

1. Elmélet és valóság

1.1. Mérések

A fizika tárgya a valóság leírása, ennek matematikai kerete a valószínűségelmélet. Ez akkor is így van, ha az első fizikai elmélet, amellyel találkozunk, nevezetesen a klasszikus mechanika, szót sem ejt valószínűségről. Ha viszont egy kicsit tovább haladunk, a klasszikus statisztikus fizikában már előjön a valószínűség.

Egy mechanikai rendszer eseményei – legalább is a legtöbbje – megfigyelő szempontjából egyszerű, világos jelentéssel bír; például esemény az, hogy egy tömegpont „ebben a térrészben van”, meg az, hogy „az impulzusa kisebb, mint egy adott érték”.

Egy mechanikai rendszer állapotait az események bekövetkezésének relatív gyakoriságával fogjuk fel. Ezt a következőképpen értelmezzük: a mechanikai rendszer valamely megadott eljárás – úgynevezett *állapotelőkészítés* – után mérést végzünk, ami azt jelenti, hogy egy eldöntendő, úgynevezett *igen-nem* kérdést teszünk fel egy eseményre vonatkozóan; ilyen kérdések például az, hogy „Itt vagy ebben a térrészben?”, meg az, hogy „Kisebb az impulzusod, mint egy adott érték?”. Az adott eljárást és a mérést sokszor megismételjük, és aztán vesszük az igen válaszok és az összes válasz hányadosát.

A mechanikai rendszer sok-sok azonos eljárással előkészített példányának összességét *statisztikai sokaságnak* nevezzük, egy példányt pedig a sokaság egy *egyedének*. A szóban forgó értelmezéssel nyilvánvaló, hogy az állapot a sokaságra vonatkozik, nem az egyedekre külön-külön. Kérdéses tehát, jogos-e azt mondani a sokaság egy elemére, hogy az adott állapotban van; már pedig ez szokásos.

1.2. Klasszikus leírás

A klasszikus mechanika megalkotta a fázistér fogalmát, azt a színteret, ahol a történések zajlanak. A klasszikus statisztikus fizika is a fázistérre épít, azon ad meg eloszlásokat, amellyel valószínűségi formulákat határoz meg. Nem nehéz belátni, hogy arról van szó: az események a fázistér Borel-halmazai, az eloszlások pedig valószínűségi mértékek az eseményeken, azaz állapotok (egy-egy eloszlást szokás sokaságnak is hívni: mikrokanonikus sokaság, stbn) Ha az állapot Dirac-féle, azaz egy pontra koncentrált, akkor szórásmentes, azaz nincs valódi valószínűség, azaz nincs bizonytalanság. Ez a klasszikus mechanika.

Egy mechanikai rendszer leírásának alapvető objektuma az eseménytér. Azt gondolnánk, hogy fizikailag különböző rendszerek eseménytere matematikailag is különböző, azaz nem izomorf kell legyen. Például egy spin nélküli tömegpont \mathbb{F} fázistere nem izomorf (pontosabban nem diffeomorf) két tömegpont $\mathbb{F} \times \mathbb{F}$ fázistérével. Ezt egy kissé körülményesen, de a későbbiek szempontjából jól használhatóan úgy fogalmazhatjuk meg, hogy ha $\mathbb{F} := \mathbf{E} \times \mathbf{E}^*$ az egy részecske fázistere, akkor a $\mathbf{Q} : \mathbb{F} \rightarrow \mathbf{E}$ és a $\mathbf{P} : \mathbb{F} \rightarrow \mathbf{E}^*$ helyzet és impulzus (fizikai mennyiségek) eseményei generálják az eseményteret, míg a két részecske eseményterét $\mathbf{Q}_1 := \mathbf{Q} \circ \text{pr}_1 : \mathbb{F} \times \mathbb{F} \rightarrow \mathbf{E}$, $\mathbf{Q}_2 := \mathbf{Q} \circ \text{pr}_2$, $\mathbf{P}_1 := \mathbf{P} \circ \text{pr}_1$ és $\mathbf{P}_2 := \mathbf{P} \circ \text{pr}_2$ fizikai mennyiségek generálják.

