klasszikus korrelációnak gondolnánk. Ettől lesz igazán rejtélyes az is, hogy a kvantummechanikai összefonódás akkor is megmarad, ha az egyszer kölcsönhatásba került részecskék egymástól messze eltávolodnak. Ezt először Einstein, Podolsky és Rosen (1935) írta le a fizikai irodalom egyik legtöbbet hivatkozott cikkében. Eleinte hinni sem akarták, hogy ilyen lehetséges, de ma már a távoli kvantumösszefonódást számos kísérlet bizonyítja, olyan fotonokon, amelyek üvegszálakon vagy – szép időben – szabad levegőben akár száz kilométernél többre is eltávolodtak egymástól. Ennek részleteivel a 15.10. pontban fogunk megismerkedni.²

15.2. Tömegközépponti és belső mozgás; elemi és összetett „részecskék”

Az eddigiek legegyszerűbb alkalmazása a (15.3) egyenlet megoldása a hidrogénatom esetére. Visszaemlékezve, hogy mit is tettünk, amikor eszünkbe jutott, hogy a Nap sincs odaszögezve az égre és mégis keringünk körülötte, vezessük be az \vec{r}_e és \vec{r}_p helyvektorok helyett a hidrogénatom

$$\vec{r} := \vec{r}_e - \vec{r}_p \quad (15.7)$$

„belső” koordinátáját és

$$\vec{R} := \frac{m_e \vec{r}_e + m_p \vec{r}_p}{m_e + m_p} \quad (15.8)$$

tömegközépponti koordinátáját. A változóhelyettesítéseket elvégezve, a (15.4) Hamilton-operátor szétesik két tagra: $\hat{H}_{e,p} = \hat{H}_{\vec{r}} + \hat{H}_{\vec{R}}$, ahol

$$\hat{H}_{\vec{r}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + V(r); \quad \hat{H}_{\vec{R}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}}, \quad (15.9)$$

² Két részecske összefonódásának látványos hatásai addig figyelhetők meg, amíg csak ketten vannak; amint a környezet is bekerül az összefonódásba, a mérhető jeleket elmossa a zaj.

amelyben

$$M = m_p + m_e \quad (15.10)$$

a hidrogénatom tömege, és

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_p}} \quad (15.11)$$

a klasszikus Kepler-problémából ismert redukált tömeg.

Maradjunk az időtől független Schrödinger-egyenletnél:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}, t) = \phi(\vec{r}, \vec{R}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right); \quad \hat{H}_{e,p} \phi = E \phi. \quad (15.12)$$

Keressük a megoldást szorzatalakban:

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}, \vec{R}) &= f(\vec{r}) F(\vec{R}); \\ \hat{H}_{\vec{r}} f(\vec{r}) &= E_{(\vec{r})} f(\vec{r}); \quad \hat{H}_{\vec{R}} F(\vec{R}) = E_{(\vec{R})} F(\vec{R}). \end{aligned} \quad (15.13)$$

Behelyettesítve, nem nagy meglepetésre, azt kapjuk, hogy

$$E = E_{(\vec{r})} + E_{(\vec{R})}. \quad (15.14)$$

Ha pl. a belső mozgás a hidrogénatom egy n főkvantumszámú stacionárius állapotának felel meg, a tömegközéppont pedig síkhullámszerűen mozog $\hbar \vec{K}$ impulzussal, akkor

$$E(n, \vec{K}) = -\frac{Ry(\mu)}{n^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2M}, \quad (15.15)$$

ahol a Rydberg-állandó kiszámításánál az (1.10) formulában az m_e elektrontömeget a μ redukált tömeggel kell helyettesítenünk. Ez fél ezrelékes korrekció, amit a pontos spektroszkópiai mérések könnyen igazoltak. Nehéz hidrogén esetén a korrekció megfelelődik; ez volt a spektroszkópiai bizonyítéka a deutérium létezésének (Urey, 1931).³

A tömegközéppont mozgását akárhány részecskéből álló kötött rendszer konfigurációs térbeli hullámfüggvényéből le lehet választani; ami marad, azok a belső mozgások. Ilyen értelemben egy sok nukleonból álló atommag, egy atom vagy akár egy óriási molekula is a tömegközépponti mozgás szempontjából egyetlen „részecskének” tekinthető, és akár részecskeszzerű

³ A neutron 1932-ben fedezte fel Chadwick; ez magyarázta meg, hogy mi is a deutérium, ennek nyomán kapott kémiai Nobel-díjat Urey 1934-ben.

interferenciaképet is képes létrehozni, mindaddig amíg a mozgás közben a belső állapota lényegesen meg nem változik, mondjuk egy kemény ütközéstől.

A szellemi játékot folytathatjuk a nukleontól lefelé is: sohase tudhatjuk, hogy amit mozogni látunk, az már igazán oszthatatlan elemi részecske, vagy még elemibb alkotókból van összetéve, csak a tömegközéppontja mozog olyan lassan, hogy belső állapota befagyva marad az alapállapot közelében. Ez a kvantummechanikába kódolt titok jelentékeny hajtóereje a mind nagyobb részecskegyorsítók építésének.

15.3. Azonos részecskék megkülönböztethetlensége

Ha nem egy protont és egy elektront szeretnénk leírni, hanem két elektront, a (15.4) Hamilton-operátor szimmetrikussá válik a két részecske *felcserélésével* (permutációjával) szemben, emiatt a Hamilton-operátor és a permutáció műveleteinek kommutátora eltűnik. Ekkor az energiasajátfüggvények választhatók úgy, hogy a felcserélés szimmetriaműveletének is sajátfüggvényei legyenek. Mivel kétszeri, oda-vissza csere után visszajutunk a kiinduló állapotba, a felcserélés operátorának sajátértéke csak $+1$ vagy -1 lehet; a megfelelő sajátállapotokat a felcseréléssel szemben *szimmetrikusnak*, ill. *antiszimmetrikusnak* nevezzük.

Áttérve az időfüggő Schrödinger-egyenletre, a Hamilton-operátorral felcserélhető permutáció operátora megmaradó mennyiség, tehát ha szimmetrikus vagy antiszimmetrikus kezdőállapotból indulunk, a kezdeti szimmetria-tulajdonság az időbeli fejlődés során is megmarad.

A felcserélés műveletébe a belső szabadságfokokat is bele kell érteni; elemi részecskénél⁴ ez többnyire a spint jelenti. Két részecskére tehát:

$$\Psi_s(\vec{r}_1, \vec{s}_1; \vec{r}_2, \vec{s}_2) = \Psi_s(\vec{r}_2, \vec{s}_2; \vec{r}_1, \vec{s}_1) \quad (15.16)$$

szimmetrikus hullámfüggvényt,

$$\Psi_a(\vec{r}_1, \vec{s}_1; \vec{r}_2, \vec{s}_2) = -\Psi_a(\vec{r}_2, \vec{s}_2; \vec{r}_1, \vec{s}_1) \quad (15.17)$$

antiszimmetrikus hullámfüggvényt jelent. Elterjedt tömör írásmódban $(\vec{r}_1, \vec{s}_1) =: 1$, $(\vec{r}_2, \vec{s}_2) =: 2$. Így írva, a szimmetrikus eset: $\Psi_s(1, 2) = \Psi_s(2, 1)$, az antiszimmetrikus $\Psi_a(1, 2) = -\Psi_a(2, 1)$.

Ennyi következik a Hamilton-operátor szimmetriájából. A kísérleti eredmények sokasága azonban, hosszadalmas és göröngyös úton, főleg Pauli zsenialitásának köszönhetően, ennél sokkal élesebb eredményhez vezetett el:

⁴ Vagy azonos összetett részecskékénél, pl. atomoknál, ha azok belső mozgásaikat tekintve azonosan alapállapotban vannak.

a szimmetrikus és antiszimmetrikus hullámfüggvények nem választhatók szabadon és nem is szuperponálhatók szabadon, hanem az elemi részecskék *fajtájától* függ a választás: vannak szimmetrikus és vannak antiszimmetrikus hullámfüggvényű részecskék!⁵

Hogy melyik részecske melyik szimmetriaosztályba tartozik, az pedig a részecskék *spinjén* múlik:

- *Feles* spinű részecskék (elektron, proton, neutron, neutrínó, müion, ${}^3\text{He}$ atom stb.) hullámfüggvénye két részecske felcserélésekor előjelet vált, vagyis *antiszimmetrikus*. Ennek legfeltűnőbb következménye, hogy ha a két részecske azonos spinnel közelít egymáshoz, a közös hullámfüggvény csak úgy őrizheti meg antiszimmetrikusságát, hogy 0-hoz tart. A feles spinű részecskék tehát minden taszító kölcsönhatás nélkül is „kerülik egymás közelségét”; ez a *Pauli-elv*. A kölcsönös elkerülés kényszere a sokrészecskerendszereket még alacsony hőmérsékleten is viszonylag magas energiájú állapotokba kényszeríti. Az ezt kiaknázó statisztikus fizikai leírás, a „Fermi–Dirac statisztika” nevére utalva, a feles spinű elemi vagy összetett részecskéket *fermionoknak* nevezik.
- *Egész* spinű részecskék (foton, pion, kaon, ${}^4\text{He}$ atom stb.) hullámfüggvénye két részecske felcserélésekor nem változik, vagyis *szimmetrikus*. Ennek legfeltűnőbb következménye, hogy alacsony hőmérsékleten a részecskék tömör, alacsony energiájú állapotba sűrűsödnek (Bose–Einstein kondenzáció; Bose–Einstein statisztika). Erre utalva az egész spinű elemi vagy összetett részecskéket *bozonoknak* nevezik.

Az eddigieknek van egy fontos, közvetlen következménye, amely független attól, melyik csoportba tartozó részecskéket vizsgálunk. Mivel nincsenek vegyes szimmetriájú részecskék, azonos részecskékből álló rendszernek tartoznia kell *valamelyik* kategóriába: hullámfüggvénye két részecske felcserélésével szemben vagy szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus. Mivel minden mérhető tulajdonság csak a hullámfüggvény abszolút érték négyzetétől függ, azonos részecskék felcserélése az eredetitől megkülönböztethetetlen állapotot hoz létre, vagyis *azonos részecskék megkülönböztethetetlenek*.

Ez a kvantummechanikának váratlan és kemény állítása, amely már jóval a kvantummechanika megszületése előtt jelt adott magáról a *Gibbs-paradoxon* alakjában, amely a keverési entrópia egyfelől természetes, másfelől mégis rejtélyes tulajdonsága. Különböző gázok összekeverése entrópiánö-

⁵ Matematikailag létezhetnének a permutációk csoportjának vegyes szimmetriájú ábrázolásai is; a fizikai tapasztalat azt igazolta, hogy ezeket megvalósító elemi részecskék nem léteznek.

vekedéssel jár, amely a gázok anyagától nem függ, csak a keverési aránytól. Azonos gázok összekeverésekor azonban nem változik az entrópia: nem létezik az „egyre jobban hasonlít, a végén teljesen megegyezik” határátmenet. Ennek háttérében a kvantummechanika rejtőzik: ez tesz éles különbséget az azonos vagy nem azonos részecskék esete között. Az entrópia az állapotok összeszámlálásán alapuló mennyiség; azonos részecskék helycseréjével nem keletkezik új állapot: nem változik az entrópia.

Az, hogy éppen a feles spinhez tartozik az antiszimmetrikus, az egészhez a szimmetrikus hullámfüggvény, ellentmondás nélkül illik egymáshoz: páros számú fermionból álló összetett részecskék felcserélésekor páros számú jelváltás történik, tehát nem történik jelváltás, összhangban azzal, hogy páros számú feles spin eredője egész spin. Fordítva ez nem működne.

Hogy miért éppen a feles vagy egész spinen múlik a hullámfüggvény antiszimmetrikus vagy szimmetrikus volta (más szóval: a Fermi–Dirac vagy Bose–Einstein statisztika választása), az mégsem egyszerű kérdés. A relativisztikus kvantumtérelmélet szolgáltat egy bizonyítást („Pauli–Lüders tétel”), de újabban egyre többen keresnek indokolást a nemrelativisztikus kvantummechanika keretein belül. Az alapgondolat eléggé kézenfekvő: két részecskét egy tengely körüli 180° -os forgatással meg lehet cserélni, ezért a forgatást generáló impulzusmomentum, a spin tartja kézben a felcserélés műveletét. A nehezebb része a dolognak az, hogy mi történik ilyenkor a többi részecskével. Emiatt a spin-statisztika kapcsolat nemrelativisztikus levezetései a jelen könyv írásakor a fejlesztés állapotában vannak.

15.4. Kölcsönhatás nélküli azonos részecskék, egyrészecske-állapotok betöltése, átlagtérközelítés

A kölcsönható sokrészecske-rendszerek kvantummechanikájára épül a molekulák tulajdonságainak kvantummechanikai meghatározását jelentő kvantumkémia, továbbá a szilárd testek fizikájának jelentékeny része. Mivel sokváltozós Schrödinger-egyenletek analitikus megoldása általában reménytelen feladat, óriási fegyvertára alakult ki a többnyire perturbációs vagy variációs alapokból kiinduló és kiterjedt numerikus számításokban végződő módszereknek. Ezekből a kvantummechanika nyolcvan éve alatt rengeteg eredmény, és kísérletileg jól vizsgálható, szép és érdekes jelenségek sokaságának megértése született meg.

Van azonban egy megoldható határeset: a kölcsönhatás nélküli részecskék esete, amelynek tanulságai nélkülözhetetlen kiindulópontot jelentenek a bo-

nyolultabb esetek felé vezető úton, és közvetlen átjárást kínálnak egy durva, de sokszor hatékony közelítő módszer: az *átlagtérközelítés* felé.

Ha nincs kölcsönhatás, akkor a Hamilton-operátor azonos egyrészecske-energia tagok összege: $\hat{H} = \sum_l \hat{H}_l^{(1)}$; ahol $\hat{H}_l^{(1)} := -(\hbar^2/2m) \Delta_l + V(\vec{r}_l)$. Ilyenkor a Schrödinger-egyenletnek mindenképpen léteznek szorzatalakú megoldásai:

$$\phi_0(1, 2, 3, \dots) = \phi_a(1)\phi_b(2)\phi_c(3)\dots, \quad (15.18)$$

ahol a $\phi_a(\vec{r}, \vec{s})$ stb. *egyrészecske-állapotok* a $\hat{H}^{(1)}$ egyrészecske – Hamilton-operátor különböző ortonormált sajátfüggvényei:

$$\hat{H}^{(1)}\phi_a = \varepsilon_a\phi_a, \quad \text{stb.} \quad (15.19)$$

A (15.18) szorzatok megoldásai a Schrödinger-egyenletnek, de általában nem elégítik ki a szimmetriafeltételeket. Azonban az egyrészecske-állapotok között minden módon permutálva az 1, 2, ... részecskék kiosztását, majd a permutációkat megfelelő előjelekkel összeadva és a végeredményt normalizálva, megfelelően szimmetrizált konfigurációs térbeli hullámfüggvényeket kapunk.

A bozon-esetben a ϕ_a, ϕ_b stb. egyrészecske-állapotok némelyike többször is előfordulhat a részecskék kiosztásában; ilyenkor a végeredmény alakja kevéssé áttekinthető. Fermionokra az eredmény egyszerű: N részecskét N különböző egyrészecske-állapotban lehet elhelyezni; a különböző kiosztások antiszimmetrikus kombinációja a nevezetes *Slater-determináns*:⁶

$$\Psi(1, 2, 3, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_a(1) & \phi_b(1) & \phi_c(1) & \dots & | \\ \phi_a(2) & \phi_b(2) & \phi_c(2) & \dots & | \\ \phi_a(3) & \phi_b(3) & \phi_c(3) & & | \\ \vdots & & & \ddots & | \end{vmatrix} \quad (15.20)$$

A determinánsnak van egy jól ismert tulajdonsága: ha két oszlopa megegyezik, a determináns eltűnik. Itt ez azt jelentené, hogy két fermiont próbáltunk ugyanabba az egyrészecske-állapotba elhelyezni. Ilyenkor a Slater-determináns érzékeny riasztóként jelzi, hogy ezt nem tehetjük:

⁶ A Slater-determinánst kiterjedten használják kvantummechanikai számításokban. Jegyezzük meg azonban, hogy egy adott egyrészecske – Hamilton-operátor végtelen sok sajátfüggvényéből sokféleképpen lehet N darabot kiválasztani N részecske elhelyezésére. Ezeknek a különböző determinánsoknak – kvantumkémiailag nyelven: különböző *konfigurációknak* – minden lineáris kombinációja is helyesen antiszimmetrizált hullámfüggvény

*minden egyes egyrészecske-állapot csak 0 vagy 1 fermionnal tölthető be.*⁷

Ez a jól ismert elemi megfogalmazása a *Pauli-elvnek*. Most látjuk, hogy ez csak akkor igaz, ha egyáltalán léteznek egyrészecske-állapotok. Ebben igazán csak a kölcsönhatás nélküli rendszerek idealizált modelljeinél lehetünk biztosak.

Van azonban egy roppant fontos kivétel. Ha a gáz nem ideális, de a részecskéi közötti kölcsönhatás *hosszú távú erő*, pl. Coulomb-erő, akkor sikerrel alkalmazhatjuk a bevezetőben már említett *átlagtérközelítés* valamelyik változatát.

Ez azt jelenti, hogy egy adott részecske helyén sok másik részecskétől eredő hatás adódik össze, amely kevésbé érzékeny arra, hogy az egyetlen adott részecske éppen hol van és merre megy. Ezért ezt az eredőt *külső* térnek tekinthetjük, és beírhatjuk a (15.19) egyenletbe. Ezzel megoldjuk, megkapjuk az egyrészecske-sajátfüggvényeket, behelyettesítjük a Slater-determinánsba, és újraszámoljuk a részecskerendszer által létrehozott átlagos Coulomb-potenciált.

Ezt addig iteráljuk, amíg be nem konvergál. Akkor azt mondjuk, hogy megkaptuk az *önkonzisztens mezőt* (angolul: Self-Consistent Field, rövidítve: SCF), más néven: *átlagteret* (angolul: mean field).

Az átlagtérközelítésnek számos változata van. Amikor éppen egyetlen Slater-determináns alakjában tartjuk a hullámfüggvényt és azt igazítjuk az önkonzisztens átlagtér követelményéhez, azt hívják *Hartree–Fock módszernek*. Ilyenkor iteráció helyett sokszor variációs módszerrel keressük meg a legjobb Slater-determináns alakú közelítést.

Az átlagtérközelítések sokszor a döntő okát mutatják meg egy-egy bonyolult fizikai jelenségnek, emiatt a nagyon sok részecskés, magasan gerjesztett rendszerekkel foglalkozó statisztikus fizikában is gyakran használják, pl. fázisátalakulások durva leírására, ahol a lényeg az, hogy a rendezett fázist a saját maga által keltett átlagtér stabilizálja. A közelítés azonban elhanyagolja a finomabb korrelációkat: azt, hogy az egy adott részecskére ható erő egy kicsit mégis függ annak az adott részecskének a mozgásától.

Ilyen korrelációk figyelembevételére is számos módszer született, statisztikus fizikától kvantumkémiáig és tovább.

⁷ A determinánst az 1 fermionnal betöltött egyrészecske-állapotok alkotják; a 0 betöltésűek kimaradnak belőle. Jegyezzük meg: az egyrészecske-állapot koordinátától és spintől függ. Ha az anyag nem mágneses, ez a kettő egymástól független, ilyenkor egy „pálya” kétféle spinnel tölthető be.

15.5. Atomok és a periódusos rendszer

Az eddigiek alapján már gyorsan eljuthatunk a kvantummechanika egyik korai legendás sikerének, az elemek periódusos rendszere magyarázatának megértéséig. Ehhez célszerű még egyet egyszerűsíteni a megcélzott közelítésen: a többelektron-hullámfüggvény Slater-determináns alakja helyett, amely biztosítaná a Pauli-elvnek megfelelő szimmetriatulajdonságokat, használjunk egyszerű szorzat alakú hullámfüggvényeket: semleges atomra

$$\Psi = \prod_1^Z u_j(\vec{r}_j), \quad (15.21)$$

ahol Z az atom rendszáma. A Pauli-elv érvényesüléséről külön kell gondoskodnunk azáltal, hogy az u_j egyrészecske-hullámfüggvénnyel jellemzett elektronpályát legfeljebb kétszeresen (a spinvetület két beállításának megfelelően) engedjük betölteni. A számolás kezdetén határozzuk el az atom *konfigurációját*, amely itt azt jelenti, hogy melyik egyelektron-állapot hányszorosan van betöltve.

Induljunk ki a betöltött $u_j(\vec{r})$ hullámfüggvények valamilyen durva közelítő alakjából, válasszunk közülük egyet, és fokozatosan finomítsuk a közelítést. Evégett oldjuk meg a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \bar{V}_j(r) \right] u_j(\vec{r}) = \varepsilon_j u_j(\vec{r}) \quad (15.22)$$

egyrészecske-Schrödinger-egyenletet, amelyben a potenciális energiába az atommag vonzása mellé belevettük a *többi* elektronok töltésfelhőjétől eredő elektromos mezőt:

$$V_j(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + e^2 \sum_{k \neq j} \int |u_k(\vec{r}')|^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r'; \quad (15.23)$$

a $\bar{V}_j(r)$ centrális potenciál ennek a kifejezésnek szögek szerinti átlaga. Ezzel megoldva a (15.22) egyenletet, javított közelítést kapunk az $u_j(\vec{r})$ egyrészecske-hullámfüggvényre. Vegyük sorra a következőt, majd az összes betöltött pályákat, és ezt iteráljuk körbe-körbe, amíg nem konvergál, közben az éppen megjavított hullámfüggvénnyel mindig felfrissítve a centrális potenciált. Amit kapunk, az egyfajta átlagtérközelítés, hiszen nem veszünk figyelembe egyedi korrelációkat az elektronok helyvektorai között.

Ez a Hartree módszer (1928); ez volt a kvantumelmélet első nagykiterjedésű numerikus kutatása, amelyhez még tekerős számológépeket használtak, és ezzel kezdődött a numerikus kvantumkémia térhódítása.

Mivel a $\bar{V}(r)$ átlagpotenciált mindig radiális szimmetriájúvá átlagoljuk vissza, a kapott egyrészeske-állapotokat beszámozhatjuk egy n, l kvantumszám-párral; az l szám helyett a hagyományos s, p, d, f, \dots betűjelet használjuk. Egy konfigurációban azt is jelöljük egy kitevővel, hogy melyikük hányszorosan van betöltve, pl. $2p^3$ azt jelenti, hogy $n = 2, l = 1$ állapotok ($2 \times (2 + 1) = 6$ darab van belőlük) összesen 3 elektronnal vannak betöltve.

Hogyan magyarázza a Hartree-közelítés az atomok kémiai tulajdonságainak rendszámfüggését, amelyeknek feltűnő tulajdonságait az elemek periódusos rendszere olyan látványosan foglalja rendszerbe? A megértés kulcsa az, hogy az egyes elektron számára a többi elektron negatív töltésfelhője *leárnyékolja* a mag pozitív töltését: ha az elektron a mag közvetlen közelébe kerül, ott $Z|e|$ töltéssel találja magát szembe, de ha a magtól távol, a leárnyékoló felhőn kívül van, ott már Z -szer kisebb, csupán $|e|$ töltés vonzását érzi.

Közel vagy messze jár az elektron a magtól? Ez leginkább az l mellékquantumszámtól függ: nagy l -re az $l(l+1)$ -gyel arányos centrifugális potenciál az elektront a magtól távolabbra pörgeti.⁸ Emiatt a nagyobb mellékquantumszámú egyrészeske-állapotok kiszorulnak az erősebben leárnyékoló helyekre, aminek gyengébb kötés, *magasabb energiasajátérték* a következménye. Ezzel megszűnik a hidrogénatom energiaszintjeinek l szerinti elfajulása: adott n főkvantumszámra az energiasajátértékek $l = 0$ -tól $l = n - 1$ -ig növekvő sorozatot alkotnak.⁹

A Hartree-közelítésre alkalmazott Pauli-elv szerint az atom alapállapotában az egy-elektronszintek a növekvő energia sorrendjében töltődnek be. Ez a sorrend a konkrét számítások szerint így kezdődik:

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, \dots \quad (15.24)$$

Vegyük szemügyre ezt a sorozatot: az erős leárnyékolás miatt gyengén kötött $3d$ állapot energiája annyira megemelkedett, hogy föléje került a $4s$ állapoténak; ugyanez történt a $4d, 4f, 5d$ stb. nagy impulzusmomentumú állapotokkal.

⁸ Matematikailag ez abban nyilvánul meg, hogy a (10.12) radiális hullámfüggvény $r = 0$ körül r^l hatvánnyal indul.

⁹ $l = 0$ -ra nincs centrifugális potenciál: az s -állapot elektronsűrűsége véges az atommag helyén. Ez az elektronspin és a magspin közötti „kontakt kölcsönhatást” eredményez, ami akár a magrezonanciában, akár az elektronspin-rezonanciában markánsan megmutatkozik: a szintek eltolódásán kívül a rezonanciajel csillapításához is hozzájárul.

Most viszont figyeljünk a főkvantumszámokra! Vegyük észre, hogy akárhol vágjuk el Pauli elve szerint a sort, az odáig betöltött legmagasabb főkvantumszámú állapotok mindig s és p állapotok!

Miért fontos ez? Azért, mert az atom külső határán éppen a főkvantumszám határozza meg, hogy egy egyrészecske-állapot hullámfüggvénye mennyire nyúlik ki.¹⁰ Emiatt azt találtuk, hogy az atom elektronhéjának legkülsőjén mindig s - és p -elektronok találhatók.

Ami kívül van, az vesz részt a kémiai kötésben, az alakítja a kémiai tulajdonságokat. Számoljuk össze: 2 különböző elem atomja létezhet $n = 1$ -es külső héjjal (H és He), $2+6=8$ elem $n = 2$ -essel, megint 8 elem $n = 3$ -assal, és így tovább. Színük, szaguk, ízük az s és p pályák fokozatos betöltődésével változik, hogy azután magasabb főkvantumszámnál újra kezdje: íme, Mengyelejev periódusai.

A belül, védetten meghúzódozó d és f állapotok, ha a kémiai kötés erejéhez kevéssé járulnak is hozzá, az anyagok finomabb (optikai, mágneses stb.) tulajdonságaiban lényeges szerephez jutnak.

15.6. Viriáltétel

Ha szeretnénk megérteni az egyes atomnál bonyolultabb összefonódott kvantumrendszerek tulajdonságait is, nélkülözhetetlen szolgálatot tesz néhány általános eredmény, amelyek általánosságuk ellenére sem semmitmondóak. Ezek közé tartozik a címben említett viriáltétel is. Neve a térben korlátos – más szóval: kötött – mozgások egy mélyértelmű tulajdonságát jelenti, amit klasszikus mechanikai alakjában Clausius fedezett fel még a 19. században, de a kvantummechanikában is hasznosnak bizonyult, különösen a kémiai kötés jobb megértéséhez segít hozzá. Annak jelzésképpen, hogy az alábbi eredmények klasszikus rendszerekre is közvetlenül igazak, ebben a pontban az operátorokat nem jelöljük meg kalappal.

Az Ehrenfest-tétel (7.3. pont) felhasználásával számítsuk ki ezt az időderiváltat:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left\langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{p}_i \right\rangle &= \left\langle \sum_i \frac{\vec{p}_i}{m_i} \cdot \vec{p}_i \right\rangle + \left\langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \right\rangle \\ &= 2 \langle \mathbf{T} \rangle + \left\langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \right\rangle. \end{aligned} \quad (15.25)$$

¹⁰ Ehhez megint a (10.12) radiális hullámfüggvényre kell ránéznünk: nagyobb n -re az exponenciális lassabban csökken, a polinom maximális kitevője is nagyobb, tehát a függvény messzebbre tolódik ki az origótól.

A jobboldal első tagjában \mathbf{T} a kinetikus energia szokásos jelölése; az utolsó tagot nevezte el Clausius „virialnak”, ami a latin „vis” (erő) szóból származik. Az átlagok itt kvantummechanikai átlagolást jelentenek.

Eddig minden azonos átalakítás volt. Most használjuk ki, hogy térben – és impulzustérben is – korlátozott a mozgás¹¹. E célból szorítkozunk stacionárius állapotokra, és átlagoljuk ki az egyenlet mindkét oldalát egy hosszú t időre. Stacionárius állapotban vett kvantummechanikai átlagon az időátlag semmit sem változtat, a baloldaltól viszont ez lesz:

$$\frac{1}{t} \int_0^t \frac{d}{dt'} \left\langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{p}_i \right\rangle = \frac{1}{t} \left(\left\langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{p}_i \right\rangle_t - \left\langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{p}_i \right\rangle_0 \right) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0, \quad (15.26)$$

azért, mert a zárójelbeli különbség a kötött mozgás miatt korlátos. Ekkor viszont csak a (15.25) egyenlet jobboldali tagjai maradnak:

$$2 \langle \mathbf{T} \rangle = - \left\langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \right\rangle. \quad (15.27)$$

Ez a Clausius-féle viriáltétel kvantummechanikai alakja. Érdekességét az adja, hogy a távolságoktól $1/r$ alakban függő párpotenciálokra egyszerűen ki lehet számítani az egyenlet jobboldalát.¹² Márpedig Coulomb-potenciálok tartják össze a legbonyolultabb atomokat és molekulákat is, így a viriáltétel mindegyikükre igaz.

Az eredmény pedig így adódik: legyen $\vec{r}_{ij} := \vec{r}_i - \vec{r}_j$, és származzanak az \vec{F}_i erők ebből a Coulomb-potenciálból:

$$V = \sum_{\langle ij \rangle} \frac{q_{ij}}{r_{ij}}, \quad (15.28)$$

¹¹ A tömegközéppont szabad mozgására az eredmények nem vonatkoznak, de az egymáshoz kötött részecskék rendszerének – pl. egy atomnak vagy molekulának – belső mozgásaira igen. Hogy mit jelent a belső mozgás, arról lásd a 15.2. pontot.