Ez rendjén van. Azonban bármely egyrészecske-fázistér ugyanaz, azonban világos, hogy a különböző tömegű részecskék fizikailag különbözők. Egy kicsit tovább gondolkodva azt is látjuk, hogy két azonos tömegű részecske sem azonosan viselkedik, ha különböző erők hatnak rájuk. A fázistér (az eseménytér)

nem elegendő a szóban forgó fizikai rendszerek jellemzéséhez. A fizikai rendszer nem csak a részecske (részecskék); beleértendő a részecskéket érő hatások (kölcsonhatások) is.

Az is alapvető kérdés tehát, *mi történik* a részecskékkel. Ezt írja le a fázisétren a Hamilton-egyenlet (a Newton-egyenlet átfogalmazása), amely megadja az állapotok *időfejlődését*.

Már csak egy bökkenő van, de az nem is akármilyen. Helyzete és impulzusa egy tömegpontnak önmagában nem létezik, csak helyzete és impulzusa egy megfigyelőhöz képest. A fázistér tehát nem a részecskék önnön jellemzője. A fázistér Borel-halmazai nem a részecske eseményei, hanem az eseményei, ahogy egy megfigyelő észleli. Egy állapot – például egy Dirac-mérték – nem a részecske állapota (noha erről szokás beszélni), hanem a részecske állapota, ahogy egy megfigyelő észleli. Az időfejlődés sem a részecske önnön tulajdonsága: ugyanazt a történetet egészen más időfejlődésnek észlelik különböző megfigyelők.

A téridőmodellek segítségével túljuthatunk a problémákon. A megoldás lényege, hogy a fázistér helyett a *folyamattér* adódik; míg a fázistér elemi eseményeinek az a jelentése, hogy *a részecske itt van és ekkora az impulzusa egy megfigyelőhöz képest*, a folyamattér elemi eseménye az, hogy *ez történik a részecskével a téridőben*.

1.3. Kvantumos leírás

Bármely kvantummechanikai rendszer eseménytere egy szeparábilis Hilbert-tér projektorhálója; nevezetesen egy részecske eseménytere is, két részecske eseménytere is. Ha egy tömegpont Hilbert-tere \mathbf{H} , akkor két tömegpont Hilbert-terét $\mathbf{H} \otimes \mathbf{H}$ alakban szokás venni; azonban \mathbf{H} és $\mathbf{H} \otimes \mathbf{H}$ izomorfak (létezik közöttük unitér leképezés). Még élesebben vetődik fel tehát a kérdés, mint klasszikusan: mi különbözteti meg a különböző rendszereket? A fázistérre utalással a helyzetek és impulzusok segítségével tehetünk különbséget a részecskék száma szerint. Nevezetesen, egy spin nélküli részecske esetén a $Q : \mathcal{B}(\mathbf{E}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathbf{H})$ és $P : \mathcal{B}(\mathbf{E}^*) \rightarrow \mathcal{P}(\mathbf{H})$ a Heisenberg-féle felcserélésnek eleget tevő (pontosabban a Fourier-transzformációval összekötött) helyzet és impulzus (fizikai mennyiségek) generálják az eseményteret, két részecske esetén pedig $Q_1 := Q \otimes I : (\mathbf{E}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathbf{H} \otimes \mathbf{H})$, $Q_2 := I \otimes Q$, $P_1 := P \otimes I$ és $P_2 := I \otimes P$ generálják.

A Hilbert-tér (az eseménytér) és a generáló fizikai mennyiségek megnevezése még nem elegendő a szóban forgó fizikai rendszerek jellemzéséhez, ugyanúgy, mint klasszikusan. A fizikai rendszer nem csak a részecske (részecskék); beleértendő a részecskéket érő hatások (kölcsonhatások) is.

Itt is alapvető kérdés, mi történik a részecskékkel. Ezt írja le a Hilbert-téren a Schrödinger-egyenlet, amely megadja (megadja? lásd később) az állapotok időfejlődését.

Természetesen itt is felmerül a probléma a megfigyelőtől való függés. Nem a részecskék eseményeit és állapotait kapjuk meg a szokásosan, hanem az eseményeiket és az állapotaikat, ahogy egy megfigyelő észleli.

A téridőmodellek segítségével itt is megkonstruálható a folyamatok Hilbert-tere, amelyben az elemi esemény az, hogy *ez történik a részecskével a téridőben*; de ez korántsem olyan elegánsan és természetesen tehető meg, mint a klasszikus esetben: a megfigyelők szerepe nem küszöbölhető ki teljesen (a mai tudásunk szerint).

1.4. A klasszikus mechanika ideológiája

Tekintsünk tömegpontok rendszerét. A rendszer állapot-előkészítése a helyzet- és impulzusértékek megadása. Ez elvben lehetséges; ha csak egy-két tömegpontról van szó, akkor lényegében gyakorlatilag is lehetséges. Nagyon sok tömegpont – egy test molekuláira – azonban már gyakorlatilag lehetetlen. A klasszikus statisztikus mechanika felfogása szerint a sok-részecske rendszer valójában pontosan meghatározott, a leírásra használt valószínűség csak gyakorlati szükségserűség, amely a mi tudásunk hiányában jelenik meg. Persze nem csak sok részecskére, hanem egyetlenre is felmerülhet a gyakorlatban a valószínűség.

Egy statisztikus sokaság nem tiszta állapotát úgy lehet elképzelni, hogy pontosan meghatározott különféle tiszta állapotú egyedekből áll.

Összefoglalva:

C.1. *Egy klasszikus rendszer létezésének folyamata bizonytalanságtól mentes; elvben ezt a bizonyosságot a tiszta, azaz szórámentes állapotok tükrözik. A nem tiszta azaz nem szórámentes állapotok csak tudásunk hiányát tükrözik: a valószínűség szubjektív jellegű. Egy statisztikus sokaság pontosan meghatározott különféle egyedekből áll.*

A klasszikus mechanika a látható, kézzel fogható – makroszkopikus – objektumok leírásával alakult ki, ezért fogalmai is ezekhez a objektumokhoz kötődik. Ezért nem szokás mérésről beszélni a klasszikus mechanikában; a mérés nem okoz problémát: látjuk, tapintjuk, mi történik, és ez nem befolyásolja a rendszer létezésének a folyamatát. Egy madár röpte, egy labda gurulása lényegtelen változást szenved azáltal, hogy egy fénycsóva vetül rá.

Összefoglalva:

C.2. *Egy rendszeren végrehajtott mérés nem zavarja meg (nem befolyásolja) a rendszert.*

Ez maga után vonja, hogy elvben nem csak igen-nem kísérlet valósítható meg: egymásutáni (gyors) eldöntendő kérdésekre kapott igen-nem feletekkel megválaszolható kérdést is eldönthetünk, mint a barkochbában.

Ebből az elvből származik az állapotbeugrás képze. Tekintsünk ugyanis egy rendszert, amelyről hiányos az információnk, azaz nem-tiszta állapottal írjuk le. Ha végrehajtuk rajta egy mérést, a méréssel kapott információ segítségével módosítjuk a leíró állapotot: az állapot *beugrik* egy másik, a mérés által meghatározott állapotba. Ez állapotbeugrás azonban nem a rendszer valóságos fizikai történése, hiszen a rendszerrel semmi sem történt, a mérés nem befolyásolta; a tudatunkban történt változás: a beugrás, csak úgy, mint a valószínűség, *szubjektív*.

Sokszor mondják, hogy kétféle állapotváltozás van a kvantummechanikában: az egyik, a folytonos, amelyet a Schrödinger állapot ír le, a másik a diszkrét, amikor mérésnél átugrik más állapotba. Erre nekem csak az a kérdésem van: honnan tudja a részecske, hogy most nem mérik, tehát folytonosan kell változnia, most meg mérik, tehát ugrania kell?

1.5. A kvantummechanika ideológiája

A kvantummechanikában nincs szórámentes állapot, tehát elvben is lehetetlen mindent pontosan meghatározni. Egy állapot előkészítésében persze a tudásunk, képességeink korlátai is okozhatnak bizonytalanságot. Egy statisztikus sokaság nem tiszta állapotát nem lehet úgy elképzelni, hogy különféle pontosan

meghatározott tiszta állapotú egyedekből áll (egy Gleason-operátort sokféleképpen lehet tiszta állapotok σ -konvex kombinációja).