¹² *Gyakorlat:* mutassuk meg, hogy nem csak $1/r$, hanem bármilyen hatványfüggvény esetén is kapható zárt eredmény!

ahol $\langle ij \rangle$ azt jelenti, hogy minden különböző párra összegezni kell. Az összeg minden tagja két taggal járul hozzá a viriálhoz, ezek:

$$\begin{aligned} & \vec{r}_i \cdot \left(-\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \frac{q_{ij}}{r_{ij}} \right) + \vec{r}_j \cdot \left(-\frac{\partial}{\partial \vec{r}_j} \frac{q_{ij}}{r_{ij}} \right) \\ &= \frac{q_{ij}}{r_{ij}^2} \left(\vec{r}_i \cdot \frac{\partial r_{ij}}{\partial \vec{r}_i} + \vec{r}_j \cdot \frac{\partial r_{ij}}{\partial \vec{r}_j} \right) = \frac{q_{ij}}{r_{ij}^2} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \\ &= \frac{q_{ij}}{r_{ij}}, \end{aligned} \quad (15.29)$$

vagyis Coulomb-erőkre¹³ a viriál egyszerűen megegyezik a potenciális energia átlagával. Ezért a (15.27) összefüggés végső alakja atomokra, molekulákra, szilárd testekre és minden olyan anyagra, amit csak Coulomb-erők tartanak össze:

$$\langle \mathbf{V} \rangle = -2 \langle \mathbf{T} \rangle, \quad (15.30)$$

vagy – stacionárius állapotokról lévén szó –

$$E = \langle \mathbf{T} \rangle + \langle \mathbf{V} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \mathbf{V} \rangle. \quad (15.31)$$

Mit árulnak el ezek a formulák a Coulomb-erők által létrehozott kötés természetéről? Azt, hogy a kötést – az energia lecsökkenését – a vonzó Coulomb-potenciál létesíti, de annak éppen a felét be kell fizetni a kinetikus energia növekedésében, mint afféle „lokalizációs adót”.

Ez ellentmond annak az elterjedt álkvantumos magyarázatnak, amely szerint a kémiai kötést a hosszabb kötőpályákra szétfolyó elektronok kinetikus energiájának csökkenése okozná! Az igazság ennek éppen a fordítottja: bár a kötőpályák *keresztirányban* befűződnek és ez a kinetikus energia növekedésével jár, ezáltal olyan helyre lokalizálódnak, ahol mindkét atom magjának vonzó potenciálja hat rájuk, ami kétszeresen megtéríti a befektetést a potenciális energia csökkenése által.

15.7. Adiabaticus közelítés, Hellmann–Feynman tétel

A molekulák és kristályok kötésének és rezgéseinek részletesebb magyarázatához a kulcs az az észrevétel, hogy az atommagok nehezek és lassan mozognak, az elektronok könnyűek és gyorsak.

Ennek matematikai kifejezését a kvantummechanika valószínűségi jellegét felismerő Max Born és a később „az atombomba atyjaként” ismertté vált J. Robert Oppenheimer 1927-es cikke tartalmazza. Az eljárás két részből áll:

¹³ És persze a klasszikus esetben gravitációs erők: pl. a Naprendszerre is.

1. oldjuk meg az elektronrendszer időtől független Schrödinger-egyenletét valamilyen \vec{R} helyen rögzített atommagokkal, és olvassuk le az elektronok energiasajátértékét \vec{R} függvényében;
2. oldjuk meg a magok mozgásának Schrödinger-egyenletét, amelyben az előző lépésben kapott elektron-energia a magok potenciális energiájaként jelenik meg, hozzáadódva a magok Coulomb-kölcsönhatásához.

A következő formulákban nem írjuk ki a spinváltozókat. Jelentse \vec{r} az elektronrendszer koordinátáit (N elektronra ez egy 3N-dimenziós konfigurációs tér vektora), \vec{R} pedig a magok koordinátáit. Használva a direktszorzatbázis $|\vec{r}\rangle \otimes |\vec{R}\rangle =: |\vec{r}, \vec{R}\rangle$ jelölését, a molekula vagy kristály $|\Psi\rangle$ állapotvektorának koordináta-reprezentációjában egy $\langle \vec{r}, \vec{R} | \Psi \rangle = \Psi(\vec{r}, \vec{R})$ hullámfüggvény felel meg. Erre vonatkozik a Born-Oppenheimer közelítés:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) \approx \chi^{(\vec{R})}(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{R}), \quad (15.32)$$

ahol $\chi^{(\vec{R})}(\vec{r})$ a közelítő elektronállapot, \vec{R} helyen rögzített atommagokkal kiszámolva, $\psi(\vec{R})$ pedig a magok közelítő állapota olyan potenciálban, amely már az elektronrendszer energiáját is tartalmazza.

A két utóbbi függvényt az elektron-mag rendszer Hamilton-operátora határozza meg:

$$\hat{H} = \hat{H}_{el}^{(\vec{R})} + \hat{H}_{mag}, \quad (15.33)$$

ahol

$$\hat{H}_{el}^{(\vec{R})} = \hat{T}_{el} + \hat{V}(\vec{r}, \vec{R}) \quad (15.34)$$

az elektronrendszer energiája \vec{R} helyen rögzített atommagok esetén,

$$\hat{H}_{mag} = \hat{T}_{mag} + \hat{V}_{mag}(\vec{R}) \quad (15.35)$$

pedig a magok kinetikus energiájának és egymás közötti Coulomb-taszításból eredő potenciális energiájának összege.

Mivel a nagyon lassan mozgó atommagokról feltételezzük, hogy nem gesztenenek átmeneteket különböző elektronállapotok között, a (15.32) közelítő szorzat első tényezőjét energiasajátállapotnak tekintjük, amelynek azonban mind a hullámfüggvénye, mind az energiasajátértéke függ egy lassan változó paramétertől: a magok \vec{R} helyétől. Ez a tartalma az „adiabatikus közelítés” kifejezésnek.¹⁴ A j -edik közelítő elektronállapotot tehát a

$$\hat{H}_{el}^{(\vec{R})} \chi_j^{(\vec{R})}(\vec{r}) = U_j(\vec{R}) \chi_j^{(\vec{R})}(\vec{r}) \quad (15.36)$$

¹⁴ A kifejezés egy álmos félrehallásból született. Paul Ehrenfest egy konferencián félálomból felriadva mondta: „Ez olyan, mint a termodinamikában az adiabaticus folyamat”. A helyes kifejezés „kvázisztatikus folyamat” lett volna, de a termodinamikában „adiabatikus” és „kvázisztatikus” gyakran együtt jár, így keveredhetek össze álom és ébrenlét határán.

időtől független Schrödinger-egyenlet határozza meg. A belőle leolvasható

$$U_j(\vec{R}) = \int \chi_j^{(\vec{R})*}(\vec{r}) \hat{H}_{el}^{(\vec{R})} \chi_j^{(\vec{R})}(\vec{r}) d^{3N}r = \langle j, \vec{R} | \hat{H}_{el}^{(\vec{R})} | j, \vec{R} \rangle \quad (15.37)$$

elektronenergia-sajátérték az, amely viszont megjelenik a magok mozgásában, mint járulékos az effektív potenciális energiához: adiabaticus közelítésben a magok mozgását a

$$\hat{H}_{j,mag}^{(ad)} = \hat{T}_{mag} + \hat{V}_{mag}(\vec{R}) + U_j(\vec{R}) \quad (15.38)$$

effektív Hamilton-operátor határozza meg.

A $\hat{V}_{mag}(\vec{R}) + U_j(\vec{R})$ összeg az a potenciál, amelynek minimumai a kémiailag kötött állapotokat jelentik. Az ilyen minimumok körül alakulnak ki a molekulák és kristályok rezgései, amelyek alacsony gerjesztettségi szintek esetén harmonikus rezgésnek tekinthetők, magasabb gerjesztésre anharmonikus korrekciókkal kell számolni. Még magasabb gerjesztéskor a molekula felbomlásához vagy átrendeződéséhez: kémiai reakcióhoz érkezhünk el.

A Born–Oppenheimer közelítés az elektron-mag rendszer teljes Schrödinger-egyenletéből formálisan úgy kapható meg, mint az elektron-mag tömegarányból származtatott $(m_e/M_{mag})^{1/4}$ kis paraméter hatványai szerint haladó sorfejtés vezető tagja. Tudni kell, hogy a közelítés olyankor romlik el, amikor az elektronok is lassan mozognak, ez pedig az érintett elektron-energiaszintek *különbségén* múlik: ahol \vec{R} függvényében egy $U_i(\vec{R})$ és egy $U_j(\vec{R})$ szint keresztezi egymást, ott van a lassú elektronmozgás; ott keverednek pl. egy molekula elektronikus és rezgési gerjesztései. Az ilyen kevert („hibridizált”) gerjesztési módust hívják *polaritonnak*.

Az effektív potenciális energia \vec{R} szerinti negatív gradiense a magokra az elektronrendszer részéről ható *erő*. Erre van egy megejtően egyszerű állítás, amely matematikailag azon a kettősségen alapul, hogy az effektív potenciál egyszerre sajátérték is (lásd a (15.36) egyenletet), átlagérték is (lásd a (15.37) egyenletet):

$$\begin{aligned} \vec{F}_{mag} &= -\frac{\partial}{\partial \vec{R}} U_j(\vec{R}) = -\frac{\partial}{\partial \vec{R}} \langle j, \vec{R} | \hat{H}_{el}^{(\vec{R})} | j, \vec{R} \rangle \\ &= -\langle j, \vec{R} | \frac{\partial \hat{H}_{el}^{(\vec{R})}}{\partial \vec{R}} | j, \vec{R} \rangle - U_j(\vec{R}) \frac{\partial}{\partial \vec{R}} \langle j, \vec{R} | j, \vec{R} \rangle. \end{aligned} \quad (15.39)$$

A második tag a normálás miatt eltűnik, az első tagba viszont a (15.34) Hamilton-operátorból csak a potenciális energia ad járulékosot. A végeredmény:

$$\vec{F}_{mag} = \langle j, \vec{R} | -\frac{\partial V(\vec{r}, \vec{R})}{\partial \vec{R}} | j, \vec{R} \rangle, \quad (15.40)$$

vagyis az elektronenergia részéről a magokra ható erőbe semmi más nem ad járulékot, mint az elektronfelhőnek a magokra gyakorolt Coulomb-vonzása; a kémiai kötéshez az kell, hogy az elektronok besűrűsödjenek a magok közé, és vonzó hatásukkal kompenzálják a pozitív magok közötti taszító erőt. Ezt az egyszerű és fontos eredményt nevezik *Hellmann–Feynman tételnek*.¹⁵

Az adiabatikus közelítésnek van még egy kísérteties tulajdonsága. Számoljuk ki a magok impulzus-operátorának az elektronfelhőre átlagolt hatását, kiindulva a (15.32) faktorizált hullámfüggvényből: hasonlóan a (15.37) egyenlethez,

$$\begin{aligned} \int d^{3N}r \chi_j^{(\vec{R})*}(\vec{r}) \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \right) \chi_j^{(\vec{R})}(\vec{r}) \Psi(\vec{R}) &= \langle j, \vec{R} | \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \right) | j, \vec{R} \rangle \Psi(\vec{R}) \\ &= \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{R}} + \vec{\mathcal{A}} \right) \Psi(\vec{R}), \end{aligned} \quad (15.41)$$

ahol

$$\vec{\mathcal{A}} = \frac{\hbar}{i} \langle j, \vec{R} | \vec{\nabla}_{\vec{R}} | j, \vec{R} \rangle \quad (15.42)$$

teljesen úgy viselkedik, mint egy mágneses vektorpotenciál, annak minden hatásával, beleértve az Aharonov–Bohm-szerű fáziseltolásokat, amelyek többek között molekulák rezgési spektrumaiban okoznak meglepő kiválasztási szabályokat.

Ez a *Berry-fázisok* [16, 17, 18] egyik megjelenési formája. Ebben a jelenségkörben azt csodálhatjuk meg, hogy az adiabatikusan lassú mozgások, bár gerjesztést nem okoznak, jól kiszámítható és mérhető fáziseltolásokban ott hagyják az ujjlenyomatukat a kvantumjelenségeken.

15.8. A kémiai kötés

Az előző három pont előkészítésül szolgált annak az élménynek befogadására, amit a 20. század első harmadának fizikusai és kémikusai éltek át, amint a kvantummechanika mélyen bevilágított a molekulák tulajdonságainak hátterébe.

A kvantummechanika korai, látványos sikere volt a kovalens kémiai kötés értelmezése. Hogy egy elektront könnyen leadó atom, mint a nátrium, és egy elektront könnyen felvevő atom, mint a klór, találkozáskor ellentétes töltésű ionokká válnak és ettől vonzzák egymást, abban addig sem volt túl sok

¹⁵ A levezetésből látszik, hogy a matematikai trükk nem csak az erő, hanem bármilyen paraméter szerinti derivált átlagolására is használható.

rejtély. Hanem hogy két hidrogénatomból hogyan lesz egy erősen kötött H_2 molekula, arra a kvantummechanika előtt elképzelésük sem volt a kutatóknak. Heitler és London 1927-es munkája hónapokkal a Schrödinger-egyenlet publikálása után talált egy közelítő megoldást, amely már mutatta a kötés tényét: a molekula alapállapotú energiája mélyebbnek mutatkozott a két szabad atoménál.

A kémiai kötés kvalitatív képe nem sokat változott az első általános megfontolások óta. A Born–Oppenheimer adiabatikus közelítés értelmében a kötés vizsgálatánál a magokat nyugvónak tekinthetjük, és elég az energiát a magkonfiguráció függvényében vizsgálni; ha van minimuma, annak mélysége határozza meg a kötés erejét.

Hogy mitől van kötés, azt a viriáltétel (15.6. pont) és a Hellmann–Feynman tétel (15.7. pont) világosan megmondják: attól, hogy az elektronok besűrűsödnek a magok közé, ahol

- a magok vonzó potenciálja összeadódik, így az eredő potenciális energia mélyebb lehet (virialtétel);
- egy helyről lehet két magot egymás felé vonzani (Hellmann–Feynman).

A közössé vált elektronok a kötésben elveszítik az egyes atomhoz való kötődésüket; ezt fejezi ki a hagyományos „kicserélődési kölcsönhatás” kifejezés.

A besűrűsödésnek azonban korlátai is vannak:

- a kisebb helyre szorulás a kinetikus energia növekedésével jár,
- a Pauli-elv akadályozza túl sok azonos spinű elektron összegyülekezését kis helyre, emiatt a sokelektron-állapotban sokszor jól felismerhető egy-egy „molekulapályán” ellentétes spinű elektronokból álló párok kialakulása, ez felel meg leginkább az elemi kémiában pálcikákkal ábrázolt kötéseknek;
- az elektronok egymás közötti Coulomb-taszítása lényegesen befolyásolja az elektronállapot szerkezetét és a létrejött kötés energiáját.

Mindezek miatt bár a kötés eredetét kvalitatíve jól lehet érteni, a pontos számítások igen nehezek. A korai modellekről hamar kiderült, hogy nagyon pontatlanok, és ismeretlen kémiai körülmények közötti előrejelzésre alig használhatók. A kvantumkémia azonban visszavonhatatlanul megszületett, fejlődése viharos volt, és a nagyteljesítményű számítógépek megjelenésével különösen felgyorsult. Mára a molekulák kötését a Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásaiból iparszerűen lehet vizsgálni; egy új vegyület szintetizálását sokszor megelőzi a kvantumkémiai becslés. A számítógépek teljesítménye és a végigszámolható molekulák mérete együtt fejlődik, mint az oroszlánok és a gazellák futása.

A molekulák tulajdonságainak kiszámítása a kvantummechanika segítségével: önálló szakma, amelynek részleteit nem egy bevezető kvantummechanikai könyvből kell megtanulni. A magyarnyelvű kvantumkémiai irodalom gazdag terméséből Kapuy és Török klasszikusát [19] ajánlom olvasóim figyelmébe.

15.9. Impulzusmomentumok összeadása

Kölcsönható részecskék általában kölcsönös forgatónyomatékok gyakorolnak egymásra, ezért külön-külön egyikük impulzusmomentuma sem marad meg, csak az összetett rendszer teljes impulzusmomentuma. Feladat: kiszámolni ennek lehetséges nagyságát és vetületeit, ha az összetevőkre ezek az adatok ismertek.

Az iskolapélda: két feles spin összetevése egy eredővé. Az egyes spinek mindegyikének állapota egy $|+\rangle$, $|-\rangle$ bázison kifejtett

$$\alpha |+\rangle + \beta |-\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (15.43)$$

spinorral adható meg. Az összetett rendszer állapota valahol a két spin bázisainak direkt szorzatán, vagyis a

$$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle \quad (15.44)$$

„nyers” bázison adható meg, ahol pl. $|-+\rangle := |-\rangle_1 \otimes |+\rangle_2$. Ezen kell meghatározni \hat{S}^2 és \hat{S}_z mátrixalakját, hogy kiszámolhassuk a közös sajátvektorok által alkotott irreducibilis bázis vektorait és a hozzájuk tartozó sajátértékeket. Fogjunk hozzá kézi erővel! A z -komponensek összeadása triviális:

$$\hat{S}_z = \hat{S}_{z1} + \hat{S}_{z2} = \hbar (\sigma_{z1} + \sigma_{z2}) = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (15.45)$$

Trükkösebb az eredő négyzetének kiszámítása:

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &= (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \hbar^2 \left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2} \sigma_1 \cdot \sigma_2 \right) \\ &\propto \hbar^2 S(S+1), \end{aligned} \quad (15.46)$$

ahol kihasználtuk, hogy $\hat{S}_1^2 = \hat{S}_2^2 = \hbar^2 \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)$, és hogy $\hat{S} = \frac{1}{2} \hbar \sigma$, ahol σ a Pauli-mátrixokból alkotott háromdimenziós vektort jelenti. Végül jeleztük,

hogy majd a kiszámolt sajátértékeket a két spin S eredőjének leolvasására kívánjuk felhasználni. A két spin egymáshoz képest többféleképpen állhat be, ezért azt várjuk, hogy S -nek többféle lehetséges értéke lesz.

A $\sigma_1 \cdot \sigma_2 = \sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z}$ kifejezést vakon ki lehet dolgozni a (15.44) nyers bázison. Az eredmény (*gyakorlat: számoljunk utána!*):

$$\hat{\sigma}_1 \cdot \sigma_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{S}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \quad (15.47)$$

Ennek az operátornak két sajátértéke van;

- $\hbar^2 S(S+1) = 0$, vagyis $S = 0$, ami a két ellentétesen irányított feles spin eredője. A semmi csak egyféleképpen tud beállni: nem csoda, hogy hozzá csak egy sajátvektor tartozik, a

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (15.48)$$

„szinglett” spinvektor (a $\sqrt{2}$ a normálást biztosítja)¹⁶, amelyre természetesen $S_z = 0$.

- $\hbar^2 S(S+1) = 2\hbar^2$, vagyis $S = 1$: itt a két feles spin azonos irányba áll. Ennek viszont háromféle beállása lehetséges, ezek alkotják a „triplettet”:

$$\left\{ \begin{array}{l} |++\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |--\rangle \end{array} \right. \quad (15.49)$$

A hozzájuk tartozó S_z sajátértékek rendre: $+1$, 0 , -1 .

Érdeemes megjegyezni, hogy „csak” egy előjelen, vagyis egy csak interferenciában érvényesülő fázistényezőn múlik, hogy egy felfele és egy lefele álló spin milyen eredőbe kombinálódik össze: a 0 hosszúságú szinglettbe, vagypedig az 1 hosszúságú, de 0 vetületű triplett-komponensbe. Klasszikus korrelációk szempontjából mindkettő ugyanazt mondja: *tökéletes antikorreláció*; ami az első részecskének fehér, az a másodiknak fekete, és viszont. A kvantummechanika oldaláról nézve azonban a szinglett és a triplett: ég és föld; másként kattannak rájuk a detektorok.

¹⁶ A magyar nyelvű szakirodalomban párhuzamosan létezik a „szinglett” és „szingulett” változat.

A szinglett-triplett kettősségnek van egy tulajdonsága, ami durván belevatkozik a körülöttünk levő, nagyrészt elektronokból építkező világba: az, hogy a szinglett antiszimmetrikus, a tripllett-komponensek pedig szimmetrikusak a két elektron felcserélésére nézve. Az elektronok azonban fermionok, emiatt a *teljes* kételektron-hullámfüggvénynek viszont, amelyben hely- és spinváltozók is szerepelnek, antiszimmetrikusnak kell lennie. Ezért a spin-szingletthez kötelezően a koordinátákban szimmetrikus hullámfüggvény tartozik, a spin-tripletthez pedig koordinátákban antiszimmetrikus hullámfüggvény. Ezek energiája lényegesen különbözhet; ezt a különbséget hívják *kicserélési kölcsönhatásnak*. Ezen a *nem* mágneses alapon, hanem Coulomb-erő és kinetikus energia alapján működő kapcsoló-szerepen keresztül vezérlik a spinek a kémiai kötések létrejöttét, közvetve az élet kialakulását is. Visszahatásként, ugyanilyen nem-mágneses kicserélési erők hozzák létre a ferromágneses anyagok mágneses rendeződését is, amire Heisenberg jött rá.

A feles spinek eddig látott, fáradságos kézierővel való összeadásánál a csoportelmélet elegánsabb utat kínál, amelyet bonyolultabb esetekben jóval könnyebb végigjárni, csak a módszert kell megtanulni hozzá.

Adjunk össze két impulzusmomentumot, amelyek nagysága J_1 , ill. J_2 , vetületük $M_1 \in [-J_1, +J_1]$, ill. $M_2 \in [-J_2, +J_2]$; a megfelelő „nyers bázist” a

$$|J_1 J_2 M_1 M_2\rangle := |J_1 M_1\rangle \otimes |J_2 M_2\rangle \quad (15.50)$$

direktszorzat-vektorok alkotják.

Ezekből szuperponálódnak az eredő impulzusmomentum sajátvektorai, amelyek között minden lehetséges $J \in [|J_1 - J_2|, J_1 + J_2]$ hosszúság és $M \in [-J, +J]$ vetület előfordul. Egy adott $|J, M\rangle$ sajátvektor így tevődik össze ezekből az összetevő vektorokból:

$$|J, M\rangle = \sum_{M_1, M_2} C_{JM}^{J_1 J_2 M_1 M_2} |J_1 J_2 M_1 M_2\rangle; \quad M = M_1 + M_2. \quad (15.51)$$

Az összeg $C_{JM}^{J_1 J_2 M_1 M_2}$ együtthatói a nevezetes *Clebsch–Gordan együtthatók*. Itt annyit jegyünk meg róluk, hogy szemben a szinglett-triplett sajátvektorok megtalálásánál követett elemi eljárással, ezeket az együtthatókat a forgáscsoport tulajdonságai teljesen meghatározzák. Az ilyen típusú csoportelméleti módszerek kidolgozásában meghatározó szerepe volt Wigner Jenőnek.

Többelektronos atomokban az elektronok pályaimpulzusmomentumainak és spinjeinek összeadása bonyolult játékszabályokat követ, amelyek fordulatait a Zeeman-effektus teszi áttekinthetőbbé. Hol az egyes elektronok tel-

jes impulzusmomentuma, hol a sok elektron eredő pályaimpulzusmomentuma és eredő spinje bizonyul erősebb egységnek a mindent szétszedni vágyó mágneses mezővel szemben. A színképek durva szerkezetét az erős Coulomb-kölcsönhatás alakítja ki; erre rakódik rá a 11.1. pontban említett spin-pálya kölcsönhatástól eredő „finomszerkezet”. Nagy felbontású spektroszkópiában az atommag spinjének és töltéseloszlásának perturbáló hatásából eredő „hiperfinom szerkezet” is megjelenik. Ugyanennek a „hiperfinom kölcsönhatásnak” túlsó oldala az elektronok visszahatása a mágneses magrezonanciára, amely emiatt a kémiai analízis egyik legérzékenyebb módszere, és fontos képalkotó orvosi diagnosztikai eszköz is épül rá. Végül a 13.3.2. alpontban említett, mikrohullámú spektroszkópiával mérhető Lamb-féle vonaleltolódás az elektromosan töltött anyag és a sugárzás kölcsönhatásáról hoz nélkülözhetetlen információt.

15.10. Einstein–Podolsky–Rosen paradoxon, Bell-egyenlőtlenség

Már a fejezet elején szóba került, hogy az összefonódás legrejtélyesebb vonása, hogy a kölcsönhatás megszűnésével, a részecskék sok kilométeres eltávolodásával sem szűnik meg.

A téma történelmi előzménye Einsteinnek egy 1929-es konferencián tett megjegyzése: jó, hogy egy részecskét csak egy helyen lehet detektálni, de honnan tudja meg a többi detektor, hogy egy már megszólalt? A kérdésre adható mai válasz: a részecske összefonódik a detektorok rendszerével, ezáltal a detektorok egymással is. Mindazonáltal a jelenséget nem könnyű megemészteni.

A kérdéskör igazán Einstein–Podolsky–Rosen (EPR) 1935-ös cikkével [21] került be a köztudatba. Ez a cikk hívta fel a figyelmet a távoli összefonódás rejtélyes voltára. Ezt a tulajdonságot azóta is a kvantummechanikai rendszerek *Einstein-féle nonszeparabilitásának* (szétválaszthatatlanságának) nevezzük. Lényege: a kétrészecske-állapot a szétválás után is megmarad, és nem lehet két független részecskének tekinteni. Egy kétfoton-forrásból *kétfoton* jön ki, nem *két foton*; az ikerként született részecskék sohasem válnak függetlenné.

Az 1935-ös EPR-cikk álláspontja ezzel még ellentétes: arra koncentrálnak, hogy ha ezt *nem* fogadják el, hanem a szétrepülő két részecskét két független rendszernek tekintik, akkor ellentmondásra jutnak a kvantummechanika valószínűségi jellegével, amit úgy fogalmazznak, hogy „a kvantummechanika nem lehet teljes.”

Három évtizeddel később azonban megindult a kérdéskör pozitív hozzáállású, intenzív elméleti, majd kísérleti kutatása, amely mindenben a kvantummechanika igazát támasztotta alá. A gondolkodást Bohm példája indította el, amely az eredeti EPR gondolat kísérleteknél sokkal valószínűbbnek hangzott: egy szinglett spin-állapotú részecskepárt kell szétrepíteni, akkor a két részecske spinvetületét megmérve (Stern–Gerlach) *tökéletes antikorrrelációt* találunk:

ha \uparrow_1 akkor \downarrow_2 ,

ha \downarrow_1 akkor \uparrow_2 .

A későbbi valóságos kísérletek nem igazi feles spinű részecskékkel történtek, hanem polarizált fotonpárokkal, amelyekből ugyanúgy, sőt könnyebben lehet polarizáció-szinglett párokat előállítani. Velük csak az a baj, hogy a fotondetektorok nem annyira megbízhatóak, de a kísérletek töretlenül mennek előre.

Tekintsük át bevezetésül kicsit részletesebben az EPR-cikkben megfogalmazott követelményeket, a spinek nyelvén elmondva:

1. *tökéletes antikorrreláció*;
2. *lokalitás*: a szétrepülés után van két rendszerünk kölcsönhatás nélkül (*kvantummechanika: nincs!*); a második rendszer állapotát nem befolyásolhatja, hogy az elsőn mit mérünk (*kvantummechanika: nincs első és második!*);
3. *valóság*: „a második spinvetület” értékét az első mérése után a rendszer megzavarása nélkül biztosan tudjuk, ez tehát egy „elem a fizikai valóságnak”, ami a kvantummechanikában nincs benne;
4. *teljesség*: a kvantummechanika nem teljes, mert a fizikai valóság egy elemét nem tartalmazza.

A ma legelterjedtebb álláspont szerint ebben a kritikus feltevés a *lokalitás*: a kvantummechanika teljes, de csak a kétrészecske-állapotok valóságosak, amelyek (itt) egy részecske spinvetületét mérve meghatározhatók, a második mérés ezt csak ellenőrizheti.

Ez *nemlokális* kapcsolatot jelent a kétrészecske-állapot két detektornál való megjelenései között. Ez a nemlokális azonban nem sérti a relativitás elvét, mert jeladásra nem használható („no-signalling”), ugyanis egy detektor jelén nem látszik, mit csináltunk vagy mit láttunk a másikon: ez „békés egymás mellett élés a kvantummechanika és a speciális relativitás között” (Shimony 1984).¹⁷

¹⁷ Fiatalabb olvasóim már nem nagyon tudják, mit jelent ez a kifejezés, de amikor Shimony mondta, akkor még ismert volt: a Szovjetunió és az USA finom kiegyensúlyozottság-

Wiseman [22] élesebben fogalmaz: előbb vagy utóbb le kell nyelnünk, hogy a kvantummechanika nemlokális.

A rejtett paraméterek problémája

Az igazi fellendülést John Bell 1964-es munkája [23] indította el. Ő az összefonódásnak egy speciális, a kvantummechanika korai éveiben népszerű kvalitatív magyarázatát vette célba, amely így szólt: a kvantummechanikai mérés által produkált véletlen mögött a leírás hiányossága rejlik; léteznek olyan *rejtett paraméterek*, amelyekről a kvantummechanika nem ad számot, de ismeretükben a véletlen mérési eredmények is teljesen megjósolhatók lennének.¹⁸

A szétrepülő részecskék távoli összefonódása esetén ez a magyarázat még finomításra szorul: ha a kép igaz, a szétrepülő részecskepár (anti-) korrelációját a szétrepülés előtt, a közös forrás helyén beléjük táplált rejtett paraméter; röviden: *lokális rejtett paraméter* idézi elő.

Bell kérdése: le lehet-e írni a tökéletes antikorrelációt egy lokális közös okkal, vagyis egy véletlen paraméterrel, amelynek egyes értékeihez \uparrow_1 és \downarrow_2 tartozik, más értékeihez \downarrow_1 és \uparrow_2 ?

A kérdésre a helyes válasz: miért ne?

Bell ennél tovább ment: rájött, hogy a tökéletes antikorreláció lebutított kérdés, a kvantummechanika ennél sokkal gazdagabb! Elég, ha a két spinvetületet *nem párhuzamos* Stern–Gerlach analizátorral (ill. a két foton polarizációját nem párhuzamos analizátorokkal) mérjük, akkor már ugyanarra a kérdésre a válasz: NEM!

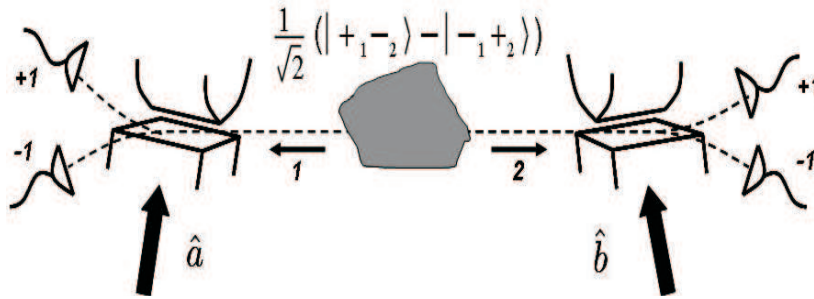
A feles spinek példájánál maradva, legyen

$$\begin{aligned}\vec{a} &= (\sin \theta_1 \cos \phi_1, \sin \theta_1 \sin \phi_1, \cos \theta_1), \\ \vec{b} &= (\sin \theta_2 \cos \phi_2, \sin \theta_2 \sin \phi_2, \cos \theta_2)\end{aligned}\tag{15.52}$$

a két Stern–Gerlach irányának egységvektora. Mindkettőhöz tartozzon egy detektorpár; a spinvetületet $\hbar/2$ egységekben mérve, mindkét oldalon az egyik detektor megszólalásához $+1$, a másikéhoz -1 mérési eredmény tartozik.

ban fenyegető, de egymást meg nem támadó együttélését jellemezte így Hruscsov szovjet pártvezér. Ő a kifejezést Csou En Laj kínai politikustól kölcsönözte.

¹⁸ Neumann János készített egy bizonyítást a rejtett paraméterek lehetetlenségéről, ez azonban csak olyan súlyos matematikai megszorításokkal volt érvényes, hogy a fizikai valóságból szinte semmire sem volt alkalmazható.



15.1. ábra. A Bell-féle kísérleti séma: a központi kétrészecske-forrásból spinszinglett állapotban szétrepülő részecskepár két tagját különböző irányú Stern–Gerlach analizátorok fogadják. A kétoldali mérések eredményét a berendezés összeszorozza és átlagolja.

Valahányszor a forrás kibocsát egy részecskepárt

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+1 -2\rangle - |-1 +2\rangle) \quad (15.53)$$

szinglett spin-állapotban, és a két oldalon egy-egy detektor megszólal, a kétoldali eredményeket szorozzuk össze: az eredmény $+1$ vagy -1 lesz.¹⁹ Egy hosszú mérésorozatra átlagoljuk ezeket az eredményeket, és próbáljuk meg elméletileg megjósolni az eredményt.

A kvantummechanikáé az első lépés joga: az átlag

$$E^\Psi(\vec{a}, \vec{b}) = \langle \Psi | (\vec{a} \cdot \vec{\sigma})_1 (\vec{b} \cdot \vec{\sigma})_2 | \Psi \rangle,$$

ahol

$$\vec{\sigma} = \left(\left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{cc} 0 & -i \\ i & 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right) \right)$$

a Pauli-mátrixokból alkotott háromdimenziós vektor, és

$$\vec{a} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos \theta_1 & \sin \theta_1 e^{-i\phi_1} \\ \sin \theta_1 e^{i\phi_1} & -\cos \theta_1 \end{pmatrix}.$$

¹⁹ Párhuzamos detektoroknál a szorzat mindig -1 lenne, a tökéletes antikorrelációnak megfelelően.

Analóg kifejezés írja le a $\vec{b} \cdot \vec{\sigma}$ szorzatot, θ_2 és ϕ_2 polárszögekkel. A keresett átlag végül ilyen alakban adódik:

$$\begin{aligned}
 E^\Psi(\vec{a}, \vec{b}) &= \frac{1}{2} (\langle +|1|+ \rangle \langle -|2|- \rangle + \langle -|1|- \rangle \langle +|2|+ \rangle \\
 &\quad - \langle +|1|- \rangle \langle -|2|+ \rangle - \langle -|1|+ \rangle \langle +|2|- \rangle) \\
 &= \frac{1}{2} (\cos \theta_1 (-\cos \theta_2) + (-\cos \theta_1) \cos \theta_2 \\
 &\quad - \sin \theta_1 e^{-i\phi_1} \sin \theta_2 e^{i\phi_2} - \sin \theta_1 e^{i\phi_1} \sin \theta_2 e^{-i\phi_2}) \\
 &= -\cos \theta_1 \cos \theta_2 - \underbrace{\cos(\phi_1 - \phi_2)}_{\cos \phi_1 \cos \phi_2 + \sin \phi_1 \sin \phi_2} \cdot \sin \theta_1 \sin \theta_2 \\
 &= -\vec{a} \cdot \vec{b}.
 \end{aligned} \tag{15.54}$$

Most értünk el a híres *Bell-féle egyenlőtlenségek* bevezetéséhez. Bell célja az volt, hogy olyan kísérletsorozatot találjon, amelyben a kvantummechanikai eredményt nem lehet reprodukálni *lokális rejtett paraméteres* modellel. Itt a kulcsszó a *lokális*: ez azt jelenti, hogy még a kétrészecske-forrásban, ahol a részecskék együtt vannak, eldőlne, hogy a detektorok adott beállítása mellett melyik oldalon mi lesz az eredmény.

Ha a világ nem így működik, az „kísérteties távolhatás” (Einstein: spukhafte Fernwirkung, angolul „spooky action-at-a-distance”), de a kísérletek éppen ezt látszanak igazolni – bizonyos kibúvókkal (*loophole*: ahol a vad kibújjik a hurokból).

Az alábbiakban nem az eredeti Bell-féle változatot, hanem a Clauser–Horne–Shimony–Holt (CHSH) csapat változatát ismerjük meg, amelynek az az előnye, hogy rossz detektorokra is értékelhető eredményt ad. Fotonkísérleteknél kötelező ezt használni, mert a foton-detektorok a bejövő fotonoknak alig több mint a felére szólalnak meg. A kísérletek terve a következő:

Végezzünk négy mérési sorozatot, amelyekben a két analízátor irányát két-két előre elhatározott irány közül választjuk:

1-es analízátor: \vec{a} vagy \vec{a}'

2-es analízátor: \vec{b} vagy \vec{b}'

Mind a négy kombinációban a kétoldali detektorpárok közötti koincidenциákat számoljuk össze $++$, $+-$, $-+$, $--$ felbontásban, amiből egy-egy átlagot kapunk az adott analízátor-kombinációra:

$$E = \frac{N_{++} + N_{--} - N_{+-} - N_{-+}}{N_{++} + N_{--} + N_{+-} + N_{-+}}.$$

Jegyezzük meg, hogy a detektorok véges hatékonyságának torzító hatása a törtről kiesik; ez a CHSH-változat előnye az eredeti Bell-féléhez képest.

A négy átlagból értékeljük ki a következőt:

$$S = E(\vec{a}, \vec{b}) - E(\vec{a}, \vec{b}') + E(\vec{a}', \vec{b}) + E(\vec{a}', \vec{b}').$$

Amennyiben az egyes detektorpárok jelét (a választott analizátor-állások szerint egyik oldalon x_1 ill. x'_1 , másik oldalon x_2 ill. x'_2) egy λ lokális rejtett paraméter teljesen meghatározza, a fenti összeget erre való átlagolással lehet kiszámítani:

$$S = \langle x_1 x_2 - x_1 x'_2 + x'_1 x_2 + x'_1 x'_2 \rangle = \langle x_1 (x_2 - x'_2) \rangle + \langle x'_1 (x_2 + x'_2) \rangle.$$

Mivel $x_2 - x'_2$ és $x_2 + x'_2$ közül az egyik 0, a másik ± 2 , a másik faktor ± 1 , az összeg mindenképpen $+2$ és -2 között van:

$$|E(\vec{a}, \vec{b}) - E(\vec{a}, \vec{b}') + E(\vec{a}', \vec{b}) + E(\vec{a}', \vec{b}')| \leq 2.$$

A kvantummechanika az egyes E átlagokra meghatározott értékeket jósol, ezeket behelyettesítve

$$|-\vec{a} \cdot \vec{b} + \vec{a} \cdot \vec{b}' - \vec{a}' \cdot \vec{b} - \vec{a}' \cdot \vec{b}'| \leq 2.$$

Könnyű azonban találni olyan négy \vec{a} , \vec{b} , \vec{a}' , \vec{b}' irányt, akár egy síkban is, amelyek sértik az egyenlőtlenséget!²⁰ Ilyen irányokba állítva az analizátorokat, a kísérletek mindig a kvantummechanikának megfelelő és a CHSH (Bell) egyenlőtlenségeket megsértő eredményt adnak! Ez kísérleti cáfolatát jelenti a lokális rejtett paraméter feltevésének.

A kísérletek egyre jobb minőségű kétfoton-forrásokkal és detektorokkal, egyre nagyobb távolságra szétküldött fotonpárokkal máig is folytatódnak. Értelmezésükben a „kibúvót” (loophole) még a CHSH-változatban is a detektorok korlátozott hatékonysága jelenti: bár az eredmények tökéletes összhangban vannak a kvantummechanikai jóslattal, de a gyenge detektorok miatt némi ügyel-bajjal még gyárthatók olyan rejtett paraméteres modellek, amelyek reprodukálják a kísérleti adatokat. Ezek a modellek a játék izgalmán kívül ezideig semmi hasznosat nem árultak el a világ működéséről.

²⁰ *Gyakorlat:* próbálkozzunk; addig ne hagyjuk abba, amíg nem találtunk négy megfelelő irányt; ha még maradt türelmünk, próbáljuk megtalálni az egyenlőtlenséget maximálisan sértő beállításokat!

A fotonoknál jóval kisebb statisztikával, de részecskefizikai rendszereken is végeznek Bell-egyenlőtlenségeken alapuló tesztek. Fotonoknál egy izgalmas fejlemény a háromfoton-állapotok korrelációinak vizsgálata. Itt az elméleti jóslatok még markánsabbak, mint a Bell-típusú kétfotonos esetekben, de a háromfoton-források egyelőre nagyon gyenge minőségűek, így a kísérletekből nehéz megbízható következtetésekre jutni.

15.11. Környezeti kölcsönhatások, dekoherencia és komplementaritás

A mikrorendszerek, amelyekkel kvantummechanikai kísérleteket tervezünk, bármilyen gondos preparálás után előbb-utóbb kölcsönhatásba kerülnek a környezetükkel és összefonódnak vele.

Ennek legfeltűnőbb következménye az, hogy fokozatosan elvész a kisméretű mikrorendszer koherenciája: az interferenciakép elmosódik.

A kvantummechanika kezdeti napjaiban úgy mondták, hogy az interferencia attól mosódik el, ha információt szerzünk arról, hogy merre ment a részecske („út-információ”), ezzel a részecskeszerű tulajdonságokat erősítjük, a hullámszerűket gyengítjük.

Ez a két, gyökeresen különbözőnek látszó kép mára konvergálni látszik: mindegy, hogy az információ az agyunkba jutott, vagy a környezetbe szivárgott, összefonódás alakjában.

A dolog mögött van egy nagyon egyszerű matematikai mechanizmus. Nézzük 1 dimenzióban két anyaghullám interferenciáját, amelyek amplitúdója térben lassan változik, fázisuk viszont gyorsan: $u_1(x) \approx \exp(i\varphi_1(x))$, $u_2(x) \approx \exp(i\varphi_2(x))$. Egy

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(x) + u_2(x)) \quad (15.55)$$

szuperpozícióban az interferenciaképet az intenzitás rajzolja ki:

$$I(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{2} (|u_1(x)|^2 + |u_2(x)|^2 + u_1(x)u_2^*(x) + c.c.) \quad (15.56)$$

$$\approx 1 + \cos(\varphi_1(x) - \varphi_2(x)),$$

ami 0 és 2 között oszcillál a fáziskülönbség függvényében.

Mi történik, ha ez az anyaghullám kölcsönhatásba kerül a környezetével, és emiatt állapotuk összefonódik? Jelöljük a környezet koordinátáinak összességét q -val, akkor az összefonódott állapot legegyszerűbb közelítő

alakja:²¹

$$\Psi(x, q) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1(x)\chi_1(q) + u_2(x)\chi_2(q)], \quad (15.57)$$

ahol $\chi_1(q)$ és $\chi_2(q)$ normált hullámfüggvények.

Az interferenciakísérletben most is csak az eredeti anyaghullám interferenciáját látjuk, ezért a Born-szabálynak megfelelő intenzitást a környezet változóira ki kell integrálni:

$$\begin{aligned} I(x) &= \int |\Psi(x, q)|^2 dq = \frac{1}{2} (|u_1(x)|^2 + |u_2(x)|^2 + \mathcal{V}(u_1(x)u_2^*(x) + c.c.)) \\ &\approx 1 + \mathcal{V} \cos(\varphi_1(x) - \varphi_2(x) + \alpha), \end{aligned} \quad (15.58)$$

ahol

$$\mathcal{V} = \left| \int \chi_1^*(q)\chi_2(q) dq \right| = |\langle \chi_1 | \chi_2 \rangle| \quad (15.59)$$

az interferencia *láthatósága* („ \mathcal{V} ” mint „visibility”), és α a skalárszorzat komplex fázisa.²²

Az eredmény nagyon szemléletesen mutatja, hogy mi történik a környezeti kölcsönhatások következtében: amikor egy interferométerben az anyaghullámot szétosztjuk egy u_1 és egy u_2 részhullámra, azok máshol haladva, másképpen csatolódnak a környezethez. Emiatt a környezet változásaiban különböző nyomot hagynak. Ha ezek a nyomok erősen különböznek, a környezet χ_1 , ill. χ_2 állapotai egymásra *ortogonálissá* válnak.²³ Ez jelenik meg, mint \mathcal{V} lecsökkenése; ez mossa el az interferenciajelet. Ezt a mechanizmust nevezik *környezet okozta dekoherenciának* (Zeh, 1970, Zurek, 1981).

Itt kapcsolódik a történet az interferenciavesztés egy jóval régebbi indokolásához, a *komplementaritás* elvéhez. Ez úgy szól, hogy egy elektronak részecske- és hullám-tulajdonságai lehetnek, de ezek kiegészítik egymást: hol az egyik dominál, hol a másik. A részecske-tulajdonságokat erősíti az, ha egy kétrés-interferenciaberendezést kiegészíték valami olyan „üt-detektorral”, ami megsúgja, hogy az elektron melyik résen ment át; ilyenkor az interferencia leromlik, esetleg elvész.

²¹ Ami közelítés benne, az az $u_i(x)\chi_i(q)$ szorzat-alakú tagok megjelenése. Igazából itt összefonódott $s_i(x, \chi)$ függvényeknek kellene állni; ezek átlagtér-szerű közelítése a szorzattá szétvágott alak.

²² Az optikában a láthatóságot úgy definiálják, hogy ha egy interferenciaképben az intenzitás I_{max} maximális és I_{min} minimális értékek között váltakozik, akkor $\mathcal{V} = (I_{max} - I_{min}) / (I_{max} + I_{min})$.

²³ Ez nem nyilvánvaló, de egy nagyon sokdimenziós térben könnyű két vektornak ortogonális irányokba fordulni.

A fenti formulákból látjuk, hogy ez miképpen működik (Wootters és Zurek 1979): az „út-detektor”, akárhogy működjék is, része a „környezetnek”: azáltal tudja megszúgni, merre ment az elektron, hogy összefonódik vele, és a két úthoz a maga lényegesen különböző állapotait társítja. Ezek tárolják az elektronnál a környezetbe kiszivárgott „út-információt”, és ezek mossák el a koherenciát.

A környezetbe eltárolt információ minőségét éppen azon mérhetjük, hogy a tároló χ_i állapotok mennyire ortogonálisak, vagyis skalárszorzatuk mennyire kicsi. Bevezetve a

$$\mathcal{D} = \sqrt{1 - |\langle \chi_1 | \chi_2 \rangle|^2} \quad (15.60)$$

„megkülönböztethetőséget” („D” mint „distinguishability”), látjuk, hogy $\mathcal{D}^2 + \mathcal{V}^2 = 1$. Ha az összefonódásba más partnerek is betolakodnak, amelyek nem tárolnak megkülönböztetésre használható információt, akkor általában

$$\mathcal{D}^2 + \mathcal{V}^2 \leq 1 \quad (15.61)$$

(Englert 1996).

Ez az összefonódásalapú magyarázat tartalmában is, matematikájában is nagyon más, mint az a határozatlansági relációk sugallta kapcsolat, amelynek alapján a komplementaritás elvét az „alapító atyák” kimondták. Azóta az is kiderült, hogy a határozatlansági relációkra valóban épül egyfajta ket-tősség: ha Δx attól csökken, hogy egy optikai rácstra nagyon *keskeny* nyalábot bocsátunk, akkor nincs, ami letapogassa a rácsot: bizonytalanná lesz az impulzusmérés. Azonban valami más jön helyette, nem a koherenciavesztés, hanem egy régi ismerősünk: a *Stern–Gerlach-szerű* szelektív eltérítés a bejövő részecske belső állapota szerint; legyen az spin, gerjesztés vagy bármi más belső szabadságfok.

15.12. Dekoherencia és a sűrűségmátrix

A 6. fejezetben megismertük a sűrűségmátrix fogalmát, és láttuk, hogy kvantumállapotok sokaságára átlagolva kvantummechanikai keveréket kapunk, amelyek tulajdonságai markánsan különböznek a hullámfüggvényekkel (a Hilbert-tér vektoraival) leírható, „tisztá” állapotokétól. Az eltérés általában a koherencia elmosódásából áll.

Ebben a fejezetben a koherenciavesztésnek egy új, mindenütt jelenlevő mechanizmusát ismertük meg: a környezettel való összefonódást. Ennek is a sűrűségmátrix fogalma jelenti a legközvetlenebb leírásmódját.

Induljunk ki a részrendszer és környezete közös $\Psi(x, q)$ hullámfüggvényéből, ahol x jelöli a részrendszer, q pedig a környezet koordinátáit. Átlagoljuk ezen az állapoton a részrendszer valamilyen megfigyelhető tulajdonságát, vagyis egy olyan \hat{A}_x operátort, amely csak a részrendszer változóira hat:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_x \rangle &= \int dx \int dq \Psi^*(x, q) \hat{A}_x \Psi(x, q) \\ &= \int \left[\hat{A}_x \int \Psi(x, q) \Psi^*(x', q) dq \right]_{x'=x} dx \quad (15.62) \\ &= Tr(\hat{A}_x \tilde{\rho}), \end{aligned}$$

ahol

$$\tilde{\rho}_{x,x'} = Tr_q \rho_{x,q;x',q'} \equiv \int \Psi(x, q) \Psi^*(x', q) dq \quad (15.63)$$

a részrendszer *redukált sűrűségmátrixa*.²⁴ Ahogy ezt a mennyiséget előállítjuk, az a környezettel összefonódott rendszerek elméletének alpművelete: a „*kitrészelés*” a környezeti változókra.²⁵

Általában a részrendszer az, amit kézbe vehetünk, ránézhetünk, méréseket végezhetünk rajta. A részrendszer még kisebb, összefonódott részekből áll: egy molekula atommagokból és elektronokból. Ha nem lenne környezet, ezek összefonódásáról világos képet adna a Schrödinger-féle közös hullámfüggvény. Ha azonban bejönnek a környezeti hatások, a részrendszer belső összefonódásainak leírása, mérése, szabályozása pokolian bonyolulttá válik. Ez a kvantuminformáció elméletének egyik legaktívabban kutatott területe. Egyelőre csak ritka és egyszerű esetekben lehet megmondani egy többrészeske-sűrűségmátrix alapján, hogy az milyen erősen összefonódott részecskéket ír le.

Visszatérve a környezettel való összefonódásra, az nem pusztán kinematika, hanem a rendszer és környezete közötti kölcsönhatás által vezérelt dinamikai folyamat eredménye. Mivel a kölcsönhatás kölcsönös hatás, úgy is tekinthetjük, hogy a koherenciát – legalábbis részben – a környezetre gyakorolt erők visszahatása mossa el, amely zajforrásként működik.

Közönséges körülmények között ez nagyon gyors folyamat. A kísérleti művészetnek a kvantummechanika mai gyakorlatában egyik fő feladata,

²⁴ A (15.62) egyenlet középső sorában először a zárójelet kell kiszámítani: ez adja az $(\hat{A}_x \tilde{\rho})$ operátorsorzatot. Ezután végezzük el az $x' \rightarrow x$ változó-egybeejtést és az azt követő integrálást: ez együtt a trész művelete.

²⁵ Németsen még „kispúrozásnak” is lehet mondani; valamennyire is jól hangzó magyar neve nincs. A „kinyomozás” valami mást jelent. Végül is, a „kitrészelés” nem is hangzik olyan rosszul.

hogy lassú dekoherenciájú körülményeket teremtsen. Ez fotonok esetén könnyen megy, elektronoknál elég jó vákuummal megoldható, nagyobb kvantumrendszerek esetén nehéz feladat. Az intenzíven kutatott megoldási lehetőségekről a F. függelék tartalmaz némi áttekintést a kvantuminformáció nézőpontjából.

Ennek a lassú dekoherenciának legelterjedtebb elméleti leírása is a redukált sűrűségmátrix fogalmára épül. Legyen $\hat{H}_{x,q}$ részrendszer és hozzá csatolt környezete együttes Hamilton-operátora: akkor a *teljes* sűrűségmátrix kielégíti a (6.58) egyenlettel analóg

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H_{x,q}, \hat{\rho}] \quad (15.64)$$

Neumann-egyenletet. Ebből a környezetre kitrészelve, Born-közelítés-szerű iterációval, zárt egyenletet kaphatunk a redukált sűrűségmátrixra. Ebben az egyenletben a környezet hatása mint csillapítás és koherenciavesztés jelenik meg. Ez az ún. *master-egyenletek* módszere, amelyről az E. függelékben adunk áttekintést.

16. fejezet

A szemiklasszikus határeset

Ha egyszer megszoktuk, hogy a mikrovilág mozgásai a kvantummechanikát követik, egyszerre csak az válik nehéz kérdéssé, hogy megértsük, miért létezik egyáltalán klasszikus fizika, miért nem viselkednek kvantumosan a körülöttünk levő makroszkopikus testek. Tudjuk, hogy a relativitáselméletnek a nemrelativisztikus fizika egyszerű határesete, ha a fénysebességgel végtelenhez tartunk. A kvantumelmélet esetében kézenfekvő illúzió, hogy hasonlóan, ha a Planck-állandóval nullához tartunk, megkapjuk a klasszikus fizikát. Ez azonban távolról sem ilyen egyszerű.

Részleges válaszokat már kaptunk a klasszikusság kérdésére.

- Az anyaghullámok diszperziója miatt hullámcsomagok jönnek létre, amelyeknek kiterjedése makroszkopikus esetben mérhetetlenül kicsi, élettartama hosszú, tömegközéppontjának mozgása a klasszikus fizikát követi.
- Egyfajta kvalitatív tájékozódást kínál az ún. „korrespondencia-elv”, amely arra orientál, hogy a klasszikus viselkedést a magasan gerjesztett állapotok táján keressük. Ez a kritérium csak kötött állapotokra használható, és ott is finomításra szorul, lásd a koherens állapotok diszkusszióját a 8.2 pontban.
- Ugyanennek a kvalitatív képnek alapos és megvilágító matematikai leírását jelenti a WKB közelítés, amit a következő pontban ismerünk meg; ez nemcsak kötött állapotokra érvényes, és a magas gerjesztettség helyett a rövid hullámhosszra helyezi a hangsúlyt.

Az utóbbi néhány évtizedben sokat haladtunk előre a klasszikusság megértése felé. A hangsúly fokozatosan eltolódott a koherencia elvesztése, az ún. dekoherencia vagy fázisvesztés felé, amelyben a környezettel való kölcsönhatásoknak jut döntő szerep. Ezeknek mára alaposan kidolgozott elmélete jött létre (lásd az E. függelék), de sok tekintetben nyitva maradt még azoknak a szituációknak a kérdése, amelyekben a lineáris Schrödinger-egyenlet szerint egyes makroszkopikus testek mozgásának makroszkopiku-

san szét kellene válnia két vagy több részhullámra. Ilyet senki sem látott; ez a kvantummérés híres-hírhedt kérdésköre, benne az emblemikus Schrödinger-macskával. Mindezekről az utolsó fejezetben adunk áttekintést.

Hogy a rövid hullámhossz határesetete *nem* a végső szó a klasszikkusság magyarázatában, annak számos kísérleti bizonyítéka gyűlt össze az utóbbi években (lásd alább, a 16.5. pontban); akármilyen rövid a hullámhossz vagy magas a gerjesztés, ameddig az anyaghullámok interferenciaképessége megmarad, addig az bizony kvantummechanika. Ezért manapság a WKB közelítést és korszerű kiterjesztéseit nem klasszikus, hanem *szemiklasszikus* (félklasszikus) közelítéseknek nevezzük, hangsúlyozandó, hogy eredményei csak hasonlítanak a klasszikus fizikára, de koherens kvantummechanikai mozgásokat írnak le.

Az utóbbi években elérhetővé vált félvezető nanostruktúrák készítése a tisztaság és hibamentesség olyan fokán, hogy 1 K körüli hőmérsékletre hűtve, az elektron az eszköz többszáz nm-es méretén többször végighaladva is megőrzi kvantummechanikai koherenciáját. Az elektron de Broglie-hullámhossza a befutott útnál általában rövidebb, tehát ezek az eszközök tipikusan a kvantummechanika szemiklasszikus közelítésével írhatók le.

16.1. Hullámfüggvények WKB közelítésben

Emlékezzünk vissza a Schrödinger-egyenlet levezetésére (3.1 pont): p impulzusú, E energiájú mozgás esetén a hullámfüggvény kitevőjében levő fázis térben p/\hbar , időben E/\hbar sebességgel változik. Ha közelítünk a makroszkopikus méretekhez, amelyek skáláján a \hbar nevező nagyon kicsi, a fázis térbeli-időbeli változása nagyon gyors lesz. Ezzel szemben a hullámfüggvény amplitúdója lassan változik, aszerint, hogy a V potenciális energia milyen gyorsan változó függvénye a helynek és/vagy az időnek.

Mindez azt sugallja, hogy Wentzel, Kramers és Brillouin (WKB, 1926) nyomán ilyen alakban vegyük fel az egyrészecske-hullámfüggvényt:

$$\psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t) e^{iS(\vec{r}, t)/\hbar}, \quad (16.1)$$

ahol $S(\vec{r}, t)$ és $A(\vec{r}, t)$ valós függvények. Az S jelölés nyilvánvaló utalás a klasszikus mechanikai „hatásfüggvényre”; ez már a kvantummechanika keresésének időszakában is nyilvánvaló volt, ezért is hívják a Planck-állandót időnként „hatáskvantumnak”. Hamarosan látni fogjuk, hogy egy jól definiált „szemiklasszikus határesetben” $S(\vec{r}, t)$ tényleg pontosan a klasszikus hatásfüggvénybe megy át. Ez az a határeset, amelyben a fent említett gyors és lassú változások megkülönböztetését ki tudjuk aknázni. Formális matema-

tikai szempontból a határesetet $\hbar \rightarrow 0$ határátmenettel találhatjuk meg,¹ de közben tudjuk, hogy \hbar akkora amekkora, és igazából S válik hozzá képest nagygyá.

Helyettesítsük be a (16.1) próbafüggvényt a $\partial_t \psi = -(i/\hbar)[-(\hbar^2/2M)\nabla^2 + V]\psi$ Schrödinger-egyenletbe, és vezessünk le belőle egyenleteket az $S(\vec{r}, t)$ és $A(\vec{r}, t)$ függvények meghatározására!

A deriválásokat elvégezve, az eredményt osszuk el ψ -vel, majd válasszuk szét az egyenlet valós és imaginárius részét. Kezdjük az imaginárius résszel:

$$\partial_t S = \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 A}{A} - \frac{(\nabla S)^2}{2M} - V. \quad (16.2)$$

Kézenfekvő, hogy itt a formális $\hbar \rightarrow 0$ határátmenet ugyanazt jelenti, mint az, hogy az S/\hbar fázis gyors változásához képest az A amplitúdó változása lassú: mindenképpen arra jutunk, hogy a jobboldalon az első tagot el kell hanyagolnunk.² Így jutunk a tulajdonképpeni WKB közelítéshez:

$$\frac{(\nabla S)^2}{2M} + V + \partial_t S = 0. \quad (16.3)$$

Amit kaptunk, azok számára akik jártasak a klasszikus elméleti fizikában régi ismerős: a *Hamilton–Jacobi egyenlet*; $\partial_t S + \mathcal{H}(\vec{\nabla} S, \vec{r}) = 0$. Emlékeztetőül a tagok azonosítása az elemi mechanikai mennyiségekkel: $\vec{\nabla} S = \vec{p}$ az impulzus, $-\partial_t S = E$ az energia. Egy gyors próba: a (16.1) egyenlet kitévőjében szabad mozgásnak megfelelő síkhullámra az A amplitúdó állandó, a kitevőben pedig $S = \vec{p} \cdot \vec{r} - Et$, ahogy kell. A hullámhosszhoz képest lassan változó potenciálban, ami a WKB közelítés alkalmazási területe, A , S , és ha a potenciál időfüggő, akkor még E is, térben-időben lassan változó mennyiségek lesznek.