Összefoglalva:

Q.1. *Egy kvantumrendszer létezésének folyamata mindig magában foglal valamely bizonytalanságot; ezt az objektív bizonytalanságot a tiszta állapotok tükrözhetik. A nem tiszta állapotokban a szubjektív és objektív valószínűség összekeveredik: egy statisztikus sokaság nem pontosan meghatározható különböző egyedekből áll.*

A kvantummechanika közvetlenül nem érzékelhető – mikroszkopikus – objektumok leírására vonatkozik. Ezért itt a mérés mikéntje alapvető fontosságú elvi kérdés, amely még ma sincs tisztázva. Rengeteg próbálkozás van a méréseknek a kvantummechanikán belüli megfogalmazására; ez azonban eleve kudarcra ítélt igyekezet, hiszen a mérések általában a kvantummechanika érvényességi körén kívül eső fizikai jelenségeket, objektumokat használnak; például a fényt.

A mérés általában erősen befolyásolja a rendszer létezésének a folyamatát. Egy elektron lényegesen megváltoztatja a pályáját, ha ütközik egy fotonnal.

Összefoglalva:

Q.2. *Egy rendszeren végrehajtott mérés általában megzavarja (befolyásolja) a rendszert.*

Emiatt megválaszolandó kérdésekre általában nincs felelet.

A kvantummechanika szokásos tárgyalásaiban elfogadott képzet (sőt olykor posztulátum), hogy ha egy fizikai mennyiség mérésekor az eredmény a mennyiség egy sajátértéke, akkor a rendszer beugrik abba a sajátállapotba. Ez a klasszikus szubjektív beugrásnak (amikor valójában semmi sem történik a rendszerrel) az indokolatlan átvitele egy objektív beugrásra; a mérés során ugyan valóban történik valami a rendszerrel, azaz átmegy egy másik állapotba, de általában semmi sem indokolja, hogy ezt az új állapotot a mérési eredmény a mondott módon egyértelműen meghatározza. Ez a képzet különféle paradoxonokra vezetett (Einstein–Podolsky–Rosen), amellyel a kvantummechanikát akarták cáfolni (pedig csak a beugrási képzetet cáfolják).

Ezért honosodott meg a – helytelen – átmeneti valószínűség elnevezés is. Legyen a ψ egységvektor egy A fizikai mennyiség α értékű sajátvektora. Arra a kérdésre, hogy a φ egységvektorral jellemzett tiszta állapotban „ α -e az A értéke?” az igen valószínűsége $|\langle \varphi, \psi \rangle|^2$. A beugrási elv szerint az igen válasznál a rendszer beugrik a φ által jellemzett állapotba, vagyis az adott valószínűséggel átmegy ψ -ből φ -be.

1.6. A kvantummechanikai állapotokról és mérésekről

1.6.1. Általános megjegyzések

Tekintsünk csak egyetlen részecskét. Szemléletesen azt mondhatjuk, hogy a tiszta állapotok objektív valószínűsége azt jelenti, hogy maga a részecske se tudja pontosan, mi van vele. A kevert állapotok szubjektív-objektív valószínűsége azt jelenti, hogy mi még azt sem tudjuk, amit tudhatnánk.

A kvantumállapotok fizikai valóságának elképzelése azonban olykor szinte lehetetlen (a klasszikus fogalmaink beidegződése miatt).

Szokásos tévedés, hogy egy szuperpozíciót keveréknek fognak fel. Tekintsük a ψ és φ egységvektoroknak megfelelő tiszta állapotokat; ezeknek

- egy szuperpozíciója egy $a\psi + b\varphi$ alakú egységvektornak megfelelő tiszta állapot, ahol a, b nemnulla komplex számok úgy, hogy $|a|^2 + 2\operatorname{Re}(a^*b\langle\psi, \varphi\rangle) + |b|^2 = 1$

- egy keveréke egy $\alpha|\psi\rangle\langle\psi| + \beta|\varphi\rangle\langle\varphi|$ Gleason-operátor, ahol α, β pozitív számok úgy, hogy $\alpha + \beta = 1$.