Ha $E = -\partial_t S = \text{const}$, akkor a (16.3) egyenletből a stacionárius állapotok hullámfüggvényét meghatározó Schrödinger-féle energiasajátérték-egyenlet WKB-megfelelőjét kapjuk:

$$\frac{(\nabla S)^2}{2M} + V = E. \quad (16.4)$$

¹ Vegyük észre, hogy a (16.1) kifejezésnek $\hbar \rightarrow 0$ esetén lényeges szingularitása van, ezért kell némi óvatossággal kezelni a határátmenetet. Amint Wigner Jenő mondta, „ígérem, hogy óvatos leszek”.

² Ez analóg a hullámoptikából a fénysugarak felé vezető *eikonál-közelítéssel*. A WKB szerzőhármás tudatosan hivatkozik erre a hasonlóságra. Az analógia abban is korrekt, hogy az eikonál-egyenlet is fénysugár tulajdonságú *hullámokat* ír le, határozott fázisviszonyokkal.

Ezt használjuk a WKB módszer legtöbb alkalmazásánál.

Térjünk át a szétszabdalt Schrödinger-egyenlet valós részére:

$$\frac{\dot{A}}{A} = -\frac{1}{2M} \nabla^2 S - \frac{\nabla A \cdot \nabla S}{A M}. \quad (16.5)$$

Szorozzuk meg az egyenletet $2A^2$ -tel! Az eredmény apró átrendezés után így írható:

$$\partial_t A^2 = -\vec{\nabla} \cdot \left(A^2 \frac{\vec{\nabla} S}{M} \right). \quad (16.6)$$

Itt nincs mit sorbafejteni, ez nyilvánvalóan a kontinuitásegyenlet WKB-nyelven: A^2 a valószínűsűrűség, a jobboldalon pedig a zárójelben az áram áll; a tört a csoportsebesség, ami $\hbar \rightarrow 0$ határesetben a klasszikus sebességgel esik egybe.

Visszatérve a (16.2) egyenlethez: a jobboldal első tagja, az a tag, amit később elhanyagoltunk, a szemiklasszikus határesetbe bele nem férő kvantum-effektusok hordozója. Jelentése eléggé nyilvánvaló: ez az a része a kinetikus energiának, ami nem a kitevőben levő fázis helyfüggéséből (a klasszikus impulzusból) ered, hanem az A amplitúdó helyfüggéséből. A kvantummechanika szempontjából ez is, az is impulzus, elvi különbség nincs közöttük. A szemiklasszikus határesetben ezek mégis elég élesen elválnak; ezt fejezi ki az a szóhasználat, hogy a most elhanyagolt tagot néha „kvantum-potenciálnak” nevezik, és úgy tekintik, mint a klasszikus mozgást befolyásoló erő forrását.³

16.2. Egydimenziós mozgások WKB közelítésben

A stacionárius Schrödinger-egyenlet szemiklasszikus megfelelőjét úgy kapjuk, ha a (16.4) és (16.6) egyenletek megoldását behelyettesítjük a (16.1) egyenletbe, és az eredményben felhasználjuk a fizikai körülményeknek megfelelő határfeltételeket.

Egy dimenzióban a (16.4) egyenlet és megoldása:

$$p(x) = S'(x) = \sqrt{2M(E - V(x))}; \quad S(x) = \int_{x_0}^x p(x') dx' + \hbar\phi_0, \quad (16.7)$$

³ Létezik a világban szétszórta fizikusoknak egy kicsiny, de lelkes közössége, akik ezen az alapon egyfajta alternatív kvantummechanikát művelnek, „Bohm-féle mechanika” néven. A többségi nézet ezt nem tekinti a kvantumelmélet valós alternatívájának.

ahol a φ_0 kezdőfázist a határfeltételek rögzítik. A (16.6) egyenlet ennek megfelelő stacionárius megoldása:

$$A(x) = \frac{\text{const}}{\sqrt{p(x)}}, \quad (16.8)$$

ahol a konstans a normálás rögzíti: mint eddig is, kötött állapotok esetén a teljes megtalálási valószínűségre, szórási-alagutazási problémáknál a bejövő valószínűségi áramra kell normálni. A (16.8) formula nagyon szemléletes: az A^2 sűrűség fordítva arányos a $p(x)/M$ csoportsebességgel: ahol a részecske lassabban mozog, ott több időt tölt.

Rakjuk össze a megoldást! Mivel stacionárius megoldásokat keresünk, $\Psi(x,t) = \exp[-(i/\hbar)Et]\phi(x)$. A továbbiakban $\phi(x)$ -re koncentrálunk. Ennek jellege lényegesen függ attól, hogy klasszikusan megengedett ($E > V(x)$) vagy tiltott ($E < V(x)$) tartományban vagyunk: az első esetben

$$\phi(x) \propto \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(\pm i \int_{x_m}^x k(x') dx' + \varphi_m\right); \quad k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2M(E - V(x))}; \quad (16.9)$$

a második esetben:

$$\phi(x) \propto \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(\pm \int_{x_t}^x \kappa(x') dx' + i\varphi_t\right); \quad \kappa(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2M(V(x) - E)}. \quad (16.10)$$

A megengedett és tiltott tartományok határain, a mozgás „klasszikus fordulópontjain”, ahol $E - V(x) \rightarrow 0$, a kétféle megoldást illeszteni kell. Ez a WKB közelítésben kiemelkedően nemtriviális feladatot jelent. Ennek az az oka, hogy a fordulópontokon maga a WKB közelítés romlik el, mivel ott $p(x) = \hbar k(x) \rightarrow 0$, vagyis a hullámhossz, amit a WKB közelítés mindenhez képest kicsinek tesz fel, végtelenhez tart.

A kiút: a fordulópont környezetében a potenciált közelítsük lineáris függvényekkel, erre oldjuk meg a Schrödinger-egyenletet, és vigyük el a megoldást olyan messzire, ahol már jó lesz a WKB közelítés. Az eljárás természetesen akkor használható, ha „olyan messzire” még jó a potenciál lineáris közelítése, vagyis a potenciál elég simán változik a fordulópont körül.⁴ Amennyi-

⁴ Gyakorlat: dolgozzuk ki ennek pontos feltételét!

ben az eljárás használható, a megoldandó egyenlet:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M}\phi'' + Fx\phi &= E\phi; \\ Fx_0 = E &\Rightarrow \xi := x - x_0; \\ -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\phi}{\partial\xi^2} + F\xi\phi &= 0. \end{aligned} \quad (16.11)$$

Az utóbbi egyenlet – némi változóhelyettesítés után – az Airy-függvények (tört indexű $J_{1/3}(z)$ Bessel-függvények) differenciálegyenletébe megy át. Ezek aszimptotikus viselkedése jól ismert, és a fordulópont két oldalán könnyen illeszthető a (16.9), ill. (16.10) formulákhoz.

Az eredmény kétféle aszerint, hogy a megengedett tartományban oszcilláló függvényhez a tiltott tartományban lecsengő vagy növekvő exponenciális illesztünk, a (16.10) egyenletbeli két előjel szerint. Kötött állapotoknál csak a lecsengő jut szerephez, de az alagutazás leírásához mindkét esetre szükségünk lesz.

Legyen $x < 0$ a megengedett és $x > 0$ a tiltott tartomány, akkor a lecsengő exponenciális illesztése:

$$\begin{aligned} \phi(x) &\approx \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_x^0 k(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) & x < 0; \\ &\approx \frac{1/2}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(-\int_0^x \kappa(x') dx'\right) & x > 0, \end{aligned} \quad (16.12)$$

a növekvő exponenciális illesztése pedig:

$$\begin{aligned} \phi(x) &\approx \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_x^0 k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) & x < 0; \\ &\approx \frac{1/2}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(\int_0^x \kappa(x') dx'\right) & x > 0. \end{aligned} \quad (16.13)$$

A nevezetes eredmény ebben a $\pm\pi/4$ fázis: a lineáris potenciállal közelíthető fordulópontnál, ha az exponenciális lecsengő, a visszaverődő hullám $1/8$ hullámhossznyt „lóg bele” a tiltott tartományba, ha pedig növekvő, a hullám $1/8$ hullámhossznyt kiszorul a tiltott tartományból.⁵

⁵ A fenti illesztési formulákat az Airy-függvények részletes vizsgálata nélkül is ki lehet találni x szerinti, az $x = 0$ szinguláris pontot megkerülő analitikus folytatás alapján (Kramers 1926; Landau–Lifsic: *Kvantummechanika*, 47.§).

Beszéljük meg először a kötött állapotok kérdését. Ha a szinuszt oda- és visszahaladó hullámra bontjuk fel, a $\pi/4$ duplán számít: a hullám a Bohr–Sommerfeld kvantáláshoz képest minden visszaverődésnél $\pi/2$ extra fázistolást vesz fel. A zárt pályára vonatkozó szemiklasszikus kvantálási feltétel tehát a (2.9) egyenlethez képest így változik:

$$\oint p(q) dq = \left(n + \frac{1}{2} \right) h. \quad (16.14)$$

Fontos még egyszer megjegyezni, hogy ez a korrekció akkor jogos, ha teljesülnek a linearizált fordulópont feltételei. Ha a potenciálfal – tetszőleges belső potenciál peremén – végtelen magas és meredek, az $1/2$ -et el kell hagyni. Meredek, de véges potenciálok esetén persze minden közbenső érték is előfordulhat, ilyenkor a potenciált pontosabban kell számolni, és az Airy-függvény nem használható közvetlenül.⁶

A (2.9), ill. (16.14) egyenletnek (a különbség itt nem számít) van egy nevezetes értelmezése: ez a *szemiklasszikus állapotszámlálás* indokolása, amit a statisztikus fizika kiterjedten használ. Szavakban elmondva, a formula szerint a (p, x) fázistér h területű fáziscellája felel meg egy kvantált pályának.⁷

Nem kevésbé fontos alkalmazási területe a WKB közelítésnek az *alagút-effektus* vizsgálata. Az 5.5. pontban megismert szögletes potenciálfal modellje általában rosszul írja le a kísérletileg vizsgált rendszereket, radioaktív bomlástól a félvezető nanostruktúrák kapufeszültséggel beállított potenciálgátjaiig. Ezeknek a sima potenciálfalaknak a tárgyalására általában a WKB módszert használjuk.

Vegyük fel az alagutazó WKB hullámfüggvényt a potenciálgátat határoló $x = a$ és $x = b$ fordulópontok között ilyen alakban:

$$\phi(x) = \frac{1/2}{\sqrt{\kappa(x)}} \left(a_+ \exp \left(- \int_a^x \kappa(x') dx' \right) + a_- \exp \left(- \int_x^b \kappa(x') dx' \right) \right), \quad (16.15)$$

a két megengedett tartományban pedig, figyelembe véve a fenti exponenciálisoknak a határokon felvett értékeit, valamint a (16.12) és (16.13) illesztési

⁶ Azt a számot, ami a sima falnál a (16.14) formulában megjelenő $\frac{1}{2}$, végtelen meredek falnál 0, közbenső esetekben pedig valami más, *Maszkov-indexnek* nevezik.

⁷ d dimenziós mozgásnak megfelelő $2d$ dimenziós fázistér esetén h^d térfogatú; N részecskére általában $d = 3N$. Az ortogonális bázisállapotok teljes összeszámlálásánál a spint és egyéb belső szabadságfokokat is figyelembe kell venni.

formulákat, így:

$x < a$:

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left[a_+ \sin \left(\int_x^a k(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) - a_- \exp \left(- \int_a^b \kappa(x') dx' \right) \sin \left(\int_x^a k(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) \right]; \quad (16.16)$$

$x > b$:

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left[-a_+ \exp \left(- \int_a^b \kappa(x') dx' \right) \sin \left(\int_b^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) + a_- \sin \left(\int_b^x k(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \right]. \quad (16.17)$$

A végső kiértékelésnél van egy határfeltételünk: balról jobbra történő alagutazást kell leírunk, ezért az $x > b$ tartományban csak *kifutó* hullám lehet jelen: a szinuszfüggvények komplex felbontásából az $\exp(-i \int_b^x k(x') dx')$ szorzót tartalmazó tagoknak ki kell esniük. Ebből az alábbi feltétel adódik:

$$a_- = i a_+ \exp \left(- \int_a^b \kappa(x') dx' \right). \quad (16.18)$$

Ezután már kiszámíthatjuk a (4.5) kifutó valószínűségi áramsűrűséget is:

$$j_{ki} = \frac{\hbar}{M} \frac{|a_+|^2}{2} \exp \left(-2 \int_a^b \kappa(x') dx' \right). \quad (16.19)$$

Hogy az alagutazás valószínűségét megkapjuk, ismernünk kell még a bejövő áramsűrűséget is. A (16.16) kifejezésben is kiválasztva a szinuszok jobbra haladó komponensét,⁸ azt találjuk, hogy az a_- -hullám járuléka exponenciálisan kicsi; az eredmény:

$$j_{be} = \frac{\hbar}{M} \frac{|a_+|^2}{4}. \quad (16.20)$$

⁸ Ezúttal természetesen a balra haladó, a fordulóponton reflektált komponens is jelen van, majdnem ugyanakkora intenzitással; a csekély hiány éppen az, ami alagutazással továbbjutott.

A kimenő és bemenő áramsűrűségek aránya az alagutazási valószínűség nevezetes WKB formulája:

$$T = 2 \exp\left(-2 \int_a^b \kappa(x') dx'\right), \quad (16.21)$$

ami elegendően sima és széles potenciálgátakra jó közelítő kifejezés.

Az utóbbi évtizedekben a szemiklasszikus kvantummechanikának a WKB módszernél hatékonyabb módszerei jelentek meg. Ezek tipikusan egy több-dimenziós rendszer egész mérhető spektrumát írják le; a feltűnő jelenség az, hogy a kvantumfeltételeket kielégítő, akármilyen bonyolult alakú zárt pályák élesen kiugranak a nem záródó pályák elmosódó háttéré előtt, akkor is, ha a zárt pályák a klasszikus mechanika szempontjából instabilak: ha a rendszer eltalálja a „jó” pályát, azon sokáig rajta marad. Ilyen tulajdonságoknak lényeges szerepe van a *kvantumkáosz* jelenségkörében, amit kísérletileg többek között a már említett félvezető nanostruktúrákban lehet vizsgálni. A jelenségekört szupravezető határok beépítése trükkös határfeltételekkel gazdagítja.



TEXTS DON'T GROW ON TREES!
AUTHORS' RIGHTS AWARENESS CAMPAIGN

© Geszti Tamás

17. fejezet

Kvantummérés: téma változatokkal

A kvantummechanikai mérés minden részlettől lecsupaszított modellje ez: mérni akarom egy részecske feles spinjének z komponensét, olyan mérőszközzel, amely kétféle válaszra képes: a spin *felfelé* vagy *lefelé* áll. Φ -vel jelölve a „mutató-koordinátát”: a mérőszköz leolvasható adatát, amely kezdetben Φ_0 , a kétféle válasz esetén Φ_+ ill. Φ_- értéket vesz fel, a mérés így játszódik le:¹

- ha a bejövő részecske spinje felfelé áll,

$$|+\rangle|\Phi_0\rangle \Rightarrow |+, \Phi_+\rangle, \quad (17.1)$$

- ha a bejövő részecske spinje lefelé áll,

$$|-\rangle|\Phi_0\rangle \Rightarrow |-, \Phi_-\rangle. \quad (17.2)$$

Mi történik, ha most egy olyan részecskét engedünk be, amelynek spinje nem felfelé, nem is lefelé áll, hanem valami más irányba, tehát $\alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$ szuperpozícióban van? A lineáris Schrödinger-egyenlettel leírt unitér időfejlődés szerint nem kétséges, hogy minek kell történnie:

$$\begin{aligned} (\alpha|+\rangle + \beta|-\rangle)|\Phi_0\rangle \\ \Rightarrow \alpha|+, \Phi_+\rangle + \beta|-, \Phi_-\rangle. \end{aligned} \quad (17.3)$$

De nem ez történik. A két tag közül az egyik megvalósul, a másik eltűnik. Hogy melyik valósul meg, az a véletlen múlik; $|\alpha|^2$ valószínűséggel az első, $|\beta|^2$ valószínűséggel a második. Ilyenkor a mért spin beállása is ugrás-szerűen megváltozik: csak a mérőszköz által mutatott érték marad életben; ez lesz a további fejlődés kezdeti állapota.

¹ Tudjuk, hogy ez a mérőszköz egy Stern–Gerlach mágneses szétválasztó után elhelyezett két detektorból áll; „felfelé” esetén az egyik szólal meg, „lefelé” esetén a másik. A mágneses szétválasztó végzi az előzetes „Neumann-mérést”, lásd a 6.2. pontban. A mérés után a két detektor egymással is összefonódott állapotba kerül. Ezekkel a részletekkel most nem törődünk.

Van erre egy elterjedt kifejezés: a mérési folyamatban a hullámfüggvény „összeomlik”, *kollapszust* szenved; ráesik egy véletlenül kiválasztott vetületére. Ott újraéled, és amíg nem mérik újra, tovább fejlődik a Schrödinger-egyenletnek megfelelően.

Ezt a forгатókönyvet számtalan elvégzett kísérlet igazolja, és semmi sem látszik ellentmondani neki. Másfelől nyilvánvaló ellentétben van a lineáris Schrödinger-egyenlettel és a belőle eredő unitér időfejlődéssel.

Ezt a helyzetet nyilván értelmezni („interpretálni”) kell. A Bohr–Heisenberg–Neumann János nevével fémjelzett „koppenhágai interpretáció” álláspontja: a kvantummechanika a mikrovilágra vonatkozik; a mérőeszközök ezzel szemben a makrovilág részei, ahol a klasszikus fizika törvényei érvényesek. A kvantummechanikai mérésben a két világ érintkezik, ennek különleges törvényei vannak: ez az ugrásszerű, véletlenszerű mérési folyamat.²

Ez a leírásmód hallatlanul sikeres fenomenológiája lett a világ leírásának. A szuperpozíció elve a mikroszkopikus világban kérlelhetetlen pontossággal érvényesül, az elektronhullámoktól egyfelől az atomok és molekulák mozgásáig, másfelől az elemi részecskék családjain belül létrejövő szuperpozíciókig. A nagy molekulák felé haladva a koherencia elvész, de ennek okait jól értjük: a környezettel való kölcsönhatás erősödik meg; ha a környezettel való összefonódást követni tudnánk, ott is érvényesülne a szuperpozíciók linearitása.

Ugyanakkor a mérési folyamat és benne a mérőeszközök különleges státusát Bohr napjai óta is kihívásként éli meg a fizikusok egy része.³ Ahogy a kísérleti eszközök fejlődésével fokozatosan tárul fel a mikro– és makrovilág határán élő, *mezoszkopikus* kvantumrendszerek fizikája, amelyekben tiszta anyagok, abszolút nullához közeli hőmérséklet, nagy vákuum, mechanikai és optikai eszközök csúcspontossága és kivételes stabilitása, valamint a nanotechnológia teljes fegyvertára őrzi a kvantummechanikai koherenciát, kézenfekvő Bohr és követőinek taktikus távolságtartásáról lemondva neki-rugaszkodni és türelmesen keresni a hidat a mikro– és makrovilág között, a

² Filozófiai szempontból zavarbaejtő, hogy a „normális” unitér fejlődésről semmi közvetlen kísérleti tapasztalatunk nem lehet, hiszen a kísérletekben mindig a „kivételes” mérési folyamatot látjuk. Van, aki ezt úgy mondja, hogy az állapotvektor csak könyvelési eszköz a mérési jegyzőkönyvek áttekinthetőbbé tételére. A fizika azonban számos példát mutatott rá, hogy a bár közvetett, de nagyon szemléletes fogalmakat előbb vagy utóbb teljes értékű valóságnak fogadjuk el.

³ Egy elterjedt mondás szerint, amit a folklór Feynmannak tulajdonít, de David Mermin magának igényli a szerzőségét, a koppenhágai interpretáció ezt mondja: „Shut up and calculate”, magyarul: „Befogod a szád és számolsz!”

törvényt, amelynek egyik határeset a Schrödinger-egyenlet, másik a newtoni mechanika és a maxwelli elektrodinamika. Hogy ilyen törvény létezik, az nem nyilvánvaló, de keresése tisztességes tárgya a fizikai kutatásnak.⁴

Addig is, és ettől függetlenül, a jól őrzött koherenciájú unitér időfejlődés és az azt időnként megszakító mérési folyamatok építőköveiből a huszadik század a világ addig elképzelhetetlenül mély és részletes megértéséhez jutott el. Végül, nem utolsósorban, ugyanezekből kezd felépülni az utóbbi évtizedekben az információkezelés kvantummechanikai eszközeinek⁵ egyre növekvő fegyvertára.

A kutatás számos, markánsan különböző szituációt azonosított; ezekből adunk az alábbiakban áttekintést.

17.1. Kvantum-Zénón-effektus

Az eleai Zénón néven ismert görög filozófus⁶ emlékét leginkább a mozgással kapcsolatos paradoxonjai őrzik. Ezek paradox voltát a matematikai analízis megszületése oldotta fel: ma már senki sem csodálkozik azon, hogy két egymás utáni helymérésből határátmenettel egyetlen pillanatbeli sebességet kaphatunk, vagy hogy végtelen sok szám összege, pl. végtelen sok „esemény” együttes időtartama is lehet véges.

Ez utóbbira utal Misra és Sudarshan (1977) felfedezése, amely egy valószínűségi kvantumjelenséget körvonalaz: ha egy rendszer unitér időfejlődéssel gyorsan kimozdulna kezdeti állapotából, de sűrű mérésekkel mindig ellenőrzöm, hogy még ott van-e abban a kezdeti állapotban, akkor tényleg nagyon sokáig nem tud onnan kimozdulni.

A levezetés egyszerű. A gyors unitér fejlődés biztosítására olyan *diszkrét* állapotok közötti átmenetekből kell kiindulnunk, amelyek *nem* sajátállapotai az energiának; formálisabban szólva, egy diszkrét spektrumú, nem megmaradó mennyiség sajátállapotaiból.⁷ Egy $|n\rangle$ kezdeti állapotból kiindulva engedjük működni az unitér időfejlődést egy rövid τ ideig, majd ellenőrizzük,

⁴ Akit a téma érdekel, részletes, sokoldalú és viszonylag friss áttekintést találhat róla a [24] kötetben.

⁵ Lásd az F. függelék, részletesebben pedig a [25] és [26] monográfiákat.

⁶ Kr. e. 490–430; az angolnyelvű irodalomban Zeno néven említik.

⁷ Ez a Rabi-oszcillációknak megfelelő szituáció, lásd a 12.3. pontot. Folytonos spektrummal a dolog nem megy: ha egy kő a fejemre akar esni, hiába nézem egyfolytában, akkor is leesik. Hasonlóan, egy exponenciális időfüggésű radioaktív bomlást sem lehet „zénózással” lelassítani.

hogy a rendszer ott van-e még a kezdeti állapotban. Ennek valószínűsége:

$$\begin{aligned}
 P_n(\tau) &= |\langle n | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} | n \rangle|^2 \approx |\langle n | \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau - \frac{1}{2\hbar^2} \hat{H}^2 \tau^2 + \dots | n \rangle|^2 \\
 &\approx 1 - \frac{1}{\hbar^2} ((H^2)_{nn} - (H_{nn})^2) \tau^2 \\
 &\equiv 1 - \frac{(\Delta E)^2}{\hbar^2} \tau^2 \\
 &\approx \exp\left(-\frac{(\Delta E)^2}{\hbar^2} \tau^2\right),
 \end{aligned} \tag{17.4}$$

ahol ΔE az energia szórása az $|n\rangle$ állapotban.⁸

A kezdeti állapot ellenőrzése „projektív mérés”: ha igenlő választ adott, az a kvantumállapotot visszavetíti az $|n\rangle$ kezdeti állapotba, és rendszerünk újra innen indul neki a változásnak. Ismételjük meg az egész eljárást N -szer, és legyen $t = N\tau$ egy adott időtartam, amelyet N növelésével egyre rövidebb τ szakaszokra szabdalnak fel az egyre sűrűbb kvantummérések. Annak valószínűsége, hogy mindannyiszor, és még a t időszakasz végén is az $|n\rangle$ kezdőállapotban találjuk a rendszert,

$$\begin{aligned}
 P_n(t) &= [P_n(\tau)]^N \approx \exp\left(-\frac{(\Delta E)^2}{\hbar^2} \left(\frac{t}{N}\right)^2 N\right) \\
 &= \exp\left(-\frac{(\Delta E)^2 t^2}{\hbar^2 N}\right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1.
 \end{aligned} \tag{17.5}$$

A látványos eredmény: a sűrű kvantummérések odaszögeznek a rendszert a kezdőállapothoz; ez a kvantum-Zénón-effektus.⁹ A levezetés szemléletesen mutat rá az unitér időfejlődés és a kvantumérés közötti alapvető eltérésre: unitér dinamikában a változások időben lineárisan halmozódnak fel, sűrű kvantummérések dinamikájában ennél lassabb kvadratikussal összegezéssel.

A jelenséget kísérletekkel is ellenőrizték [27]. Induljunk ki egy csapdázott Be^+ ion két energiasajátállapotából; az alacsonyabb energiájú legyen a kezdőállapot. Az iont az energiasajátértékek különbségének megfelelő erős rezonáns lézertérrel megvilágítva, a két állapot megszűnik energiasajátállapot lenni, az ion gyors unitér dinamikával oda-vissza oszcillál a két állapot között. Ha azonban egy *harmadik* kvantumállapotba gerjesztő fényimpulzusok által kiváltott rezonancia-fluoreszcencia megfigyelésével elég sűrűn

⁸ Ez természetesen nem 0, mert nem energiasajátállapot.

⁹ Ez olyan, mint amikor egy nagyon álmos embertől tíz másodpercenként megkérdezzük: „Még ébren vagy?” és ettől tényleg nem tud elaludni.

ellenőrzöm, hogy a rendszer ott van-e az alapállapotban, ez lebénítja az oszcilláló uniter dinamikát: a rendszer tényleg legtöbbször ott lesz, ahol keresem.

A kvantum-Zénón-effektus kiterjedt folklórjának része egy angol közmondás: „Watched pot never boils”, vagyis ne nézegesd a forralni feltett vizet, ne emelgesd a fedőt, mert az meggátolja a forralást; ami magától is megy, azt inkább hagyd, ne ellenőrizgesd. Angolul a jelenséget nevezik még „watchdog effect”-nek is: ha az embert egy barátságos pitbull figyel, akkor jobb nem nagyon mozogni.

A fizikai valóság azonban gazdagabb: ha a megfigyelések sűrítésével elérjük a $\tau = t/N \leq \hbar/\Delta E$ határt, akkor egyre újabb állapotok kapcsolódnak be a dinamikába, és a változások újra felgyorsulnak: a kvantum-Zénón-effektus átcsap *anti-Zénón-effektusba*. Ez egyfajta magyarázatot jelent arra, miért viszonylag ritkák a kvantum-Zénón-effektus tiszta megjelenési formái.

17.2. Kölcsönhatás-mentes mérés

Ez a kifejezés Elitzur és Vaidman nevezetes munkája [28] óta a következő szituációt jelenti. Építsünk interferométert, amelyben két rész hullám találkozása egy detektornál kioltó interferenciát okoz. Ha ezt meggátolom az egyik rész hullám útjába helyezett elnyelő tárggyal, akkor a detektor megszólal.

A dologban az a furcsa, hogy ha az elnyelő elnyelné a részecskét, akkor nem maradna, amitől a detektor megszólaljon, tehát a detektor megszólalása az elnyelőt elnyelés nélkül, más szóval: kölcsönhatás nélkül jelzi.

Hogy még furcsább legyen, Elitzur és Vaidman azt ajánlja, képzeljünk az elnyelő helyébe egy bombát, amely az elnyelt részecskétől felrobban. A kölcsönhatásmentes mérés – az interferencia törvényei által megszabott eséllyel – arra ad esélyt, hogy a bomba jelenlétét felrobbanás nélkül észlelhessük.

A látszólagos ellentmondást többféleképpen is ki lehet bogozni. Kedvenc magyarázatom [29] szerint itt az *előreszórás* működik:¹⁰ a kvantummechanika unitaritása nem engedi, hogy egy tárgy egyetlen hatása az elnyelés legyen; a bejövő hullámot az árnyéktérben ki is kell oltani egy előreszórt hullám kibocsátásával. Ez az előreszórt hullám, az árnyéktérbe vető tárgy *sziluettje* az, amely eljut a detektorba és lehetővé teszi a kölcsönhatás-mentes mérést.

¹⁰ Lásd az „optikai tétel” tárgyalását a 14.5. pontban.

17.3. Quantum Non-Demolition

A határozatlansági relációk tárgyalásánál, a 7.1 pont végén már említettük, hogy a mérés visszahatása tekintetében a különböző változók nem egyenértékűek: ha pontosan mérünk koordinátát, az az impulzus szórása miatt hamarosan pontatlanná válik. Fordítva ez nem igaz: az élesen megmért impulzus éles marad. A különbség azon múlik, hogy az impulzus mozgásálló.

Kézenfekvő a stratégia: akármit is akarunk mérni, egy közvetítő rendszer közbeiktatásával vezessük vissza valamilyen mozgásálló mérésére; ezt mérjük meg a lehető legpontosabban, miközben a hozzá konjugált, de érdektelen mennyiséget gátlástalanul „beszenyezhetjük” a határozatlansági relációnak megfelelő mérési zajjal.

Az alapvető példa a fotonszám mérése. A közönséges fotondetektorok úgy számolják meg a fotonokat, hogy közben megeszik őket. Ez jelentékeny kárt tesz pl. optikai távközlésnél egy gyenge, csak néhány fotonnyi gerjesztés tartalmazó fényimpulzusban, amelynek információtartalmát szeretnénk kiolvasni, anélkül, hogy meggátolnánk a jel továbbhaladását.

A kvantummechanikai megoldás: emlékezzünk vissza, hogy a fotonszám és a fény kvantummechanikai fázisa konjugált mennyiségek (lásd a (8.23) egyenletet); keressünk tehát olyan közvetett mérést, amelyben a fotonszámot megzavarás nélkül tudjuk mérni, miközben a távközlés szempontjából érdektelen kvantummechanikai fázist elmoszuk.

Ezt egy nemlineáris optikai jelenség: a *Kerr-effektus* teszi lehetővé. Ez azt jelenti, hogy az n törésmutató függ az E elektromos térerősségtől:

$$n(E) = n_0 + n_2 E^2 \dots \quad (17.6)$$

Másrésről a térenergia arányos az N foton számmal: $E^2 \propto N$, vagyis a megfigyelt fényvezető-szakasz törésmutatója a foton számmal arányosan modulálódik.

Ezt egy gyenge szondázó helyi fénynyalábbal le lehet tapogatni, és rajta a törésmutató változásából eredő fázistolást interferometrikan meg lehet mérni. Ilyen módon megmértük az optikai kábelben áthaladó fotonok számát, a fotonok megsemmisítése nélkül, pusztán fázis-visszahatást okozva nekik.

A fénykvantumok (fotonok) megsemmisítés (szétroncsolás) nélküli megszámlálása angolul: quantum non-demolition (rövidítve: QND). A kifejezést a fizikai ötlet megalkotója, Vlagyimir Braginszkij (angolosan: Vladimir Braginsky) orosz fizikus találta ki a „roncsolásmentes anyagvizsgálat” mintájára, amely akkor – 1975 körül – a Szovjetúnióban politikailag támogatott iparfejlesztési eszköz volt, így számíthatott a fölöttesek hallgatóságos egyetértésére. Az elnevezés fennmaradt; elterjedt magyar fordítása nincs.

Az optikai távközlésnek igazából nem nagyon hiányzik a QND, mert az optikai kábelekből a fényintenzitást nem engedik a néhány fotonos szintre csökkenni. Az igazán ígéretes alkalmazás a gravitációs hullámok detektálása lehet. Néhány fejlesztés alatt álló változatban ennek eszköze egy kvarcüveg szálon ingaként lengő mázsás kvarcüveg tömb, amelynek lengését befolyásolhatják az elhaladó gravitációs hullámok.

A lengő ingának sem a helye, sem az impulzusa nem mozgásálló. A klasszikus mozgásegyenlet szerint az inga x kitérése és p impulzusa

$$\begin{aligned} x(t) &= X_1 \sin \omega t + X_2 \cos \omega t; \\ p(t) &= m\omega [X_1 \cos \omega t - X_2 \sin \omega t] \end{aligned} \quad (17.7)$$

alakban függ az időtől, ahol m a lengő tömeg. Ami mozgásálló, azok az X_1 , X_2 „kvadratura – amplitudók”; ezeket teszi időfüggetlenné a gravitációs hullámtól származó gyenge erő.

Felhasználva \hat{p} és \hat{x} kommutátorát,

$$[\hat{X}_1, \hat{X}_2] = \frac{\hbar}{i m \omega}, \quad (17.8)$$

amiből következik a

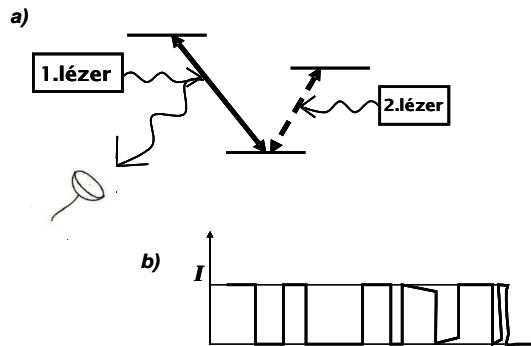
$$\Delta X_1 \Delta X_2 \geq \frac{\hbar}{2 m \omega} \quad (17.9)$$

határozatlansági reláció. A QND stratégia ezek után: mérjük az egyik kvadratura–amplitudót (mindegy, hogy melyiket) amilyen pontosan tudjuk, és hagyjuk, hogy a másik vegye magára a mérési visszahatás minden zaját.

Hogy milyen erősek a gravitációs hullámok, azt nem tudhatjuk, amíg még egyet sem sikerült detektálni. Addig pedig nyitva áll a lehetőség: rákényszerülhetünk a mérések olyan mértékű finomítására, ahol a kvantum hatások már lényegesen befolyásolhatják az eredményeket, és a QND stratégia komoly segítséget nyújthat a cél elérésében. Ehhez persze még az is kell, hogy extrém körülmények között a mázsás kvarctömb mozgását is a kvantummechanika törvényei szabják meg.

17.4. Kvantum-ugrások

A közvetett kvantum mérés nevezetes példája a Dehmelt által kitalált és azóta sok változatban megvalósított „kvantumugrás-kísérlet”, más néven: „a polcra tett elektron” (17.1 ábra). Akárcsak a kölcsönhatásmentes mérés, ez is az unitaritás számos játékának egyike: itt egy közvetlenül észlelhetetlenül gyenge tiltott átmenet sziluettjét látjuk; a konkurrens megengedett átmenet serényen sugárzó oda–vissza rohanása megszakad, amikor a tiltott átmenet bekövetkezik.



17.1. ábra. a) A Dehmelt-féle kvantumugrás-kísélet: egy ionsapdában tartott, lehűtött atom három szintje között egy megengedett átmenet (vastag vonal) és egy tiltott átmenet (szaggatott vonal) létezik. Az 1. lézer a megengedett átmenetet folyamatosan gerjeszti; a folyamatosan kijövő rezonancia-fluoreszcencia jel intenzitását a b) ábra mutatja. A 2. lézer a tiltott átmenettel áll rezonanciában. Időnként az atom ezen az ágon gerjesztődik, elektronja egy időre „polcra kerül”; ilyenkor a fluoreszcencia-jel megszakad. Később az elektron leesik a polcra és ismét a megengedett ágon folytatja. A polcra tett elektron hosszú élettartama miatt ez a legpontosabb spektroszkópia: a kvantumugrások csak akkor jelennek meg, ha a 2. lézer nagyon pontosan eltalálja a tiltott átmenet frekvenciáját.

17.5. Gyenge mérés utószелеkcióval

A 6.2. pontban ismertetett „Neumann-mérés” stratégiája abból indult ki, hogy az állapotvektor azon komponenseit, amelyek a mért mennyiség különböző sajátállapotainak felelnek meg, térben külön kell választani olyan rész-hullámokra, amelyek egymással már nem interferálhatnak; ekkor az egyes komponensek detektálási valószínűségét közvetlenül meghatározza a Born-szabály.

A makroszkopikus mennyiségek mérése ezt a térbeli szétválasztást általában nem teljesíti; ilyenkor kvantummechanikai értelemben pontatlan, más szóval „gyenge mérést” hajtunk végre. Aharonov és munkatársai [30] jöttek rá, hogy ilyen gyenge mérést igazi mikrorendszerek esetén is érdemes végrehajtani; ilyenkor a kevésbé szétválasztott rész-hullámok között érdekes interferencia-jelenségek lépnek fel, amelyeket egy „utószелеkciónak” nevezett eljárással lehet láthatóvá tenni.

Induljunk ki egy y irányba haladó, z irányban Δ szélességű, Gauss-profilú hullámnyalábból, amely feles spinű részecskéket tartalmaz, x irányba pola-

rizálva. A kezdeti állapot tehát így írható¹¹:

$$\langle z|i\rangle = \frac{C}{\sqrt{2}} e^{-z^2/4\Delta^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (17.10)$$

ahol a $C = 1/(\sqrt{2\pi}\Delta)$ tényező biztosítja, hogy a z irányú hullámfüggvény négyzete 1-re legyen normálva. A formulából elhagytuk az y irányba haladó hullámmozgásnak megfelelő tényezőt, amelynek semmi szerepe nem jut az alábbiakban.

Végezzünk el a nyalábon egy z irányú gyenge Stern–Gerlach mérést! Ez a fenti kezdeti állapotot két egymáshoz képest kissé eltolt Gauss–nyaláb szuperpozíciójára bontja szét:

$$\longrightarrow \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-(z-\delta)^2/4\Delta^2} \\ e^{-(z+\delta)^2/4\Delta^2} \end{pmatrix}, \quad (17.11)$$

ahol a mérés gyengesége azt jelenti, hogy $\delta \ll \Delta$, tehát a nyalábok nem válnak szét.

Ezen az alig szétválasztott hullámnyalábon szinte semmit sem lehet látni. Most jön azonban az utószelekció: végezzünk egy második, erős Stern–Gerlach szeparálást, ezúttal az x irány mentén! Ez a nyalábot ilyen komponensekre bontja szét:

$$\longrightarrow \frac{C}{\sqrt{2}} \left\{ f_1(x) \frac{e^{-(z-\delta)^2/4\Delta^2} + e^{-(z+\delta)^2/4\Delta^2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + f_2(x) \frac{e^{-(z-\delta)^2/4\Delta^2} - e^{-(z+\delta)^2/4\Delta^2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right\}, \quad (17.12)$$

ahol $f_1(x)$ és $f_2(x)$ az erős Stern–Gerlach szeparálás következtében teljesen szétválnak.

Mit látunk a két ágban z függvényében? Nézzünk rá a két spinkomponens z -függő szorzójára! Az első, amely az $\hat{S}_x = \hbar/2$ spinbeálláshoz tartozik, a két, alig különböző Gauss-görbe összegével semmi érdekeset sem ígér. Nem úgy a második, $\hat{S}_x = -\hbar/2$ spinű komponens: a két Gauss-görbe *különbsége* destruktív interferenciával majdnem mindenütt kioltja egymást, csak az eloszlás peremén marad belőle két éles csúcs; egymástól nem az alig látható δ , hanem a jóval nagyobb Δ távolságra szétválva.

¹¹ Az írásmódot illetően lásd a 12.4. pontot.

Ez a lényege a gyenge mérés és utószelekció trükkös kombinációjának: az alig különböző hullámkomponensek interferenciája jól látható kísérleti kontrasztot teremt. Az effektust, amelynek titkos történelmi előzménye a fáziskontraszt-mikroszkópia (Zernike 1935), többféle kísérleti elrendezésben kipróbálták, leginkább polarizált fotonokon, ahol a Stern–Gerlach spin-szeparálás szerepét kettőtörő optikai kristály veszi át. Ez még alig megy túl egy klasszikus hullámoptikai kísérleten, de végeztek már ilyen elvű mérést kétfoton-interferenciában is, ami már igazi nehézsúlyú kvantumjelenség.

Ezzel zárjuk látogatásunkat a kvantummechanikai mérés alakváltozatait bemutató tárlaton. Olvasóimnak legyen ez jó hír: amiből már ennyi látványos ötlet született, ott érdemes tovább gondolkozni, unitér fejlődés és kvantummérés újabb szép és hasznos kombinációit keresve.

Függelék



TEXTS DON'T GROW ON TREES!
AUTHORS' RIGHTS AWARENESS CAMPAIGN

© Geszti Tamás

A. függelék

Feynman-féle pályaintegrál

A pályaintegrálok Feynmantól eredő módszere egy eredeti és fontos megközelítése annak a problémának, hogy az állapotvektor $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(0)\rangle$ unitér időfejlődését számítással követhessük.

A feladat nehézségét az adja, hogy mivel a Hamilton-operátor két tagból, egy kinetikus és egy potenciális energiából áll, amelyek nem felcserélhetők:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}; \quad [\hat{T}, \hat{V}] \neq 0, \quad (\text{A.1})$$

az összeg exponenciális függvényét nehéz kiszámítani, hiszen

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \neq e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}t}. \quad (\text{A.2})$$

Feynman eredeti meglátása az, hogy eléggé rövid ε időre az exponenciális operátor közelítőleg mégiscsak szorzatra esik szét:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{T}+\hat{V})\varepsilon} &\approx 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{T}\varepsilon - \frac{i}{\hbar}\hat{V}\varepsilon + O(\varepsilon^2) \\ &\approx \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{T}\varepsilon\right) \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{V}\varepsilon\right) + O(\varepsilon^2) \\ &\approx e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\varepsilon} + O(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Ebből ered az az ötlet, hogy számítsuk ki először ilyen rövid időkre az időfejlődés unitér operátorának pontos kifejezését, majd ilyen kis lépésekből rakjuk össze a véges idő alatt lejátszódó teljes fejlődést.

Maradjunk egy dimenzióban, és számoljuk ki a két faktor mátrixelemeit koordináta-reprezentációban. A potenciális energia triviális:

$$\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\varepsilon}|y\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}V(x)\varepsilon} \delta(x-y). \quad (\text{A.4})$$

A kinetikus energiával kell még egy kicsit dolgozni. Ez a tényező impulzus-reprezentációban triviális:

$$\langle p|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\varepsilon}|p'\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\varepsilon} \delta(p-p'). \quad (\text{A.5})$$

Ebből, felhasználva, hogy¹² egy dimenzióban $\langle x|p\rangle = \exp[(i/\hbar)px]/\sqrt{2\pi\hbar}$, végül a szokásos módon kiszámítva a kapott Gauss-integrált,

$$\begin{aligned}\langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\varepsilon}|y\rangle &= \int dp \int dp' \langle x|p\rangle \langle p|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\varepsilon}|p'\rangle \langle p'|y\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}\left[p(x-y) - \frac{p^2}{2m}\varepsilon\right]} \\ &= \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\varepsilon}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\left(\frac{x-y}{\varepsilon}\right)^2\varepsilon}.\end{aligned}\quad (\text{A.6})$$

Tegyük hozzá a potenciális energiából eredő faktort:

$$K_\varepsilon(x,y) := \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{T}\varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\varepsilon}|y\rangle = \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\varepsilon}} e^{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x-y}{\varepsilon}\right)^2 - V(y)\right]\varepsilon}, \quad (\text{A.7})$$

ahol a K jelölés a „kernel” szó rövidítése; ez a függvény a magfüggvénye annak az (unitér) integráltranszformációnak, amely a $\Psi(x,t) = \langle x|\Psi(t)\rangle$ hullámfüggvény rövid ε idő alatti fejlődését írja le:¹³

$$\Psi(x,t+\varepsilon) = \int dy K_\varepsilon(x,y) \Psi(y,t). \quad (\text{A.8})$$

Amiért ez az egész különösen érdekes, az a következő: ha $\varepsilon \rightarrow 0$, akkor az (A.7) egyenlet jobboldalának kitevőjében $(x-y)/\varepsilon \rightarrow \dot{x}$, ami a klasszikus sebesség. Ekkor pedig a kitevőben éppen az $m(\dot{x})^2/2 - V(x) = \mathcal{L}(\dot{x},x)$ kombináció jelenik meg, vagyis a Hamilton-operátorból kiindulva, a klasszikus Lagrange-függvényhez érkeztünk!

Ennek óriási heurisztikus ereje van: a Lagrange-függvény *skalár* a klasszikus mechanikától az elektrodinamikán át bármilyen térelméletig, invariáns minden szimmetriatranszformációval szemben, beleértve a Lorentz-transzformációt is, így ideális kiindulópontja minden szellemi expedíciónak a fizika ismeretlen tartományainak felderítésére.¹⁴

¹² Lásd a (6.47) egyenletet.

¹³ Ez erősen emlékeztet arra, ahogy optikai diffrakcióban a hullámfrontot Huyghens–Fresnel elve szerint a front minden pontjából kiinduló, a megfigyelés helyén egymással interferáló gömbhullámok eredője viszi tovább. A szerezésben természetesen $K_\varepsilon(x,y)$ az y pontból kiinduló, x helyen megfigyelt gömbhullám.

¹⁴ A pályaintegrált először a valószínűségi számításban, sztochasztikus folyamatok leírására vezette be Norbert Wiener; azt, hogy kvantummechanikára is alkalmazható, Feynmantól lényegében függetlenül egy másik matematikus, Mark Kac is felismerte, a kvantumelmélet alkalmazásainak és kiterjesztéseinek univerzális háttérfilozófiájává azonban Feynman munkája tette.

Térjünk vissza eredeti célunkhoz: rakjuk össze a véges t ideig tartó unitér fejlődésnek megfelelő

$$\Psi(x, t) = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \Psi(0) \rangle = \int K_t(x, y) \Psi(y, 0) dy \quad (\text{A.9})$$

integráltranszformáció

$$K_t(x, y) = \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | y \rangle \quad (\text{A.10})$$

magfüggvényét N egymás utáni, egyenként $\varepsilon = t/N$ hosszúságú szakaszból, használjuk az (A.7) formulát, és a végén vegyük az $N \rightarrow \infty$ határátmenetet:

$$K_t(x, y) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \frac{t}{N}} \right)^{N/2} \times \int dx_{N-1} dx_{N-2} \cdots dx_1 \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{t/N} \right)^2 - V(x_n) \right] \frac{t}{N} \right]. \quad (\text{A.11})$$

Tulajdonképpen elérkeztünk a végeredményhez, de így még egy kissé bonyolultnak látszik, ezért beszéljük meg, mit is látunk a végső formulában. A 0-tól t -ig egymást követő $t' = n\varepsilon$ időkhöz tartozó $y, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x$ pontok egy $x'(t')$ pályát rajzolnak ki, és mi az összes lehetséges pályákra integrálunk. Az integrandus kitevőjében, ahogy már mondtuk, a pálya menti klasszikus mozgás Lagrange-függvénye jelenik meg, mégpedig idő szerint integrálva. Arról pedig tudjuk, hogy a klasszikus mechanikából ismert

$$S[x'(t')] = \int_{0,y}^{t,x} \mathcal{L}(x', x') dt' \quad (\text{A.12})$$

hatásfüggvényt állítja elő, amely egy adott $x'(t')$ pályán való végighaladás funkcionálja. Mindezek felhasználásával a (A.11) eredmény szokásos, tömör írásmódja:

$$K_t(x, y) = \int_y^x \mathcal{D}x' \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{0,y}^{t,x} \mathcal{L}(x', x') dt' \right] = \int_y^x \mathcal{D}x' e^{\frac{i}{\hbar} S[x'(t)]}, \quad (\text{A.13})$$

ahol a $\mathcal{D}x'$ jelölés fejezi ki az idő felszabdalását kis intervallumokra, majd mindegyik osztásponton a koordinátára való végigintegrálást, végül a felszabdalás finomítását minden határon túl: mindazokat a lépéseket, amelyekkel az (A.11) egyenlet a pályákra való integrálást végrehajtja.

A félklasszikus határesetben az S hatás „klasszikus” méretű: $S \gg \hbar$, amit formálisan a $\hbar \rightarrow 0$ határátmenet fejez ki. Ilyenkor a pályaintegrál vadul oszcillál, kivéve ott, ahol az $S[x'(t')]$ hatásfüggvény szélsőértékei vannak: a *legkisebb hatás* Hamilton-elvének megfelelő, klasszikus pályákon, ahol a hatás variációja eltűnik: $\delta S = 0$. Ebben a határesetben tehát csak a klasszikus pályák adnak járulékot a kvantummechanikai időfejlődésbe.

A kapott határeset azonban *fél*klasszikus, nem teljesen klasszikus: amennyiben több extrémális pálya létezik, pl. egy kétrés-interferenciakísérlésben a két résen áthaladó egy-egy pálya, ezek mind kiválasztódnak, megmaradnak, és amplitúdóik összeadódásával interferálnak is.

Maga az extrémális pályák kiválasztása is a hullámok nyelvén igazán szemléletes: S/\hbar az adott pályán haladó hullám fázisa. Az extrémális pálya közelében ez nem változik: a szomszédos pályák sokaságán ugyanazzal a fázissal fut be a hullám, egymást erősítve, masszív hullámfrontot alkotva. Ugyanez a mechanizmusa annak is, ahogy a fénysugár kialakul a fényhullámokból, a Fermat-elvnek megfelelő extrémális pályák mentén.

A félklasszikus határesetben, az attól kicsit eltérő „kvantumkorrekciók” megtalálásában, és a félklasszikustól nagyon eltérő, mélyen kvantumos jelenségek világában is Feynman pályaintegrálja nemcsak az elvek megfogalmazásának szép kerete, hanem hatékony technikai eszköz is nehéz feladatok megoldásában.

B. függelék

Ion- és atomcsapdák, lézerhűtés

A 20. század utolsó harmadának kiemelkedő kísérleti teljesítménye volt az egyes ionok és atomok csapdázása, lehűtése és egyedi megfigyelése, amely a koherens kvantumrendszerekkel való kísérletezés új dimenzióját teremtette meg. Az első csapdák készítői, Hans Dehmelt és Wolfgang Paul 1989-ben, az alapállapot közelébe történő lézeres hűtés kidolgozói, Steven Chu, William D. Phillips és Claude Cohen-Tannoudji 1997-ben kaptak Nobel-díjat.

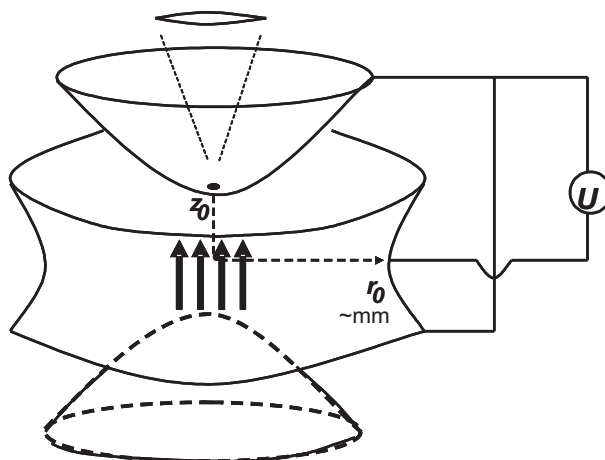
Ionokat a legkönnyebb csapdába fogni, mert rájuk hatnak a könnyen kialakítható erős elektromos terek. Egy pozitív töltésű ion a $\Phi(\vec{r})$ elektromos potenciál minimumában csapdázva marad, ha energiája eléggé kicsi.

A gond ott kezdődik, hogy a potenciálnak nincs minimuma, mivel sztatikus vagy kisfrekvenciájú mezőben $\Delta\Phi \approx 0$, így a potenciálnak legfeljebb nyeregpontja lehet, ami pl. egy kvadrupól-szimmetriájú elrendezésnél egyik irányban minimum, a rá merőleges két irányban maximum. Ettől kezdve két megoldás lehetséges:

1. *Penning-csapda*: egy forgástengely mentén hozunk létre minimumot; a rá merőleges irányban kifutni készülő ionokat pedig erős (1 Tesla nagyságrendű) tengelyirányú mágneses mezővel körpályára kényszerítjük.¹⁵
2. *Paul-csapda*: a befutó és kifutó irányokat periodikusan váltogatjuk. Egy adott frekvenciánál meghatározott tömegű ionok éppen nem tudnak kiszabadulni, mert mire rátérnek a kifutó irányra, addigra az erők visszafordulnak, így mindig fallal találják szemben magukat.

A csapdázott ionok egyedi megfigyelése a rezonancia-fluoreszcencia folyamatával történhet: rezonáns fényel megvilágítva, az elnyelt fényt folyamatosan visszasugározzák; ezt egy CCD kamerára leképezve, a kamera mér-

¹⁵ Penning, a tudományos célú vákuumtechnika egyik megalapozója a harmincas években konstruált ilyen csapdákat, a vákuumot röntő gázatomok ionizálás utáni befogására; modern felhasználását Dehmelt kezdeményezte.



B.1. ábra. Az ioncsapdában a gyűrű és a kupakok között létrehozott feszültség kvadrupól elektromos tere fogja meg az ionokat. A csapdázáshoz szükség van még vagy a tengellyel párhuzamos mágneses térre (ezt jelzik a nyilak: ez a Penning-csapda), vagy az U feszültség előjelének periodikus váltogatására (Paul-csapda). Az ionokat a felső kupakon vágott kis lyukon át figyelik meg; fényüket a lencse egy CCD-kamerára képezi le.

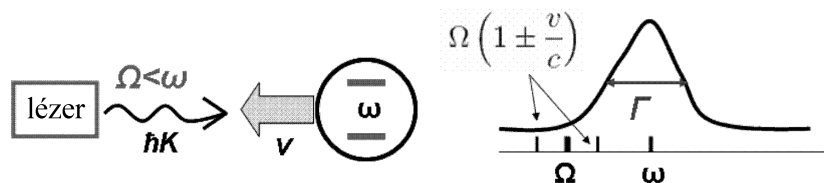
hető jelet ad. Kevésbé erőszakos beavatkozás az ion életébe a nem rezonáns, csak rezonanciához közeli fény szóródásának detektálása.

A kezdeti szenzáció az egyes ionok csapdázása volt; a betöltés úgy történt, hogy nagy vákuumba kis mennyiségben beengedett gázatomokat sugárzással ionizáltak; némelyikük a csapdában rekedt. A későbbi kísérleteknél fontossá vált sok ion egyidejű csapdázása is.

A csapdázás csak a befogott ionok egyidejű hűtésével együtt vált a kvantumfizika jól használható kísérleti technikájává.

Az alapmódszer a *Doppler-hűtés*: egy atomi rezonancia alá hangolt frekvenciájú lézer fényét a szembe futó atom a Doppler-effektus miatt nagyobb frekvenciájúnak látja, így a rezonanciához közelítve, nagyobb valószínűséggel nyeli el. Az elnyelt foton impulzusa fékezi a mozgást. Hat irányból sugárzó lézerek közül mindig annak a fénye nyelődik el leginkább, amelyikkel az atom szembe halad: az atom mindenképpen ms nagyságrendű idő alatt, $10^5 g$ körüli gyorsulással lefékeződik, mintha nagyon nagy viszkozitású közegben mozogna.¹⁶

¹⁶ Ezért nevezik ezt az elrendezést úgy, hogy *optikai melasz*.



B.2. ábra. Doppler-hűtésnél a rezonancia alá hangolt, szembevilágító lézer fényét az atom a Doppler-effektus miatt nagyobb frekvenciájúnak, rezonanciához közelebbnek látja, elnyeli, és impulzusától lefékeződik.

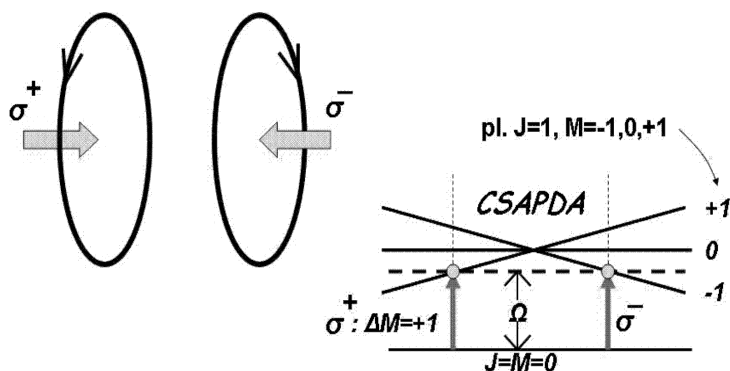
Az elért hőmérsékletet úgy lehet megmérni, hogy a hűtést kikapcsolva, rezonancia-fluoreszcenciával nézzük a hideg Maxwell-sebességeloszlású atomok szétszaladását. A megfigyelések szerint a Doppler-hűtéssel μK hőmérsékleteket lehet elérni, ami jobb a vártnál: a hűtés folyamatáról utóbb kiderült, hogy bonyolultabb az itt elmondottaknál.

A csapdába befogott ionok a csapdában rezeghetnek, és a rezgések kvantáltsága a Doppler-hűtéssel elért hőmérsékleten már jól megmutatkozik. Ekkor további hűtési lehetőségeket jelent a rezgési alnívókra hangolt lézerpárokkal létrehozott Raman-átmenetek felhasználása az alacsonyabb szintek felé való eltolódás kikényszerítésére. Ilyen módon ioncsapdában a rezgési alapállapothoz közeli szintre lehet ionokat lehűteni, ami a kvantum-információkezelés egyik kísérleti megvalósítási lehetőségét kínálja fel; lásd az F. függelékben.

Semleges atomok csapdázása sokkal nehezebb feladatnak látszott, mert náluk nem csak a hűtést, hanem a helybentartást is a Coulomb-erőnél jóval gyengébb fényerőkkel kell megoldani. Viszonylag egyszerűnek és hatékonynak bizonyult azonban Jean Dalibard találmánya, a *magnetooptikai csapda* (MOT: Magneto-Optical Trap). Ez két szembekeringő körárammal létrehozott kvadrupól mágneses mező zéruspontja körül állítja meg az atomokat, az optikai kiválasztási szabályok trükkös felhasználásával: a hatfelől érkező cirkulárisan polarizált lézerfény valahol – a csapdázott térfogat határán – rezonanciába kerül a Zeeman-felhasadó mágneses alnívókkal, és elnyelődve, visszakergeti az atomot.

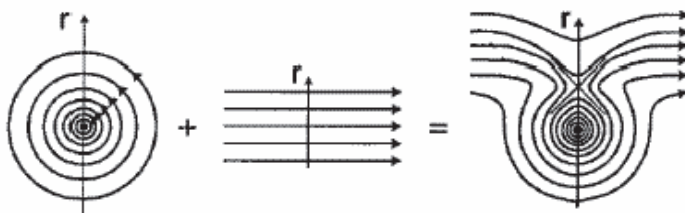
A hűtés előrehaladtával át lehet térni kisebb frekvenciájú lézerekre és ennek megfelelően választott, egymáshoz közelebb eső atomi energiaszintekre.

Adott mágneses alnívókon levő atomokra – már a Stern–Gerlach-effektusból megtanultuk – erőt gyakorol az inhomogén mágneses mező; ezt is lehet csapdázásra használni. Ezt hasznosítja az utóbbi néhány év ígéretes találmánya: a chippek felületén, párolgatott vezetékben folyó áramokkal



B.3. ábra. A magnetooptikai csapdában két köráram által létrehozott inhomogén mágneses mezőben a fotonok ott kényszerítik visszatérésre az atomokat, ahol rezonanciába kerülnek a mágneses alnívókkal.

létrehozott *mágneses mikrocsapda*. Ez a fejlesztés kiszabadítani látszik a csapdázás technikáját a szoba nagyságú vákuumtechnikai laboratóriumokból, és gyakorlati felhasználások lehetőségét kínálja, a nem túl távoli jövőben.



B.4. ábra. A chip-csapdában egy párologtatott vezető szálon folyó áram mágneses terének és egy külső homogén mágneses térnek az eredője egy adott vonalon éppen kioltja egymást; ott csapdázódnak a megfelelő Zeeman-alnívón levő atomok.

C. függelék

Műveletek koherens állapotokkal

A koherens állapotokkal való számítások leggyakrabban használt eszköze a *Baker–Hausdorff formula*:¹⁷

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} = e^{\hat{B}}e^{\hat{A}}e^{+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}, \quad \text{ha } [[\hat{A},\hat{B}],\hat{A}] = [[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}] = 0. \quad (\text{C.1})$$

Érdeemes ezt még néhány átrendezett alakban is megjegyezni: változatlan feltételek mellett

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} = e^{\hat{B}}e^{\hat{A}}e^{[\hat{A},\hat{B}]}. \quad (\text{C.2})$$

A Baker-Hausdorff formula első alkalmazása a koherens állapotokra az, hogy így írhatók:

$$|\alpha\rangle = \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})|0\rangle. \quad (\text{C.3})$$

Ennek igazolására szorzattá kell felbontani az exponenciális operátort,¹⁸ észre kell venni, hogy $\exp(-\alpha^*\hat{a})|0\rangle = |0\rangle$, és használni a harmonikus oszcillátor normált sajátvektoraira vonatkozó (8.13) formulát.

Mielőtt továbbmennénk az igazi alkalmazások felé, ki kell egészítenünk eszköztárunkat. Bár használatuk nem korlátozódik a koherens állapotokra, ugyanennek a csavarhúzókészletnek részei az alábbi összefüggések: az $[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = 1$ felcserélési relációból közvetlenül adódik az \hat{a} és \hat{a}^\dagger operátorok bármilyen, hatványsorral előállítható $f(\hat{a},\hat{a}^\dagger)$ függvényére:¹⁹

$$\begin{aligned} [\hat{a}, f(\hat{a},\hat{a}^\dagger)] &= \frac{\partial f}{\partial \hat{a}^\dagger} \\ [\hat{a}^\dagger, f(\hat{a},\hat{a}^\dagger)] &= -\frac{\partial f}{\partial \hat{a}}. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

¹⁷ Baker, 1902, Hausdorff, 1906, előzmény: Campbell, 1897. Útmutató a levezetéshez: számítsuk ki az $\hat{f}(x) = e^{\hat{A}x}e^{\hat{B}x}$ operátorfüggvény x szerinti deriváltját; az eredményt fejtsük sorba x szerint. A (C.1) egyenletben jelzett feltételek mellett a sorfejtésből csak a lineáris tag marad meg; ez egyszerű differenciálegyenletet ad $\hat{f}(x)$ -re, amelyből – ugyanazon feltételek mellett – a (C.1) eredmény leolvasható.

¹⁸ Keressük ki hozzá a (C.1) gyűjteményből a megfelelő formulát!

¹⁹ Az összefüggést minden hatványra közvetlenül igazolhatjuk.

Hasonlóan adódik a Heisenberg- ill. kölcsönhatási képbeli keltő és eltüntető operátorok (8.38) kifejezésének általánosítása egy tetszőleges, hatványsorral előállítható $f(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ függvényre:

$$e^{i\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}t}f(\hat{a},\hat{a}^\dagger)e^{-i\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}t}=f(\hat{a}e^{-i\omega t},\hat{a}^\dagger e^{i\omega t}). \quad (\text{C.5})$$

Aki idáig eljutott, az már haladónak számít, és hozzáfoghat igazolni, hogy egy időfüggő, de térben állandó külső erő hatására a koherens állapot kiszámítható mozgásba jön, de nem esik szét. Az ilyen erőnek megfelelő potenciális energia az x koordináta lineáris függvénye, ezért – felhasználva a (8.4) formulát – a Hamilton-operátort ilyen alakban vesszük fel:

$$\hat{H}(t)=\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)+\hbar F(t)(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)\equiv\hat{H}_0+\hat{W}(t). \quad (\text{C.6})$$

Térjünk át a jelzett szerezposztás szerinti kölcsönhatási képbe:²⁰

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle &= e^{i\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}t}|\Psi(t)\rangle = \hat{U}_I(t)|\Psi_I(0)\rangle = \hat{U}_I(t)|\Psi(0)\rangle \\ \hat{W}_I(t) &= \hbar F(t)(\hat{a}e^{-i\omega t} + \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}), \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

ahol felhasználtuk a frissen tanult (C.5) formulát. Az unitér időfejlődés operátora a kölcsönhatási képben kielégíti az

$$\frac{d}{dt}\hat{U}_I(t) = -iF(t)(\hat{a}e^{-i\omega t} + \hat{a}^\dagger e^{i\omega t})\hat{U}_I(t) \quad (\text{C.8})$$

operátoregyenletet, az $\hat{U}_I(0) = \mathbb{1}$ határfeltétellel.

A Baker-Hausdorff apparátus birtokában bátran kereshetjük a megoldást ilyen alakban:

$$\hat{U}_I(t) = e^{A(t)}e^{\alpha_I(t)\hat{a}^\dagger}e^{-\alpha_I^*(t)\hat{a}}, \quad (\text{C.9})$$

ahol ránézésre adódik

$$\begin{aligned} \alpha_I(t) &= -i\int_0^t F(t')e^{i\omega t'}dt', \\ \alpha_I^*(t) &= i\int_0^t F(t')e^{-i\omega t'}dt'. \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Az egyetlen, ami nem adódik ránézésre, az az $A(t)$ kitevő. Ennek kiszámítására a (C.9) feltevést a benne szereplő (C.10) függvényekkel be kell helyettesíteni a (C.8) egyenletbe:

$$A\hat{U}_I + \dot{\alpha}\hat{a}^\dagger\hat{U}_I - e^A e^{\alpha_I\hat{a}^\dagger}\dot{\alpha}^*\hat{a}e^{-\alpha_I^*\hat{a}} = (\dot{\alpha}\hat{a}^\dagger - \dot{\alpha}^*\hat{a})\hat{U}_I. \quad (\text{C.11})$$

²⁰ Lásd a következő függelékét!

Kiejtve, ami kiejthető, ez marad:

$$A\hat{U}_I + \dot{\alpha}^* e^A \left[\hat{a}, e^{\alpha_I \hat{a}^\dagger} \right] e^{-\alpha_I^* \hat{a}} = A\hat{U}_I + \dot{\alpha}^* \alpha \hat{U}_I = 0, \quad (\text{C.12})$$

ahol a kommutátor kiszámítására felhasználtuk a (C.4) azonosságot. Végül ezt kapjuk:

$$A(t) = - \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' F(t') F(t'') e^{-i\omega(t'-t'')}. \quad (\text{C.13})$$

Még két feladatunk van: összehozni a (C.9) operátor két exponenciális faktorát egyetlen exponenciálisba (természetesen a Baker-Hausdorff egyenlőséggel), végül visszatérni a Schrödinger-képbe. A végeredmény, melynek ellenőrzését az olvasóra hagyom:

$$\hat{U}(t) = \exp \left(A(t) + \frac{|\alpha(t)|^2}{2} \right) \exp [\alpha(t)\hat{a}^\dagger - \alpha^*(t)\hat{a}], \quad (\text{C.14})$$

ahol $A(t)$ -t a (C.13) egyenlet adja meg, és

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= \alpha_I(t) e^{-i\omega t} = -i \int_0^t F(t') e^{-i\omega(t-t')} dt', \\ \alpha^*(t) &= \alpha_I^*(t) e^{i\omega t} = i \int_0^t F(t') e^{i\omega(t-t')} dt'. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Amint már a (C.3) egyenletből megtanultuk, a (C.14) unitér operátor a harmonikus oszcillátort alapállapotából átviszi az $|\alpha(t)\rangle$ koherens állapotba. Ezt akartuk belátni.²¹

A koherens állapotok fontos tulajdonsága, hogy bár normáltak, de nem ortogonálisak, és ennek megfelelően nem is teljes, hanem „túlteljes” rendszert alkotnak. Érdeemes megjegyezni a skalárszorzatukat, amely a fenti számítások mintájára triviálisan adódik:

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \exp \left(-\frac{1}{2} |\alpha|^2 - \frac{1}{2} |\beta|^2 + \alpha \beta^* \right); \quad |\langle \beta | \alpha \rangle|^2 = e^{-|\alpha - \beta|^2} \quad (\text{C.16})$$

Ez csak ízelítő volt a koherens állapotok kezeléséből. Továbbiakat az elméleti kvantumoptikával foglalkozó irodalomban talál az Olvasó.

²¹ Az olvasóra hagyom annak ellenőrzését, hogy a (C.14) kifejezés elején álló számfaktor egységnyi nagyságú komplex szám, amely az állapotvektornak csak a fázisát változtatja meg – igaz, hogy ez a fázis egy cseppet sem triviális módon függ az erő időbeli változásától, amit egy megfelelően megtervezett interferenciakísérlettel akár igazolni is lehet.

D. függelék

A kölcsönhatási kép

Az időfüggő perturbációs számítás Dirac által bevezetett, az állandók variálásán alapuló módszerét (13.2.1. alpont) tömör operátoros írásmóddal is lehet mondani; így jutunk el a *kölcsönhatási képhez*, amely a Schrödinger- és Heisenberg-kép közötti közbenső helyet tölt be. Ez az operátoros írásmód kiinduló pontjává vált egy roppant hatékony módszernek a perturbációs sorfejtés magasabb fokú tagjainak kezelésére. Ezt a módszert, amely utóbb mind a relativisztikus kvantum-térelméletben, mind a soktest-rendszerek kvantumelméletében nélkülözhetetlennek bizonyult, Tomonaga kezdeményezte, első részletes kidolgozásában Feynman, Schwinger és Dyson vett részt.

Itt csak a kiinduló formulákat foglaljuk össze. A kölcsönhatási képbe ez az unitér transzformáció visz át a Schrödinger-képből:

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle, \quad (\text{D.1})$$

ami a Dirac-féle (13.22) definíció operátoros megfelelője. Az I index („interaction” = kölcsönhatás) a kölcsönhatási kép szokásos jele; amit nem jelölünk, az a Schrödinger-kép.

Ugyanez az unitér transzformáció az operátorokat így módosítja:

$$\hat{A}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \hat{A}(t) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}, \quad (\text{D.2})$$

természetesen ez vonatkozik a perturbáció $\hat{W}(t)$ operátorára is. A fenti formula idő szerinti deriválásával megkapjuk a transzformált operátorok mozgásegyenletét:

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{A}_I(t)] + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}, \quad (\text{D.3})$$

ahol a második tag az $\hat{A}(t)$ Schrödinger-operátor explicit időfüggését veszi figyelembe.

A Schrödinger-egyenletből kapjuk meg a kölcsönhatási képbeli állapotvektor mozgásegyenletét:

$$|\dot{\psi}_I(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{W}_I(t) |\psi_I(t)\rangle, \quad (\text{D.4})$$

ami a Dirac-féle (13.23) egyenlet megfelelője. Ebben az egyenletben \hat{H}_0 nem jelenik meg explicit módon, csak a $\hat{W}(t) \Rightarrow \hat{W}_I(t)$ transzformáción keresztül, ami – akár csak Dirac eredeti módszerében – a perturbálatlan mozgásnak megfelelő oszcillációkkal „gyengíti” a perturbáció időben felhalmozódó hatását.

A (D.4) egyenlet az, amelynek perturbációs megoldására megszülettek a bevezetőben említett hatékony módszerek, amelyek kezelni tudják a \hat{H}_0 és $\hat{W}(t)$ fel nem cserélhető voltából eredő bonyodalmakat. Ennek részletei túlmennek a jelen könyv keretein.

Itt érdemes megemlíteni, hogy a harmonikus oszcillátorok dinamikája igen nehéz feladatok tárgyalásánál is elegánsan meg tudja kerülni ezeket a bonyodalmakat az un. Baker–Hausdorff egyenlőség felhasználásával. Ezt a módszert, amelyet kiterjedten használ a kvantumoptika elmélete, a C. függelékben írtuk le.

E. függelék

Dekoherencia: a master-egyenlet

A környezettel való összefonódásból eredő dekoherencia legelterjedtebb elméleti tárgyalásmódja a *master-egyenlet*. Ez egy részrendszer ($S = \text{system}$) és egy (hő-)tartály = környezet ($R = \text{réservoir}$; Feynman szerint: $R = \text{the Rest of the world}$) együttes sűrűségmátrixának mozgásegyenlete, visszavetítve a részrendszerre = "trészelve" a környezetre.

Részrendszer és környezete együttes Hamilton-operátorát ilyen alakba írhatjuk:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}. \quad (\text{E.1})$$

Legyen $S+R$ sűrűségoperátora $\hat{\chi}(t)$, S sűrűségoperátora pedig $\hat{\rho}(t) = \text{Tr}_R[\hat{\chi}(t)]$. A teljes sűrűségoperátor kielégíti a Neumann-egyenletet:

$$\partial_t \hat{\chi} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\chi}]. \quad (\text{E.2})$$

Térjünk át a kölcsönhatási képre (lásd a D. függelék):

$$\tilde{\chi}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_S + \hat{H}_R)t} \hat{\chi}(t) e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_S + \hat{H}_R)t}; \quad (\text{E.3})$$

itt a Neumann-egyenlet így alakul:

$$\partial_t \tilde{\chi} = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_{SR}(t), \tilde{\chi}(t)], \quad (\text{E.4})$$

ahol

$$\tilde{H}_{SR}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_S + \hat{H}_R)t} \hat{H}_{SR}(t) e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_S + \hat{H}_R)t}. \quad (\text{E.5})$$

Az egyenlet megoldását $\tilde{H}_{SR}(t)$ hatványai szerinti sorfejtés alakjában keressük, és a második rendnél meg akarunk állni (Born-közelítés). Ez *gyenge dekoherenciának* felel meg, ami magától a természetben nem fordul elő, csak a gondosan végrehajtott (nagyvákuum, mély hőmérséklet, tiszta anyagok) kísérletekben, amelyeknek célja koherens kvantumrendszerek közel unitér fejlődésének megfigyelése, és esetleges kvantuminformatikai alkalmazása.

A Born-közelítés elegáns módja az, hogy egy kétlépéses iterációval magát az (E.4) egyenletet hozzuk olyan alakra, hogy a Born-közelítés már triviális legyen (ez némiképpen emlékeztet a szóráselméleti Lippmann–Schwinger módszerre):

1. idő szerint integrálva 0-tól t -ig, alakítsuk a differenciálegyenletet integrálegyenletté:

$$\tilde{\chi}(t) = \tilde{\chi}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\chi}(t')], \quad (\text{E.6})$$

2. ezt helyettesítsük be az eredeti egyenlet jobboldalára:

$$\dot{\tilde{\chi}} = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_{SR}(t), \tilde{\chi}(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' [\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\chi}(t')]]. \quad (\text{E.7})$$

Most jön a Born-közelítés: a jobboldalon $\tilde{\chi}(t')$ -t közelítsük a kölcsönhatás nélküli időfejlődésével! Ez lényegesen függ a kezdeti sűrűségmátrixtól (mint minden irreverzibilis folyamatnál): ha

$$\tilde{\chi}(0) = \hat{\chi}(0) = \hat{\rho}(0)\hat{R}_0 \quad (\text{E.8})$$

és \hat{R}_0 a környezetnek olyan (termikus egyensúlyi) állapota, amely a részrendszer \hat{H}_{RS} perturbáló hatása nélkül időben nem változna, akkor a Born-közelítésnek az felel meg, hogy \hat{R}_0 időfejlődését elhanyagoljuk:

$$\tilde{\chi}(t) \approx \tilde{\rho}(t)\hat{R}_0. \quad (\text{E.9})$$

Helyettesítsük ezt be az (E.7) egyenletbe, és trészeljünk a környezetre, hogy zárt egyenletet kapjunk $\tilde{\rho}(t)$ -re:

$$\dot{\tilde{\rho}} = -\frac{i}{\hbar} (Tr_R[\tilde{H}_{SR}(t), \hat{R}_0]) \tilde{\rho}(0) - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' Tr_R[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t')\hat{R}_0]]. \quad (\text{E.10})$$

A jobboldal első tagjában szereplő trészelt kommutátor általában eltűnik (a részrendszer a környezetet megperturbálja, de normáját nem borítja fel), így a következő közbenső eredményt kapjuk:

$$\dot{\tilde{\rho}} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' Tr_R[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t')\hat{R}_0]]. \quad (\text{E.11})$$

Ez már egy master-egyenlet, vagyis a folyamatot vezérlő („master”) $\hat{\rho}(t)$ komponens fejlődését leíró egyenlet. Ezt azonban még tovább szokás közelíteni, ami valójában nem csak szokás dolga, hanem hozzá is tartozik a Born-közelítéshez: ez a lépés a *markovi közelítés*. Ez azt a felismerést jelenti, hogy

$\tilde{\rho}$ fejlődését a *gyenge* \hat{H}_{SR}^2 -hez tartozó lassú időskála határozza meg, viszont a különböző időkből vett $\tilde{H}_{SR}(t)$ faktorok az *erős* \hat{H}_S , \hat{H}_R -eknek megfelelő (E.5) időfejlődés szerint gyorsan pörögnek, és fáziskeveredéssel gyorsan elhalnak, ahogy t és t' eltávolodik egymástól. Ezért az időintegrálokból $\tilde{\rho}(t)$ kiemelhető, és a t' szerinti integrálást 0 helyett $-\infty$ -től indíthatjuk, úgymint csak a t -hez közeli vége ad járulékot:

$$\dot{\tilde{\rho}}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t dt' Tr_R[\tilde{H}_{SR}(t), [\tilde{H}_{SR}(t'), \tilde{\rho}(t)\hat{R}_0]] \quad (\text{E.12})$$

Ennek a markovi master-egyenletnek a megoldásait fogjuk keresni konkrét modellszisztemeken. Ez az irányzat, amely Felix Bloch magrezonanciára kidolgozott egyenleteiből indult ki és eljutott a kvantumoptikai és egyéb koherens kvantumrendszerek szinte minden területére, annyiban megy túl a hagyományos statisztikus fizika témaválasztásain, hogy nemcsak a valószínűségek időbeli fejlődését követi, hanem a sűrűségmátrix nemdiagonális elemeiben kifejezett kvantummechanikai koherencia változásait is leírja.

E.1. Kétállapotú rendszer oszcillátor-fürdőben: a spin-bozon modell

Ez a fontos modell jelenthet kétállapotú atomot az általa kisugárzott vagy elnyelt fotonokhoz csatolva (igazából az atomnak sok állapota van, de nagyjából üregrezonátorba helyezve ki lehet választani két meghatározott állapotot), de lehet egy külső mágneses térbe helyezett feles magspin is, kölcsönhatásban a környező kristály rácsrezgéseivel (fononjaival).

A kétállapotú rendszer önmagában mindig „kvázispinnek” tekinthető és spinoperátorokkal írható le:

$$\hat{H}_S = \hbar \frac{\omega_0}{2} \hat{\sigma}_z. \quad (\text{E.13})$$

Az oszcillátorokból álló környezet, amelynek gerjesztései bozonok (fotonok vagy fononok):

$$\hat{H}_R = \hbar \sum_j \omega_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j. \quad (\text{E.14})$$

A kettő csatolása nem triviális. A csatolás abban mutatkozik meg, hogy átmenetek keletkeznek a két atomi állapot között, ezt a $\hat{\sigma}_x$ operátor írja le, és az átmenetek erőssége függ az oszcillátorok kitérésétől. Ez a függés egyszerű modellben lineáris:

$$\hat{H}_{SR}^0 = \hbar \hat{\sigma}_x \sum_j (\kappa_j^* \hat{a}_j^\dagger + \kappa_j \hat{a}_j), \quad (\text{E.15})$$

ahol a „0” felső index azt jelenti, hogy a csatolási operátornak nem ezt az alakját fogjuk használni, hanem még leegyszerűsítjük az un. „forgóhullám-közelítéssel”. Ehhez azonban előbb térjünk át a kölcsönhatási képbe:

$$\begin{aligned}\tilde{a}_j(t) &= e^{i\omega_j t \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j} \hat{a}_j e^{-i\omega_j t \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j} = \hat{a}_j e^{-i\omega_j t}, \\ \tilde{a}_j^\dagger(t) &= e^{i\omega_j t \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j} \hat{a}_j^\dagger e^{-i\omega_j t \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j} = \hat{a}_j^\dagger e^{i\omega_j t},\end{aligned}\quad (\text{E.16})$$

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}_x(t) &= e^{i\frac{\omega_0 t}{2} \hat{\sigma}_z} \hat{\sigma}_x e^{-i\frac{\omega_0 t}{2} \hat{\sigma}_z} \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega_0 t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\omega_0 t}{2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega_0 t} \\ e^{-i\omega_0 t} & 0 \end{pmatrix} = e^{i\omega_0 t} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + e^{-i\omega_0 t} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= e^{i\omega_0 t} \hat{\sigma}_+ + e^{-i\omega_0 t} \hat{\sigma}_-.\end{aligned}\quad (\text{E.17})$$

Helyettesítsük be ezeket a kifejezéseket a (E.15) egyenletbe:

$$\tilde{H}_{SR}^0(t) = \hbar (e^{i\omega_0 t} \hat{\sigma}_+ + e^{-i\omega_0 t} \hat{\sigma}_-) \sum_j \left(\kappa_j^* \hat{a}_j^\dagger e^{i\omega_j t} + \kappa_j \hat{a}_j e^{-i\omega_j t} \right). \quad (\text{E.18})$$

Vegyük észre, hogy a szorzat tagjai között vannak, amelyekben az össze-szorozódó exponenciálisok egy irányba pörögnek - ezek a master-egyenletbeli időintegrálásban közel 0 járulékokat adnak, és vannak, amelyek $\omega \approx \omega_j$ rezonanciák közelében lassan változó szorzatot adnak. Az integrálban várhatóan az utóbbiak dominálnak. Tartsuk meg mindjárt kezdettől fogva csak ezeket a kombinációkat, és vessük el a gyorsan pörgőket:²² ez a *forgóhullám-közelítés*:

$$\hat{H}_{SR} = \hbar \left(\hat{\sigma}_- \sum_j \kappa_j^* \hat{a}_j^\dagger + \hat{\sigma}_+ \sum_j \kappa_j \hat{a}_j \right), \quad (\text{E.19})$$

ahol az első tag a kétállapotú rendszer foton (fonon) kisugárzásával járó legerjesztésének felel meg, a második pedig foton (fonon) elnyelésével járó gerjesztésnek. A fenti csatolási Hamilton-operátor kölcsönhatási képbeli megfelelője:

$$\tilde{H}_{SR}(t) = \hbar (\hat{\sigma}_- \tilde{\Gamma}^\dagger(t) + \hat{\sigma}_+ \tilde{\Gamma}(t)), \quad (\text{E.20})$$

ahol

$$\tilde{\Gamma}(t) = \sum_j \kappa_j \hat{a}_j e^{i(\omega_0 - \omega_j)t}. \quad (\text{E.21})$$

²² Az elhagyott tagok csak a Born-közelítésnél magasabb rendekben adnak járulékokat.

Amint azt hamarosan meglátjuk, a forgóhullám-közelítés ördögi tulajdonsága, hogy vele a Born-közelítésű markovi master-egyenletben minden zárt alakban végigszámolható, hátránya viszont az, hogy a Born-közelítésen túl már egyáltalán nem igaz.

Helyettesítsük vissza a kapott (E.20) kifejezést a (E.12) egyenletbe:

$$\dot{\tilde{\rho}}(t) = - \int_{-\infty}^t dt' Tr_R [(\hat{\sigma}_- \tilde{\Gamma}^\dagger(t) + \hat{\sigma}_+ \tilde{\Gamma}(t)), [(\hat{\sigma}_- \tilde{\Gamma}^\dagger(t') + \hat{\sigma}_+ \tilde{\Gamma}(t')), \tilde{\rho}(t) \hat{R}_0]]. \quad (\text{E.22})$$

A továbbiakban ezt az egyenletet fogjuk tovább alakítani, a $\tilde{\Gamma}(t)$ operátor (E.21) spektrális felbontásának segítségével. Kifejtjük a dupla kommutátort, és tagonként szétválogatjuk az atomra és a környezetre vonatkozó tényezőket. Észrevesszük, hogy az utóbbiak $\langle \tilde{\Gamma}^\dagger(t) \tilde{\Gamma}(t') \rangle$ és ehhez hasonló tényezőket adnak, ahol az átlagolás a környezet \hat{R}_0 kezdeti sűrűségmátrixa szerint történik. Feltéve, hogy a környezet termikus egyensúlyban van, a spektrális felbontásból ilyen átlagokat kell kiszámítanunk:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} \rangle &= \delta_{jj'} \bar{n}(\omega_j) = \delta_{jj'} (e^{\beta \hbar \omega_j} - 1)^{-1}, \\ \langle \hat{a}_j \hat{a}_{j'}^\dagger \rangle &= \delta_{jj'} (\bar{n}(\omega_j) + 1); \\ \langle \hat{a}_j \hat{a}_{j'} \rangle &= \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'}^\dagger \rangle = 0. \end{aligned} \quad (\text{E.23})$$

Az utóbbi miatt²³ csak az egy $\tilde{\Gamma}^\dagger$ -t és egy $\tilde{\Gamma}$ -t tartalmazó átlagok maradnak.

További egyszerűsítés kedvéért szorítkozzunk $T = 0$ hőmérsékletre; akkor

$$\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} \rangle = 0, \quad \langle \hat{a}_j \hat{a}_{j'}^\dagger \rangle = \delta_{jj'} : \quad (\text{E.24})$$

csak olyan folyamatok lehetségesek, amikor az atom először emittál valamit a környezetbe, azután visszaabszorbeálja (az „először” itt nem időargumentumot, hanem operátor-sorrendet jelent!!). Az (E.22) egyenlet integrandusában tehát (figyelembe véve a – előjelet is) ezek a tagok maradnak:

$$- \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- \tilde{\rho} Tr_R (\tilde{\Gamma}(t) \tilde{\Gamma}^\dagger(t') \hat{R}_0) = - \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- \tilde{\rho} \langle \tilde{\Gamma}(t) \tilde{\Gamma}^\dagger(t') \rangle \quad (\text{E.25a})$$

$$+ \hat{\sigma}_- \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+ Tr_R (\tilde{\Gamma}^\dagger(t) \hat{R}_0 \tilde{\Gamma}(t')) = + \hat{\sigma}_- \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+ \langle \tilde{\Gamma}(t') \tilde{\Gamma}^\dagger(t) \rangle \quad (\text{E.25b})$$

$$+ \hat{\sigma}_- \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+ Tr_R (\tilde{\Gamma}^\dagger(t') \hat{R}_0 \tilde{\Gamma}(t)) = + \hat{\sigma}_- \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+ \langle \tilde{\Gamma}(t) \tilde{\Gamma}^\dagger(t') \rangle \quad (\text{E.25c})$$

$$- \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- Tr_R (\hat{R}_0 \tilde{\Gamma}(t') \tilde{\Gamma}^\dagger(t)) = - \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- \langle \tilde{\Gamma}(t') \tilde{\Gamma}^\dagger(t) \rangle \quad (\text{E.25d})$$

²³ Az utolsó egyenlet pl. áramló szuperfolyékony környezetben vagy „préselt” (squeezed) sugárzási térben nem is igaz, csak közönséges termikus egyensúlyban.

Most vegyük észre, hogy a nyolc egyenlet jobboldalán csak kétféle átlag szerepel, ezeket kell a master-egyenletben t' szerint integrálni:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t) \tilde{\Gamma}^\dagger(t') \rangle &= \int_{-\infty}^t dt' \sum_j |\kappa_j|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_j)(t-t')} \\ &= \int_0^\infty d\tau \sum_j |\kappa_j|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_j)\tau}, \\ \int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t') \tilde{\Gamma}^\dagger(t) \rangle &= \int_{-\infty}^t dt' \sum_j |\kappa_j|^2 e^{-i(\omega_0 - \omega_j)(t-t')} \\ &= \int_0^\infty d\tau \sum_j |\kappa_j|^2 e^{-i(\omega_0 - \omega_j)\tau}\end{aligned}\quad (\text{E.26})$$

Most kerül elő az a tipikus trükkorozat, ami több, mint trükk, mert a lényegét hordozza. Mindenekelőtt feltesszük, hogy az R környezet makroszkopikus, ezért frekvenciaspektruma olyan sűrű, hogy a megfigyelés Δt időskáláján folytonosnak tekinthető,²⁴ ezért az összeget integrállá alakíthatjuk, bevezetve az ω_j frekvenciák spektrumának kisímtott $g(\omega_j)$ sűrűségét, és feltéve (ez aztán már tényleg csak matematikai kényelem, de konkrét esetekben teljesülni szokott), hogy a csatolási együtthatók is sima függvényei a frekvenciának: $|\kappa_j|^2 \approx |\kappa(\omega_j)|^2$,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t) \tilde{\Gamma}^\dagger(t') \rangle &= \int_0^\infty d\tau \int d\omega' g(\omega') |\kappa(\omega')|^2 e^{i(\omega_0 - \omega')\tau}, \\ \int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t') \tilde{\Gamma}^\dagger(t) \rangle &= \int_0^\infty d\tau \int d\omega' g(\omega') |\kappa(\omega')|^2 e^{-i(\omega_0 - \omega')\tau}.\end{aligned}\quad (\text{E.27})$$

Az integrandus feltételezett ω -beli simaságából következik, hogy $\tau \rightarrow \infty$ esetén a belső integrál elég gyorsan tart 0-hoz, így nem változik, ha megszorozzuk egy $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} e^{-\varepsilon\tau}$ faktorial. Akkor viszont már a két integrálás fecserélhető, és felhasználhatjuk, hogy

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty d\tau e^{(\pm i\Omega - \varepsilon)\tau} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{-1}{\pm i\Omega - \varepsilon} = \pi \delta(\Omega) \pm i \mathcal{P} \frac{1}{\Omega}, \quad (\text{E.28})$$

amivel

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t) \tilde{\Gamma}^\dagger(t') \rangle &= \frac{\gamma}{2} - i\Delta, \\ \int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t') \tilde{\Gamma}^\dagger(t) \rangle &= \frac{\gamma}{2} + i\Delta,\end{aligned}\quad (\text{E.29})$$

²⁴ Vagyis: $\Delta\omega\Delta t < 1$: az időskála rövidebb az évmilliárdos „Poincaré-ciklusnál”.

ahol

$$\begin{aligned}\gamma &= 2\pi g(\omega_0)|\kappa(\omega)|^2, \\ \Delta &= \mathcal{P} \int d\omega' \frac{g(\omega')|\kappa(\omega')|^2}{\omega_0 - \omega'},\end{aligned}\quad (\text{E.30})$$

és \mathcal{P} az integrál főértékét jelenti. Ezeket behelyettesítve az (E.26) egyenletek megfelelő soraiba, végülis ezt kapjuk:

$$\dot{\rho} = (-\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- \tilde{\rho} + \hat{\sigma}_- \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+) \left(\frac{\gamma}{2} - i\Delta\right) + (\hat{\sigma}_- \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+ - \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-) \left(\frac{\gamma}{2} + i\Delta\right), \quad (\text{E.31})$$

vagyis rendezve:

$$\dot{\rho} = -i\frac{\Delta}{2} [\hat{\sigma}_z, \tilde{\rho}] - \frac{\gamma}{2} (\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- \tilde{\rho} + \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- - 2\hat{\sigma}_- \tilde{\rho} \hat{\sigma}_+) \quad (\text{E.32})$$

ahol felhasználtuk, hogy $\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \hat{\sigma}_z)$.

Már csak egy lépés van hátra: visszatérni kölcsönhatásból Schrödinger-képbé; az eredmény

$$\partial_t \hat{\rho} = -i\frac{\omega}{2} [\hat{\sigma}_z, \hat{\rho}] - \frac{\gamma}{2} (\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- - 2\hat{\sigma}_- \hat{\rho} \hat{\sigma}_+), \quad (\text{E.33})$$

ahol

$$\omega = \omega_0 + \Delta. \quad (\text{E.34})$$

A kapott egyenletből két dologra figyeljünk:

- kiderült Δ jelentése: ez a kétállapotú rendszer ω sajátfrekvenciáját re-normáló *Lamb-shift*,
- a második tagnak jellegzetes, ún. Lindblad-féle szerkezete van, ami a master-egyenlet kettős kommutátoraiból ered.

Ha megtartottuk volna a csak véges hőmérsékleten fellépő, $\langle \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \rangle$ -t tartalmazó járulékokat, akkor további hasonló tagokat kaptunk volna más operátorokkal, amelyekbe beolvaszthatók lennének a hozzájuk tartozó együtthatók. Így a markovi master-egyenletek általános Lindblad-féle alakját kapjuk:

$$\partial_t \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}] - \sum_k \left(\hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k - 2\hat{L}_k \hat{\rho} \hat{L}_k^\dagger \right), \quad (\text{E.35})$$

ahol \hat{L}_k a *Lindblad-operátorokat* jelöli. Lindblad azért érdekelte ki, hogy ezt az egyenlet-típust az ő nevéhez kapcsolják, mert a Born-közelítésnél általánosabb feltételek mellett (markovi evolúció, félcsoport-tulajdonsággal) bizonyította be kötelező érvényességét. A Lindblad-alak fontos tesztje a mikroszkopikus indoklás nélkül felírt, ún. félfenomenologikus master-egyenleteknek, amelyeket sok területen használnak.

Térjünk vissza az (E.33) egyenletre, és írjuk ki 2×2 -es mátrix-egyenlet alakjában. A mátrixszorzásokat elvégezve ezt kapjuk:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\gamma \rho_{11} & (-i\omega - \frac{\gamma}{2})\rho_{12} \\ (i\omega - \frac{\gamma}{2})\rho_{21} & \gamma \rho_{11} \end{pmatrix} \quad (\text{E.36})$$

aminek a megoldása:

$$\rho_{11}(t) = 1 - \rho_{22}(t) = \rho_{11}(0)e^{-\gamma t}, \quad (\text{E.37})$$

$$\rho_{12}(t) = (\rho_{21}(t))^* = \rho_{12}(0)e^{(-i\omega - \frac{\gamma}{2})t}, \quad (\text{E.38})$$

amiből megfigyelhető átlagok időfejlődését lehet kiszámítani.

Gyakorlat: hogyan függ az időtől a $P(t) = \langle \hat{\sigma}_z \rangle = \rho_{11}(t) - \rho_{22}(t)$ polarizáció? (Ezt az időfüggést hívják a magrezonanciánál *mágneses relaxációnak*.) Hogyan függnek az időtől a rezonáns transzverzális térrel letapogatható $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$, $\langle \hat{\sigma}_y \rangle$ átlagok?

E.2. Oszcillátor oszcillátorok fürdőjében

Ez a másik alapmodell, amely pl. egy optikai rezonátor-módust írhat le a külvilág terjedő fotonmódusaihoz, vagy egy nanomechanikai oszcillátort a befogó szerkezet fononjaihoz csatolva.

A csatolt rendszer $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}$ Hamilton-operátorának részei:

$$\hat{H}_S = \hbar\omega_0 \hat{a}^\dagger \hat{a}; \quad \hat{H}_R = \hbar \sum_j \omega_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j; \quad (\text{E.39})$$

$$\hat{H}_{SR}^0 = \hbar(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \sum_j (\kappa_j \hat{b}_j + \kappa_j^* \hat{b}_j^\dagger), \quad (\text{E.40})$$

amiből a forgóhullám-közelítésben a

$$\hat{H}_{SR} = \hbar \sum_j (\hat{a} \kappa_j^* \hat{b}_j^\dagger + \hat{a}^\dagger \kappa_j \hat{b}_j) \quad (\text{E.41})$$

tagokat tartjuk meg. Ez kölcsönhatási képben így alakul:

$$\tilde{H}_{SR}(t) = \hbar (\hat{a} \tilde{\Gamma}^\dagger(t) + \hat{a}^\dagger \tilde{\Gamma}(t)), \quad (\text{E.42})$$

ahol

$$\tilde{\Gamma}(t) = \sum_j \kappa_j \hat{b}_j e^{i(\omega_0 - \omega_j)t}. \quad (\text{E.43})$$

Minden teljesen olyan szerkezetű, mint a már részletesen tárgyalt spinbozon modellben, ezért most kapásból felírhatjuk a master-egyenletet. Most

azonban megtartjuk a hőmérsékletfüggő tagokat is (*gyakorlat: végezzük el a levezetést véges hőmérsékletű esetre!*). Az eredmény:

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho} = & -i\omega [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{\rho}] - \kappa (\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{a}^\dagger \hat{a} - 2\hat{a} \hat{\rho} \hat{a}^\dagger) \\ & - 2\bar{n}\kappa (\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a} \hat{\rho} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{\rho} \hat{a}) \end{aligned} \quad (\text{E.44})$$

ami komponensekbe kiírva végtelen csatolt egyenletrendszert jelent a $\rho_{n,n'}(t)$ függvényekre. Az egyenletben

$$\kappa = \pi g(\omega) |\kappa(\omega)|^2 \quad (\text{E.45})$$

($g(\omega)$ a „környezet” sajátfrekvenciáinak sűrűsége), továbbá

$$\omega = \omega_0 + \Delta \quad (\text{E.46})$$

a „részrendszer” renormált frekvenciája, és

$$\Delta = \mathcal{P} \int d\omega' \frac{g(\omega') |\kappa(\omega')|^2}{\omega_0 - \omega'}. \quad (\text{E.47})$$

Az egyenlet megismerését most is jellegzetes átlagok kiszámításával kezdjük. $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ felhasználásával könnyű ellenőrizni (*gyakorlat!*), hogy

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{a} \rangle = \text{Tr}(\hat{a} \dot{\rho}) = -(i\omega + \kappa) \langle \hat{a} \rangle, \quad (\text{E.48})$$

ami lényegében egy *koherens állapot* csillapított rezgését írja le, mivel $\alpha(t)$ amplitúdójú tiszta koherens állapotra $\hat{a} |\alpha(t)\rangle = \alpha(t) |\alpha(t)\rangle$, így $\langle \hat{a} \rangle = \alpha(t)$.

Vegyük észre, hogy a környezet átlagos \bar{n} gerjesztési szintjét tartalmazó tagok kiestek: a rezgést csillapító κ súrlódás független a hőmérséklettől, ami megfelel annak a várakozásunknak, hogy a súrlódás lényegében klasszikus mechanikai jelenség.

Térjünk át a dekoherencia vizsgálatára! Az egyenletrendszer részletes megoldása helyett, amelynek technikáit elméleti kvantumoptikai könyvekből lehet megtanulni, most tekintsük a magasan gerjesztett komponenseket: $n, n' \gg 1$, és tegyük fel, hogy ilyen magas gerjesztéseknél $\rho_{n,n'}(t)$ síma függvénye az n, n' indexeknek. Ekkor az \hat{a}, \hat{a}^\dagger operátorokat mátrixelemükkel való szorzással közelíthetjük, elhanyagolva, hogy eltolják az indexeket. Ebben a közelítésben (még $n+1 \approx n$ -et is megengedve) a master-egyenletből ezt kapjuk:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{n,n'} \approx & -i\omega(n-n')\rho_{n,n'} - \kappa(n\rho_{n,n'} + \rho_{n,n'}n' - 2\sqrt{n}\rho_{n,n'}\sqrt{n'}) \\ & - 2\kappa\bar{n}(n\rho_{n,n'} + \rho_{n,n'}n' - \sqrt{n}\rho_{n,n'}\sqrt{n'} - \sqrt{n'}\rho_{n,n'}\sqrt{n}) \\ = & \left(-i\omega(n-n') - (2\bar{n}+1)\kappa(\sqrt{n} - \sqrt{n'})^2 \right) \rho_{n,n'}. \end{aligned} \quad (\text{E.49})$$

A közvetlen következmények:

- a nemdiagonális elemek dekoherenciája az indexek eltávolodásával gyorsul;
- a dekoherencia erősen hőmérsékletfüggő: $2\bar{n} + 1$ -szer gyorsabb a sűrűdésnél!

A magas hőmérsékletű határesetben az ekvipartíció tétele szerint $(\bar{n} + \frac{1}{2})\hbar\omega \approx k_B T$, így $2\bar{n} + 1 \approx 2k_B T / \hbar\omega \gg 1$; pl. egy kHz-es nanomechanikai oszcillátorra mK hőmérsékleten ez a faktor 10^5 nagyságrendű: egy mechanikailag igen nagy jósági tényezőjű oszcillátor is a periódusidő töredéke alatt elveszítheti kvantummechanikai koherenciaképességét.

E.3. Nagy molekula atomos gázban

Könnyű atomokból álló gázban lebegő nehéz molekula a gáztatomok lökései alatt szabálytalan mozgást végez: ez a legegyszerűbb esete a *Brown-mozgásnak*, amely a statisztikus fizika születésének egyik kiindulópontja volt.

Ez a példa a dekoherencia-téma története szempontjából is fontos: az ötlet első felvetője, H. D. Zeh (későbbiekben G. Joos nevű munkatársával együtt) ezen keresztül győzte meg Wigner Jenőt, hogy ez az egész környezet-okoza dekoherencia nem csak a felhevült fantázia terméke, hanem létező, erős mechanizmus, amely megkerülhetetlen része a természet leírásának és a kvantum-klasszikus határ feltárásához vezető útnak. Az elméletet újabban nagy molekulákkal végzett interferenciakísérletek leírására használják.

Mivel itt durva közelítéseket fogunk használni, fontos, hogy megértsük az eddigi számítások mögött működő szerkezetet.

A részrendszer – környezet kölcsönhatás Hamilton-operátorában a részrendszert az a „koordinátája” képviseli, amely őt a környezethez csatolja. A spin-bozon modellben (lásd az (E.15) egyenletet) ez a kétállapotú kvantumrendszer (kvázispin) $\hat{\sigma}_x$ operátora, a harmonikus oszcillátor esetében (lásd az (E.40) egyenletet) az \hat{x} kitérés. Ezekből a csatoló operátor-koordinátákból lesznek a végső master-egyenletekben a részrendszer sűrűségmátrixára ható Lindblad-operátorok.²⁵

²⁵ Pontosabban, amint az (E.33) és (E.44) egyenletekből látjuk, alacsony hőmérsékletű környezetben a csatoló koordináták felbomlanak a környezetet gerjesztő és a környezettől gerjesztést elvonó részre: $\hat{\sigma}_x = \hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-$, ill. $\hat{x} \propto \hat{a} + \hat{a}^\dagger$; ezek a tagok elkülönülve jelennek meg a master-egyenletben. Most azonban a környezet magas hőmérsékletű gáz, és ilyen komplikációra nem számítunk.

A csatolásban a környezetet a részrendszerre a fenti csatoló koordináta mentén ható „erő” képviseli; erő és koordináta szorzatából lesz a Hamilton-operátorban egy potenciális energia jellegű tag. Az erő 0 átlag körül fluktuál; négyzetét a környezet termikus állapotára átlagolva kapjuk meg a dekoherenciát jellemző Lindblad-együtthatót, lásd az (E.30) ill. (E.45) egyenleteket.

Amikor egy nagy molekula $\rho(\vec{r}, \vec{r}'; t)$ sűrűségmátrixa koherenciájának elvesztését akarjuk leírni a kicsiny gázatomokkal való kölcsönhatás következtében, ezt a kölcsönhatást így közelíthetjük:

$$\hat{H}_{SR} \approx -\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{F}}, \quad (\text{E.50})$$

ahol $\hat{\vec{r}}$ a nagy molekula helyének operátora, $\hat{\vec{F}}$ pedig a gáz Hilbert-terében ható operátor, amely – az erő jelentésének megfelelően – a gázatomoktól a molekula felé történő impulzusátadás sebességét méri. Ez a kifejezés nyilvánvalóan egy bonyolult helyfüggés \vec{r} szerinti sorfejtésének lineáris tagja. A sorfejtés konstans tagját nem írjuk ki, mert minden operátorral felcserélhető, ezért a master-egyenletből kiesik; a lineárisnál magasabbrendű tagokról feltételezzük, hogy a sűrűségmátrix véges $|\vec{r} - \vec{r}'|$ koherenciahosszán belül hatásuk elhanyagolható.

Ha ezt a közelítő kölcsönhatási Hamilton-operátort átfuttatjuk a master-egyenlet gépezetén, akkor nyilvánvalóan az $\hat{\vec{r}}$ hely-operátorból lesz a Lindblad-operátor, és ilyen alakú master-egyenletet kapunk:

$$\partial_t \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\hat{\vec{r}}), \hat{\rho} \right] - \Lambda [\hat{\vec{r}}, [\hat{\vec{r}}, \hat{\rho}]]. \quad (\text{E.51})$$

Az első tag a molekula szabad mozgását írja le külső akadályok, pl. egy interferométerben használt optikai rács $V(\vec{r})$ potenciáljának hatása alatt. Ennek a kvantummechanikai koherenciára nincs közvetlen hatása, ezért a továbbiakban elhanyagoljuk.

A második tag írja le a gázatomok hatására bekövetkező dekoherenciát. Ha a sűrűségmátrixot \vec{r} -reprezentációban írjuk le, akkor könnyű kiszámítani a kettős kommutátort. Valóban,

$$[\hat{\vec{r}}, \hat{\rho}]_{\vec{r}, \vec{r}'} = (\vec{r} - \vec{r}') \rho(\vec{r}, \vec{r}'; t); \quad (\text{E.52})$$

ezt megismételve,

$$\partial_t \rho(\vec{r}, \vec{r}'; t) \approx -\Lambda [\hat{\vec{r}}, [\hat{\vec{r}}, \hat{\rho}]]_{\vec{r}, \vec{r}'} = -\Lambda |\vec{r} - \vec{r}'|^2 \rho(\vec{r}, \vec{r}'; t). \quad (\text{E.53})$$

Ez az egyenlet az anyaghullám különböző helyek közötti koherenciájának időben exponenciális elvesztését írja le, annál gyorsabban, minél távolabbi

helyeket nézünk:

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}'; t) \approx \rho(\vec{r}, \vec{r}'; 0) e^{-\Lambda |\vec{r} - \vec{r}'|^2 t}. \quad (\text{E.54})$$

Ez a sűrűségmátrix térbeli koherenciájának fokozatos beszűkülését jelenti, ami viszont a határozatlansági relációk miatt együtt jár az *impulzustérben* való fokozatos, diffúzió-szerű kiterjedéssel.

Ennek részletesebb megértésére becsüljük meg a Λ együtthatót az (E.12) egyenlet felhasználásával. A környezet ütközések sorozatában ad át impulzust a Brown-részecskének. Az egy ütközésben átadott átlagos impulzus Δp nagyságú, és véletlenszerűen váltakozó irányú. Az ennek megfelelő erő nagysága $\Delta p/\tau$, ahol τ az ütközések közötti átlagos idő. Ez egyben az az időtartam, amelyből a (E.12) egyenletbeli időintegrálásban járulékot kapunk. Az integrálban a Born-közelítés miatt az erő négyzete jelenik meg, az eredményt tehát így becsülhetjük:

$$\Lambda \approx \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\Delta p}{\tau} \right)^2 \tau = \frac{D_p}{\hbar^2}, \quad (\text{E.55})$$

ahol

$$D_p = \frac{(\Delta p)^2}{\tau} \quad (\text{E.56})$$

az impulzustérbeli diffúziós együttható.

Ez még nem a végeredmény. Ha m a gázatomok tömege és $\bar{v}_T = \sqrt{k_B T/m}$ az átlagos termikus sebességük, akkor $(\Delta p)^2 = (m\bar{v}_T)^2 = mk_B T$. Megbecsülhetjük az ütközések gyakoriságát is: ha V térfogatban átlagosan N gázatom van jelen, akkor $\tau^{-1} \approx (N/V) \bar{v}_T \sigma$, ahol σ a gázatomok és a Brown-részecske közötti ütközés hatáskeresztmetszete. A végső becslés (Zeh és Joos formulája) tehát a következő:

$$\Lambda \approx \frac{1}{\hbar^2} (m\bar{v}_T)^2 \frac{N}{V} \bar{v}_T \sigma. \quad (\text{E.57})$$

Vegyük észre mindenekelőtt a nevezőben levő \hbar^2 tényezőt, és azt, hogy az összes többi mennyiségeket a klasszikus statisztikus fizika definiálja: a $\hbar \rightarrow 0$ szemiklasszikus határesetben a dekoherencia végtelen gyorsá válik; egy klasszikus tárgy nem mutat koherens kvantumjelenségeket.

Az izgalmas tartomány a kicsi és nagy közötti mezoszkopikus méreteké. Ott a koherencia valamennyi ideig fenntartható. Hogy meddig, azt az (E.54) és (E.56) egyenletek határozzák meg: az \vec{r} és \vec{r}' pontok közötti koherencia élettartama

$$t_{\vec{r}-\vec{r}'} = \Lambda^{-1} |\vec{r} - \vec{r}'|^{-2} = \frac{\hbar^2}{D_p |\vec{r} - \vec{r}'|^2}, \quad (\text{E.58})$$

vagyis

$$\sqrt{D_p t_{\vec{r}-\vec{r}'}} = \frac{\hbar}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \delta p \quad (\text{E.59})$$

a $|\vec{r}-\vec{r}'|$ távolságra kiterjedő koherens hullám leírásához szükséges impulzus-intervallum.

Eredményünk szemléletes: akkor vész el a Brown-mozgást végző nehéz molekula koherenciája, amikor a gáztatomok lökései okozta véletlen impulzusváltozások eldiffundálnak a koherencia fenntartásához megkívánt impulzustartomány határáig.

Hogy a környezet hatása éppen ilyen lassú impulzusediffúziós folyamaton keresztül falja fel a kvantummechanikai koherenciát, az már a drága laboratóriumokban fenntartható, Born-közelítéssel leírható, lassú dekoherenciájú rendszerek sajátja.

F. függelék

A kvantuminformáció elemei

Ha a feles spin csak felfelé vagy lefelé tudna állni, tökéletes fizikai megjelenítése lenne egy bit információnak: spin-fel=igen, spin-le=nem. De „fel” és „le” komplex szuperpozíciói a tér minden irányába mutathatnak; ezek a lehetőségek alkotják a *kvantum-bitet*, röviden: *qubit-et*.²⁶

A fizikai hordozók néha kettőnél több állapot koherens kezelését teszik előnyössé, ilyenkor háromállapotú rendszerrel qutritről, *d*-állapotú rendszerrel quditről beszélünk.

A qubitekben tárolt információt kiolvasni csak *kvantumméréssel* lehet, ami nyomot hagy a megfigyelt rendszeren, ezért a kvantuminformációt nem lehet észrevétlenül megcsapolni. Az 1980-as években született az ötlet, hogy ez kiválóan alkalmas *titkosításra*. Azóta ebből titkosításra, pénz átutalására és még ki tudja mire használható eszközök születtek, a gyártásukra szakosodott iparral, amelyben fizikusok egyre gyarapodó közössége talál megélhetést és szellemi élményt.

A kvantummos információkezelésnek van még egy fontos, de egyelőre kevésbé kiaknázott forrása: az összefonódás. Összefonódott qubitek rendszerén megfelelő logikai kapukkal olyan párhuzamos-összefonódott műveletsorokat lehet elvégezni, amelyek klasszikus számítógéppel elvégezhetetlenek lennének. Ezen alapulnak a kvantumszámítógép megteremtésére irányuló tervek; egyelőre helyesebb álmoknak nevezni őket. Hogy az „egyelőre” meddig tart, senki se tudja.

Az álmok Feynman 1982-es megjegyzésével kezdődtek: kvantumrendszerek dinamikáját nem lehet hatékonyan szimulálni klasszikus számítógépen, ehhez kvantumszámítógép kellene. A folytatás Deutsch 1985-ös úttörő munkája volt, amely példákat mutatott olyan feladatokra, amelyek megoldásában egy kvantumszámítógép hatékony lehet. Az igazi fellendülésre azonban 1994-ig kellett várni, amikor Shor egy igazi, húsbavágó példát mutatott: egy szellemes kvantum-algoritmust nagy számok faktorizálására. Erre iga-

²⁶ Magyarul kúbitnek, angolul kjúbitnek ejtik; az utóbbi ugyanúgy hangzik, mint a „cubit”: a „könyöknek”, „rőfnek” vagy „singnek” nevezett bibliai hossz mérték.

zán nagy számok esetén a klasszikus számítógép nem képes; ha lenne elég nagy kvantumszámítógép, amelyen a Shor-algoritmust nemtriviális méretekben is le lehetne futtatni, az megrázná a titkosítás gyakorlatát. Még egy nevezetes kvantum-algoritmus merült fel 1997-ben: Grover adatbázisban kereső algoritmus. Ezek és hasonló kvantum-algoritmusok elméleti fejlesztése azóta is lankadatlanul folyik.

A harmadik évezred elején azonban a kvantumszámítógép egy mesebeli eszköz, létező néhány qubites modellel. A mese az elméleti kvantumszámítástudomány; a létező kísérleti valóság annyiféle, ahányféle módon kétállapotú koherens rendszereket definiálni és néhány számolási lépésen keresztül koherensnek tartani képesek vagyunk. A továbblépés azért hihetetlenül nehéz, mert az összefonódásba kényszerítve belép a környezet, ami a koherencia elvesztését okozza, egyszóval: dekoherenciát, annál hamarabb, minél több qubites rendszer koherenciáját próbáljuk megőrizni. A dekoherencia kiszívja a rendszerből a betáplált információt és kiönti a környezetbe. A megálmódott kibúvók sokfélék; listájuk a speciális kvantumos hibajavító algoritmusoktól a dekoherencia folyamatainak sokféle kontrolljáiig terjed. A csatakiáltás mindig a *felskálázás*: ami kicsiben már megy, azt készítsük el nagyban is! A sikerek egyelőre korlátozottak.

A kvantum-titkosítás sikere azonban életben és virágzásban tartja a területet.

F.1. A qubitek hordozói

A qubitek szóba jöhető fizikai hordozói többnyire mezoszkopikus kvantumrendszerek, valahol a makro- és mikroszkopikus méretek között: ami makroszkopikus, az nem mutat igazi kvantumkoherenciát, igazi kvantumösszefonódást meg biztosan nem; ami mikroszkopikus, az törekeny, és túl rövid ideig őrzi a rábízott információt.

A kivétel a „repülő qubit”: a foton. Többféleképpen kódolható bele egy qubitnyi koherens információ: kétféle lineáris polarizációval \otimes vagy \oplus helyzetben, kétféle pörgő cirkuláris polarizációval, a módusfüggvény keresztmetszeti szerkezetével, vagy – ami különösen sikeres – időben szétválasztott impulzuspárral, amelyet üvegszálakon, nyalábosztóval és az egyik ágba helyezett késleltetővel és fázistolóval lehet létrehozni, és hasonló eszközökkel analizálni.²⁷ Külön színfoltot jelent a foton-qubitek kezelésében a fotonhullámcsomagok lelassítása rendkívül nagy diszperziójú közegen való áten-

²⁷ Ezt a lézerek kifejlesztéséért Nobel-díjat kapott Townsend találta ki, és Gisin csapata fejlesztette tökélyre.

gedéssel. Ezek a közegek a fotonnal majdnem rezonanciába kerülő átmenet-párokat tartalmaznak, amelyek a foton energiájából egy időre gerjesztődve lassítják le és ejtik csapdába a fotont.

Ettől az intenzíven fejlesztett de még kevésbé kiaknázott lehetőségtől eltekintve, a fotonokkal gyorsan lehet számolási műveleteket végezni, de az információt tároláshoz rendszerint át kell írni tömeges anyagból készült qubitekbe. A játszma mindig az, hogy a rendszer sokféle gerjesztéséből valahogy ki kell választani két állapotot úgy, hogy a többi ne kerüljön be a játékba.

A tömeges fizikai hordozók többfélék lehetnek:

- Csapdázott és lézerrel lehűtött ionok és atomok: a megfelelő szintek kiválasztását rendkívül élesen hangolt és nagy stabilitású lézerekkel végzik. A kvantuminformáció kezelésre alkalmas szintpárok a hiperfinomszerkezetből erednek: elektronszerkezetben azonos, a magspin beállításában különböző állapotok, amelyek között a direkt elektronikus átmenet tiltott, ezért hosszú élettartamúak. Még nagyobb optikai felbontással külön kezelhetők a csapdában rezgő ionok kvantált rezgési szintjei is. A hiperfinom és a rezgési szintek összecsatolásával kvantum-logikai kapuk hozhatók létre. Az átmeneteket a szintek lassú mágneses-elektromos tologatásával és kétlépéses Raman-átmenetet kiváltó lézerpárokkal hozzák létre.
- Míg a csapdák eredetileg nagyméretű vákuumrendszerek, újabban rohamosan fejlődnek a chipekre ültetett csapdák, amelyek mikroáramkörökön folyó áram mágneses terével fogják meg a lehűtött atomok spinjét.
- Repülő atomok, amelyek kezdeti állapotuk bonyolult preparálása után különleges jóságú mikrohullámú vagy optikai rezonátorban kerülnek kölcsönhatásba helyhez kötött fotonokkal. Logikai kapuk egymás után érkező atomoknak a rezonátor fotonjain keresztül való összecsatolásával jönnek létre.
- Folyadékban oldott molekulák magspinjei, amelyek a kötő elektronpályákon keresztül összecsatolódva kvantumlogikai kapuk létrehozására képesek. A magspinek a környezettől különösen jól elszigetelt kvantumalrendszert alkotnak. Manipulálásukra a magrezonancia egész fegyvertárát felhasználják; lásd a 12.6. pontot. Korlátjukat az jelenti, hogy ha túl sok – mondjuk tíznél jóval több – magrezonanciás qubit kapcsolódik össze, a spektrumok annyira besűrűsödnek, hogy már a világ legdrágább magrezonancia-spektrométere sem bontja fel őket. Másik korlátjuk, hogy a folyékony oldószer csak szobahőmérsékleten létezik, emiatt a jelet nagy termikus háttér alól kell kitermelni.

- Félvezető „kvantumpöttyökben” erős hűtéssel, a térbeli kiterjedés lecsökkentésével és az elektronok közötti Coulomb-taszítás kihasználásával („Coulomb-blokád”) hoznak létre egyes elektronokat tartalmazó szigeteket; a folyamatok kontrollja és leolvasása elektronikusan, feszültségek és áramok által történik. A nyomonkövethető mennyiségek: az elektron töltése és spinje. Az utóbbi azért ígéretes, mert sokkal hosszabb ideig ellenáll a dekoherenciának; hátránya, hogy elektronokat a spinek ellenőrzésével be- és kivezetni egyelőre nehéz műveletnek számít. Félvezetőkben egyes szennyező atomok magspinjét is próbálják felhasználni qubitként.
- Talán a legígéretesebb szilárdtest-rendszert az alagút-átmenetet tartalmazó szupravezető nanoáramkörök jelentik: a Josephson-effektus felhasználásával akár egy kiskapacitású szigeten rekedt töltés, akár egy áramvezető hurokkal körbefogott mágneses fluxus kvantumállapotaiból lehet qubiteket kiválasztani, ezeket összecsatolni, elektromos és mágneses eszközökkel kontrollálni.
- Keresztezett lézerek és tükrök kombinációjából létrehozott fény-állóhullám-rácsokba, mint a tojástartóba, egyenként betölthetők atomok, amelyek szomszédaikkal gyengén csatolódnak. Ez is ígéretes modelljévé válhat a kvantumlogikai áramköröknek.

F.2. Az alapvető stratégiák

Az alapító atyák (Feynman, Deutsch, Shor, Grover) által a majdani kvantumszámítógép működésére megálmodott alapstratégia ez:

- preparálja jóldefiniált kezdeti kvantumállapotot;
- őrizve a koherenciát, amíg lehet, végezz el minél több műveletet kvantumlogikai kapukra bontott unitér időfejlődéssel;
- kvantumméréssel olvasd le az eredményt;
- ismételd sokszor, amíg az egyre jobb statisztika kirajzolja a számítás eredményét.

Az unitér fejlődésben használt logikai kapuk kivétel nélkül nemlineáris optikai eszközöket használnak. Ez nem azt jelenti, mintha bennük a Schrödinger-egyenlet linearitása sérülne; ami itt nemlineáris, az nem az állapotvektor, hanem megfigyelhető mennyiségek időbeli fejlődése. A nemlineáritások – az optikai módusok között létrehozott csatolások – erőssége kritikus követelmény: ha gyenge a csatolás, a művelet olyan sokáig tart, hogy azalatt felülkerekedik a dekoherencia. A kristályos anyagok optikai nemlinearitása

nem elég erős; ezért is kellene az egyes csapdázott atomok és ionok, amelyeknek optikai viselkedése nagyságrendekkel erősebb nemlinearitást mutat.

Az utóbbi évek áttörésszerűen újabb, alternatív stratégiákat hoztak napvilágra. Ezek „Lineáris optikai kvantumszámítás” és „Klaszter-állapot kvantumszámítás” néven futnak. Közös gondolatuk, hogy már a számolási szakaszt is jól megtervezett kvantummérésekkel kell megszakítani; ezek természetüktől fogva erős nemlineáris lökést jelentenek a folyamatban, fölöslegessé téve az erős optikai nemlinearitások hajszozását.

F.3. Kvantum-titkosítás

Titkosnak szánt információinkhoz ugyanúgy hozzáférhetnek illetéktelenek, mint értéktárgyainkhoz, de az információt védeni tudjuk, ha érthetatlenné kódoljuk, olyan titkos kódsorozat felhasználásával, amely ugyanolyan hosszú, mint maga az üzenet, és rajtunk kívül csak az információ címzettje van birtokában. Ilyenkor is le lehet hallgatni, de az illetéktelen lehallgató nem érti. Ha azonban elkövetjük azt az elemi hibát, hogy mint a kétszer kifőzött teászacskót, ugyanazt a titkos kódot kétszer is felhasználjuk, azon rajtavesztünk: a két üzenet birtokában a lehallgató számítógépe hatékony algoritmusokkal könnyen feltöri a kódot. A védelem tehát arra kötelez, hogy egy kódot szigorúan csak egyszer használjunk.

A kvantum-titkosítás arra való, hogy kódokat – tipikusan 0010101101... alakú bináris sorozatokat – nagy mennyiségben osszunk meg levelezőpartnerünkkel úgy, hogy ezt ne tudja a kívülálló harmadik észrevétlenül lehallgatni. Itt a hangsúly azon van, hogy *észrevétlenül*, és ebben segít a kvantum-titkosítás: ha a kód bitjeit egy-egy fotonra bízunk, azokon a lehallgatás mint kvantumérés érezhető nyomot hagy, amit statisztikai elemzéssel észlelni lehet. Feladatunk: addig ismételni, amíg azt nem mondja a statisztika, hogy most nem történt lehallgatás: akkor azt a kódot nyugodtan használhatjuk titkosításra.

Az alapmodellt Charles Bennett és Giles Brassard találta ki 1984-ben: ez a *BB’84-es protokoll*. A klasszikus titkosítás elméletéből átvették – az unalmas „A és B” helyett – az azóta hallatlanul népszerűvé vált Alice és Bob figuráját is: ők az a páros, akik titkos információt akarnak cserélni, a gonosz lehallgató Eve („eavesdropper” angolul lehallgatót jelent) ellenében.

BB’84 szerint a kódot polarizált fotonok sorozatába kódolva, kétféle polarizációs rendszer véletlen váltogatásával kell elküldeni partnerünknek:

$$\begin{aligned} 0 &= \updownarrow \text{ vagy } \nearrow, \\ 1 &= \leftrightarrow \text{ vagy } \nwarrow. \end{aligned} \tag{F.1}$$

Legyen az elküldendő sorozat:

$$0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 1 \dots \quad (\text{F.2})$$

Ezt tehát Alice valahogy így küldi el:

$$\uparrow \nearrow \nwarrow \nearrow \leftrightarrow \nearrow \leftrightarrow \nwarrow \uparrow \leftrightarrow \dots \quad (\text{F.3})$$

Bob nem tudja, a kettő közül mikor melyik kódolást használta Alice, ezért maga is véletlenszerűen váltogatja analizátorát a kétféle kódolás között. Utólag nyilvános telefonvonalon megbeszélik mindkettőjük polarizátor-analizátor beállításait – persze a küldött bit értékét nem –, és amelyik bitnél azonos volt a beállításuk, azt elfogadják a kód részének.

Eddig nem volt szó a lehallgatásról. Ennek észlelésére Alice és Bob felaldozzák a kód egy részét: megmondják a küldött ill. fogadott bit értékét is, és ha a kettő különbözik, azt vagy véletlen zaj, vagy lehallgatás okozta. Ha az ismert zajszinthez képest túl sok az eltérés, ezt úgy tekintik, hogy valószínűleg lehallgatás történt; a kódot elvetik, és újra kezdik az egész eljárást.

Az egyszerű BB'84 protokollnak számos buktatója van. A legkomolyabb fizikai korlát a jó minőségű egyfoton-források nehézsége, ami néhány éven belül jelentősen javulhat; egyelőre általában rövid lézerpulzusokat küldenek egyes fotonok helyett; ezekben el nem hanyagolható valószínűséggel lesz a kívánt egy foton helyett több vagy egy se. Hasonló problémákkal küzd az összefonódott fotonpárok szétküldésével operáló alternatív módszer is. Mindez a lehallgatás és az ellene való védekezés változatos stratégiáit teszi lehetővé, amelyek párhuzamosan fejlődnek az idő előrehaladtával. Úgy tűnik, a védekezési stratégiák meggyőzőek, és a kvantum-titkosítás kezd sikeres iparaggá válni, amelynek termékeit több telephellyel rendelkező nagyvállalatok és hadseregek egyaránt szívesen vásárolják, ösztönzéssel és pénzzel segítve a kvantum-információ egész tudományágát.

A fotonok továbbításának kétféle módja van: üvegekábelben vagy szabad levegőn. Az üvegekábelnek két hátránya van: a polarizáció elmosódása, ami miatt az időbeli kódolást kell használni, és a kábelek legjobban terjedő frekvenciasávján működő detektorok gyenge hatásfoka; ennek fejében viszont nagy előnyt jelent a meglévő távközlési hálózatok használata. A levegőben használható a polarizációs kódolás, hiszen több ezer fényévnyire levő csillagokból is ideér a stabilan polarizált fény, a detektorok is jók, de a felhasználó ki van téve az időjárás szeszélyének. Mindkét módszert nagy erővel fejlesztik.

F.4. Klónozás és teleportáció

Egy kvantumállapot klónozása, vagyis lemásolása úgy, hogy az eredeti is változatlanul maradjon, nemlétező művelet: ezt hívják „no-cloning tételnek”. A bizonyítás legtömörebb megfogalmazása az, hogy ha lenne klónozás, az az eredeti és a klón közös Hilbert-terében rávetítene egy olyan altérre, ahol az eredeti és a klón megegyezik, tehát projektor, ami nem lehet unitér transzformáció. Ez még nem lenne végzetes, mert dekoherencia bevezetésével projektorok is megvalósíthatók; a végső csapás az, hogy ha egy adott kvantumállapotra megkonstruáljuk ezt a projektort, az már egy másik állapotra nem működik.

Ezzel szemben a teleportáció, vagyis egy rendszer tetszőleges kvantumállapotának átmásolása egy másik rendszerre, miközben az eredeti megváltozik, megvalósítható, és a kvantuminformáció egyik alapműveletének számít. Potenciális hasznossága abból ered, hogy fotonokról atomos hordozókra és vissza másolni kvantuminformációt, ez egy kvantumszámítógépben a memóriába való tárolás és előhívás művelete lehet.

A teleportáció egy összefonódott részecskepárt, pl. egy polarizáció-szinglett fotonpárt („kvantum-információs csatornát”) használ fel információátvitelre. A fotonpárt szétküldjük az információt leadó ill. felvevő rendszer felé. Ezután a teleportáció három lépésből áll:

1. határozzuk meg kvantumméréssel a teleportálandó állapotú rendszernek és a pár hozzá küldött tagjának közös kvantumállapotát;
2. az eredményt klasszikus információs csatornán (telefonvonalon) küldjük el a vevő oldalra;
3. a megkapott eredmény és a fotonpár vevőoldali tagja együttesen meghatározza, hogy milyen unitér transzformáció viszi át a vevő rendszert az eredetivel megegyező, teleportált állapotba.

A kvantum-teleportáció a prototípusa az „LOCC” betűszóval (Lokális Operáció és Klasszikus Kommunikáció) megjelölt kvantum-informatikai műveletsorok sokaságának. Ugyanakkor annak a bevezetőben említett törekvésnek is a legegyszerűbb példája, hogy egy műveletsor közben elvégzett kvantummérésekkel iktassunk be hatékony nemlineáris lépéseket az információ feldolgozásába.

A kísérletileg megvalósított példák a legegyszerűbb kvantumrendszerek (kvázispin, oszcillátor) állapotainak teleportálását demonstrálták. Bonyolultabb rendszerek teleportálása természetesen az utópia világába tartozik. Ne felejtjük: nem anyagot teleportálunk, hanem kvantumállapotokra vonatkozó információt.

A kvantum-teleportáció fogalmát bevezető csapat egyik tagjától, a nemrég elhunyt Asher Perestől egy újságíró megkérdezte: Ha embert sikerülne teleportálni, a lelkét is teleportálnák, vagy csak a testét? Peres válasza: Csak a lelkét.

Befejezésül az olvasó figyelmébe ajánlok a témáról egy hosszú könyvet [25], meg egy rövidet [26].

G. függelék

A Dirac-egyenlet

Ebben a függelékben rövid, jelzésszerű leírást adunk a Dirac-egyenletről, lényegében levezetések nélkül.

A kvantummechanika relativisztikus kiterjesztésének igénye a kvantummechanika megszületésének pillanatától jelen volt. A sikert Dirac 1928-ban született egyenlete hozta el, amely minden önkényes feltevés nélkül számot adott a feles spinű részecskék – köztük az elektron – tulajdonságairól, többek között arról, hogy a spinhez tartozó mágneses momentum és impulzus közötti giromágneses arány kétszerese a pályamozgásra vonatkoznak. Ugyanakkor megjósolta az elektron antirészecskéjének, a pozitronnak a létezését, valamint az elektron-pozitron pár keltésének és megsemmisülésének folyamatát, amelyet hamarosan igazolt a kísérlet. Ezek az átütő sikerek meggyőzően bizonyítják, hogy Dirac a helyes relativisztikus hullámegyenletet találta meg.

A Dirac-egyenlethez abból az igényből kiindulva juthatunk el, hogy egy részecske hullámfüggvényének időfüggését továbbra is időben elsődrendű parciális differenciálegyenlet írja le, de mivel az idő és a helykoordináták a speciális relativitás elmélete szerint négyesvektort alkotnak, a hely szerint is első deriváltakat tartalmazzon.

Szabad részecskével kezdve, és megtartva a koordinátareprezentációban érvényes $\hat{p}_i = (\hbar/i)\nabla_i$ ($i = x, y, z$) összefüggést, a $\partial_t\psi = -(i/\hbar)\hat{H}\psi$ Schrödinger-egyenlet akkor felelne meg ennek az igénynek, ha \hat{H} lineáris lenne \hat{p} -ben, vagyis ilyen alakú lenne:

$$\hat{H} \stackrel{?}{=} c \sum_1^3 \alpha_i \hat{p}_i + \beta mc^2, \quad (\text{G.1})$$

ahol α_i és β dimenziótlan konstansok, és a Hamilton-operátorhoz hozzáadtuk az mc^2 nyugalmi energiát.

Tudjuk azonban, hogy lineáris reláció nem az energia és impulzus között, hanem a négyzeteik között áll fenn:

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4. \quad (\text{G.2})$$

Ránézésre a fenti két kifejezés nem lehet egyszerre igaz, mert ha a (G.1) kifejezést négyzetre emelem, akkor vegyszorzatokat is kapok, ami pedig a (G.2) egyenletben nincs. Dirac azonban megoldotta a gordiuszi csomót: ha a spin kvantumelmélete mintájára a ψ állapotvektort többkomponensű spinor hullámfüggvénnyel lehet reprezentálni, és ennek megfelelően α_i és β nem számok, hanem mátrixok, akkor azoknak az algebrája már lehet olyan, hogy a vegyes szorzatok kiessenek:

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}; \quad \{\alpha_i, \beta\} = 0; \quad \beta^2 = \mathbb{1}, \quad (\text{G.3})$$

ahol a kapcsos zárójel antikommutátort jelent ($\{A, B\} = AB + BA$), éppen biztosítja a kívánt célt. Ekkor az elektron többkomponensű hullámfüggvényének dinamikai egyenlete a (G.1) Hamilton-operátorral írható fel:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = c \sum_1^3 \alpha_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \beta mc^2 \psi. \quad (\text{G.4})$$

Ez a híres Dirac-egyenlet, de hogy konkrét alakját lássuk, meg kell hogy mondjuk, hány komponense van a hullámfüggvénynek (a Dirac-spinornak), és milyen mátrixok a megoldásai a (G.3) antikommutátoros relációknak. A válasz:²⁸ négykomponensű hullámfüggvényt és 4×4 -es mátrixokat kell választanunk. Az utóbbiakat a (G.3) relációk nem határozzák meg egyértelműen; egy célszerű választás:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \mathbb{0} \\ \mathbb{0} & \mathbb{0} \end{pmatrix} \quad (\text{G.5})$$

ahol σ_i az i -edik 2×2 -es Pauli-mátrix, $\mathbb{1}$ pedig a 2×2 -es egységmátrix. Ezekkel válik teljessé a Dirac-egyenlet konkrét alakja.

A fizikai következmények kiaknázásához feltétlenül szükség van az elektromágneses mezővel való kölcsönhatás beírásához. A 11. fejezet mintájára, a (G.4) egyenlet kiterjesztett alakja:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[c \sum_1^3 \alpha_i \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} - e A_i \right) + \beta mc^2 + e\Phi \right] \psi, \quad (\text{G.6})$$

²⁸ Az α_i és β mátrixok négyzete 1, így sajátértékeik $+1$ vagy -1 . Az antikommutálásból könnyen belátható, hogy spúrjuk (trésziük, nyomuk) 0, tehát ugyanannyi $+1$ sajátértékük van, mint -1 . Emiatt a mátrixok páros rendűek. A 2×2 -es mátrixok túl kevesen vannak a (G.3) relációk kielégítésére; a minimum a 4×4 -es mátrixok, és ennek megfelelően a négykomponensű spinorok választása. Ezt végigszámolva adódnak az elektron tulajdonságait nagy pontossággal leíró következtetések, tehát nem keresünk tovább a még nagyobb mátrixok felé.

ahol A_i a (háromdimenziós) vektorpotenciál, Φ pedig a skalárpotenciál.²⁹

Ebből az egyenletből mérsékeltlen hosszú levezetésekkel³⁰ fontos eredmények kaphatók:

- A pálya-impulzusmomentum nem megmaradó mennyiség, de egy $\hbar/2$ nagyságú spinnel való összege igen.
- A spinhez mágneses momentum is tartozik; a giromágneses arány kétszerese a pálya-impulzusmomentumra vonatkoznak.
- Fellép a 11. fejezetben jelzett spinpálya kölcsönhatás, a kísérletekkel egyező nagyságú együtthatóval.

Ezek közül különösen az első figyelemreméltó, mivel a relativitás elméletének is újabb bizonyítékát szolgáltatja, amely a klasszikus fizika számára még láthatatlan volt: ha az ember a kvantummechanikában helyesen kezeli a Lorentz-transzformációkat, jutalom-ráadásul megkapja a forgások helyes kezelését, benne a spinnel. Ez ékesszólóan mutatja, hogy a Lorentz-transzformáció és a forgás ugyanannak a nagyobb szimmetriának – a Poincaré-csoportnak – különböző megjelenései.

Van még egy olyan következmény, amely nem a levezetésből adódik automatikusan, hanem Dirac jött rá két évvel később, 1930-ban: ez az anti-részecskék létezése. A híres Dirac-féle mátrixos négyzetgyökvonás negatív energiájú állapotokat is szolgáltat, és magyarázatra szorul, miért nem esnek bele ezekbe spontán emisszióval a pozitív energiájú részecskék. A Dirac által megtalált megoldás: azért, mert a negatív energiájú állapotok be vannak töltve, akkor pedig a Pauli-elv már tiltja a további elektronok bezuhanását.

A negatív energiájú „Dirac-tenger” azonban gerjeszthető: $2m_e c^2$ vagy annál több energiával egy elektron felemelhető egy pozitív energiájú állapotba. Ilyenkor visszamarad egy pozitív töltésű „lyuk”, amely minden más tekintetben az elektronnal azonos módon viselkedik. Dirac akkor még nem tudta, de hamar kiderült: ez a pozitron, a gerjesztés tehát ilyenkor egy elektron-pozitron párt hoz létre.

Az elektron bele is eshet a lyukba: az elektron-pozitron pár megsemmisülhet, miközben általában két, nagyjából ellenkező irányba kirepülő nagyenergiájú foton keletkezik. (*Miért kettő?*) A fotonok sok információt hordoznak a környezetről; ezen alapul többek között a pozitronemissziós tomográfiát használó orvosi diagnosztikai módszer.

²⁹ Egy kicsit különböző mátrixok bevezetésével a Dirac-egyenlet olyan alakba is írható, amelyben szemmel látható négydimenziós kovarianciája.

³⁰ Mondhatnám, hogy *gyakorlat*, de csak nagy önbizalommal rendelkező olvasóimnak mondom.

Irodalom

- [1] Marx György: *Kvantummechanika*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1957., 1964., 1971.
- [2] Gombás Pál, Kisdí Dávid: *Bevezetés a hullámmechanikába és alkalmazásaiba*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1967.
- [3] Nagy Károly: *Kvantummechanika*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1978.
- [4] Apagy Barna: *Kvantummechanika*. Műegyetemi Kiadó, 1996.
- [5] Nagy Károly, Pócsik György, Szépfalusy Péter: *Kvantumelmélet: a „Fizikai kézikönyv műszakiaknak”* c. kötet 6. része; Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1980.
- [6] Károlyházi Frigyes: *Igaz varázslat*. Gondolat Könyvkiadó, Budapest, 1976.
- [7] L. D. Landau, E. M. Lifsic: *Elméleti fizika III: Kvantummechanika*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1978; *Elméleti fizika IV: Relativisztikus kvantumelmélet*, Tankönyvkiadó, Budapest 1979.
- [8] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands: *Mai fizika 1–9*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1969-1970.
- [9] Neumann János: *A kvantummechanika matematikai alapjai*. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1980.
- [10] Riesz Frigyes, Szőkefalvi-Nagy Béla: *Funkcionálanalízis*. Tankönyvkiadó, Budapest 1980., 1988.
- [11] Wigner Jenő: *Csoportelméleti módszer a kvantummechanikában*. Akadémiai Kiadó, Budapest 1979.
- [12] Petz Dénes: *Lineáris analízis*. Akadémiai Kiadó, Budapest, 2004.
- [13] Patkós András, Polónyi János: *Sugárzás és részecskék*. Typotex, Budapest, 2000.
- [14] J. D. Jackson: *Klasszikus elektrodinamika*. Typotex, Budapest, 2004.

- [15] L. E. Ballantine: *Quantum Mechanics*. 2. kiadás., World Scientific, 2000.
- [16] M. V. Berry: *Proc. Roy. Soc. A* **392**, 45 (1984).
- [17] C. A. Mead: *Rev. Mod. Phys.* **64**, 2598 (1986).
- [18] Benedict Mihály: *Fizikai Szemle* **44**, 190 (1994).
- [19] Kapuy Ede, Török Ferenc: *Az atomok és molekulák kvantumelmélete*. Akadémiai Kiadó, Budapest 1975; Kapuy Ede, Kovács István és Török Ferenc: a „*Fizikai kézikönyv műszakiaknak*” c. kötet 7. része; Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1980.
- [20] D. F. Walls, G. J. Milburn: *Quantum optics*. Springer, 1995.
- [21] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen: *Phys. Rev.* **48**, 696 (1935).
- [22] H. Wiseman: *Contemporary Physics* **47**, 79 (2006).
- [23] J. S. Bell: *Physics* **1**, 195 (1964).
- [24] E. Joos, H. D. Zeh, C. Kiefer, D. Giulini, K. Kupsch, I. O. Stamatescu: *Decoherence and the appearance of a classical world in quantum theory*. 2. kiadás., Springer, Berlin 2003.
- [25] M. A. Nielsen, I. L. Chuang: *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [26] Lajos Diósi: *A short course in quantum information theory- Lecture Notes in Physics 713*, Springer, Berlin, 2007.
- [27] W. M. Itano *et al.*: *Phys. Rev. A* **41**, 2295 (1990).
- [28] A. C. Elitzur, L. Vaidman: *Foundations of Physics* **23**, 987 (1993).
- [29] T. Geszti: *Phys. Rev. A* **58**, 4206 (1998).
- [30] Y. Aharonov, D. Z. Albert, L. Vaidman: *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1351 (1988).

Tárgymutató

- abszolút fekete test, 16
 adiabatikus közelítés, 111, 216
 Aharonov–Bohm-effektus, 147
 alagút-effektus, 241
 alagúteffektus, 32, 61
 alakfaktor, 197
 anti-Zénón-effektus, 249
 antikommutátor, 153
 atomcsapda, 69
- átlagtérközelítés, 210
 átmeneti valószínűség, 172
- bázisváltás, 81
 Baker–Hausdorff formula, 265
 Balmer, 22
 belső szabadságfokok, 28, 206
 Berry-fázisok, 219
 Bohr-féle frekvenciafeltétel, 21
 Bohr-sugár, 22
 Born–Oppenheimer közelítés, 111, 216
 Born–Oppenheimer közelítés, 111, 216
 Born-szabály, 36, 204
 Bose–Einstein kondenzáció, 208
 Bose–Einstein statisztika, 208
 bozonok, 208
- centrifugális potenciál, 122, 126
 ciklikus határfeltétel, 59
 ciklotron-frekvencia, 145
 Clebsch–Gordan együtthatók, 223
- d-állapotok, 127
 Davisson – Germer kísérlet, 26
 diamágnesség, 142
 dipólmomentum-operátor, 179
 Dirac-egyenlet, 293
- Dirac-féle deltafüggvény, 43
- egyfoton-forrás, 117
 Ehrenfest-tételek, 95
 ekvipartíció, 16
 előreszórás, 200
 elfajulás, 49, 136
 energiamegmaradás, 101, 102
 energiasajátállapotok, 45
 EPR-korrelációk, 205, 224
- félvezető nanostruktúrák, 58, 236
 Fermi–Dirac statisztika, 208
 Fermi-féle aranyszabály, 175
 fermionok, 208
 Feynman-féle pályaintegrál, 257
 finomszerkezet, 224
 fluxuskvantum, 149
 Fock-állapotok, 118
 folytonos szimmetriák, 100
 forgásszimmetria, 100, 136
 fotoelektron-sokszorozó, 117
 foton, 19, 112
 Franck-Hertz kísérlet, 21
- gömbfüggvények, 125
 giromágneses arány, 141, 295
 gyenge mérés, 252
- hősugárzás, 15
 Hamilton-függvény, 30
 Hamilton-operátor, 42
 Hartree–Fock módszer, 211
 Hartree-közelítés, 212
 határozatlansági relációk, 33, 91
 hatáskeresztmetszet, 192
 hatáskvantum, 236

- hatótávolság, 200
 Heisenberg mikroszkópja, 92
 Heisenberg-kép, 96
 Hellmann–Feynman tétel, 219
 Hermite-polinomok, 66
 hermitikus operátor, 78
 hiperfinom kölcsönhatás, 224
 hiperfinom szerkezet, 224
- időeltolás, 101, 102
 az impulzus operátora, 42
 impulzus-reprezentáció, 84
 impulzusegységmaradás, 100
 impulzusmomentum-megmaradás, 100
 indukált emisszió, 174, 177
 ioncsapda, 69, 261
 irreducibilis ábrázolás, 103
- kölcsönhatás-mentes mérés, 249
 kölcsönhatási kép, 98, 171, 269
 kémiai kötés, 216, 219
 kétfoton-forrás, 117
 kanonikus impulzus, 140
 karakterisztikus egyenlet, 169
 kauzalitás, 193
 kilépési munka, 19
 kitrészelés, 233, 271
 kiválasztási szabály, 38, 187
 koherens állapotok, 31, 33, 108
 kollapszus, 247
 konfigurációs tér, 204
 kontakt kölcsönhatás, 213
 kontinuitási egyenlet, 49
 koordináta-reprezentáció, 84
 korreláció, 205
 kristályok fajhője, 18
 kvázispin, 155
 Kvantum-Zénón-effektus, 247
 kvantumállapot, 42
 kvantumgödör, 59
 kvantumkáosz, 243
 kvantumpötty, 59
- láthatóság, 231
 lézer, 174, 177
 Lagrange-függvény, 139, 258
 Lamb-féle eltolódás, 184
 Lamb-shift, 184
 Landau-szintek, 145
- lavina-fotodióda, 117
 leárnyékolás atomokban, 213
 Legendre-polinom, 125
 lineáris kombináció, 27
 Lippmann–Schwinger-egyenlet, 194
- mágneses kvantumszám, 136
 mágneses rezonancia, 161, 224
 mérési folyamat, 247
 mérték-invariancia, 37
 mértéktranszformáció, 37, 146
 Maszlov-index, 241
 megengedett átmenetek, 187
 mellékkvantumszám, 136
 mezoszkópikus rendszerek, 247
 mozgásállandó, 94
- nem-keresztelés szabálya, 170
 Neumann-mérés, 151
 neutrínó-oszcilláció, 158
- optikai tétel, 200
- önadjungált operátor, 78
 összefonódás, 204
 összetett részecskék, 207
- p-állapotok, 127
 párkeltés, 295
 paraméteres lekonvertálás, 117
 paritás, 55
 Paul-csapda, 261
 Pauli-elv, 211
 Pauli-mátrixok, 153
 Pauli-spinor, 152
 Penning-csapda, 261
 perdület-megmaradás, 100
 periódusos rendszer, 214
 periodikus határfeltétel, 59
 Planck, Planck-állandó, 18
 polariton, 218
 potenciálszórás, 192
 pozitron, 295
 preparálás, 96
- QND, Quantum Non-Demolition, 250
 qubit, 155, 285
- Rabi-frekvencia, 158

- Rabi-oszcilláció, 157, 182
radiális Schrödinger-egyenlet, 126
Raman-effektus, 111
Ramsauer-effektus, 199
redukált sűrűségmátrix, 233
rezonanciák a szórásban, 199
rotátor, 131
Rutherford-féle atommodell, 21
Rydberg, 22
Rydberg-atomok, 137
- s-állapotok, 127
síkhullám, 39
sajátállapot, 43
Schrödinger macskája, 28
Schrödinger-egyenlet, 39
Schrödinger-kép, 96
Schwartz-egyenlőtlenség, 91
Slater-determináns, 210
spektrum, 48
spin, 28, 151
spinor, 152
spontán emisszió, 112, 177
stacionárius állapotok, 45
Stark-effektus, 165
Stern–Gerlach kísérlet, 151, 232
Stern–Gerlach-effektus, 142, 151
stimulált emisszió, 174
szög szerinti Laplace-operátor, 124
- szórási amplitúdó, 193
szórási hossz, 200
szerkezetfaktor, 197
szimmetriaművelet, 99
szinglett, 222
szint-statisztika, 170
szuperpozíció elve, 26
- teljességi reláció, 77
tiltott átmenetek, 188
transzláció-szimmetria, 100
triplett, 222
- unitér időfejlődés, 82
unitaritás, 82
utószelekció, 252
- valószínűség-sűrűség, 36
valószínűségi amplitúdó, 36
Van der Waals-erő, 204
vektorpotenciál, 140
visibility, 231
vonalas spektrum, 21
- Wigner Jenő, 223
Wigner–Weisskopf közelítés, 183
Wigner-függvény, 87
- Zeeman-effektus, 142