Nem kell magyarázni, hogy a szuperpozíció és keverék lényegesen különböző, de érdemes ezt konkrét formálákkal megmutatni. A P esemény (projektor) valószínűsége a szuperpozícióban

$$|a|^2\|P\psi\|^2 + 2\operatorname{Re}(a^*b\langle P\psi, P\varphi\rangle) + |b|^2\|P\varphi\|^2,$$

a keverékben

$$\alpha\|P\psi\|^2 + \beta\|P\varphi\|^2.$$

Ezek nem lehetnek egyenlők minden P esetén.

Ha $P\psi$ és $P\varphi$ ortogonálisak, és $\alpha = |a|^2, \beta = |b|^2$, akkor persze egyenlőség áll. Speciálisan, ha ψ és φ ortogonálisak, és P a ψ vagy a φ által meghatározott elemi esemény. Ez a néhány egyenlőség azonban nem jelenti a két állapot egyenlőségét.

Ehhez kötődik a tiszta állapot és az elemi esemény összekeverése.

Ha valamely állapotban a ψ és φ egységvektorok meghatározta elemi esemény valószínűségeinek az összege 1, akkor állíthatjuk, hogy az állapot a fenti keverék.

Szokásosan viszont ezt mondják: ha egy állapotban a ψ és φ állapotok valószínűségének az összege 1, akkor a szóban forgó állapot a ψ és φ állapotok egy keveréke. Ez semiképpen sem áll.

Egy hullámcsomagot (tiszta állapot) még csak elképzelünk, elég szemléletes: a részecske ott kószál, maga sem tudja pontosan hogy, a hullámcsomag középpontja körül. De hogyan képzeljük el azt az állapotot, amely két egymástól igen távoli középpontú hullámcsomag szuperpozíciója („két púpú” hullámcsomag)? A részecske maga sem tudja, hogy itt kószál-e vagy kétszáz kilométerrel arrébb? Ezt a lehetetlenséget védik ki azáltal, hogy a szuperpozíció helyett keverékre gondolnak: a részecske tudja, hogy itt vagy ott kószál, csak mi nem.

Az állapotokat mérésekkel teszteljük. Elvben könnyű beszélni az igen-nem mérésekről, gyakorlatilag azonban a mérések egészen másfélék, és a mérési eredményekből levont következtetések sokszor kétségesek.

1.7. Energiamérés?

Vizsgáljuk meg a hidrogénatom energiaszintjeinek mérését. Azt az eldöntendő kérdést tesszük fel az az atomban valamely állapotban levő elektronnak, hogy „ennyi az energiaértéked?” Dehogy! Fehér fényvel bevilágítjuk az alapállapotú hidrogénatomot (valójában sokat egyszerre, így valószínűsítva meg a sokaságot), aztán megmérjük a kibocsátott fény frekvenciáját. Emögé tesszük azt a képet, hogy a bevilágítás gerjeszti az atomot, az elektron a fényből elnyel bizonyos (jól meghatározott) frekvenciájú összetevőket, ezáltal átugrik egy másik állapotba (de ez nem a korábbiakban említett, a mérés eredménye által létrejött beugrás!), majd fény kisugárzása közben visszaugrik az alapállapotba (ez sem olyan beugrás). Ez igen szemléletes, minden bizonynyal így is történik, csak a kvantummechanika nem tudja ezt a folyamatot leírni (lásd később).

1.8. Spinmérés?

Vizsgáljuk meg a Stern–Gerlach-kísérletet, amelyről azt szokás mondani, hogy spinkomponens mérését teszi lehetővé.

Egy adott spinállapotú részecskenyalábot keresztül bocsátanak egy térrészen, amelyben közelítőleg homogén mágnes mező van. A térrész mögötti ernyőn detektáljuk a részecskék becsapódását, amelyek általában két jól elkülönülő pont körül koncentrálnak. Ha az egyik becsapódási pontnál az ernyőt egy másik mágneses mezővel helyettesítik, és hátrébb új ernyőt helyeznek el, akkor az új ernyőn egy vagy két becsapódási pont lesz attól függően, hogy az új mágneses mező párhuzamos-e az eredetivel vagy sem.

Ebből arra következtetnek, a mágneses mező beugratja a spint a mágneses mezővel párhuzamos („felfelé”), illetve azzal ellentétes („lefelé”) irányba; a nyaláb eszerint két részre bomlik, a részecskék egy része „fent” csapódik be, egy másik része meg „lent”; a becsapódások mennyiségi aránya azt mutatja, milyen volt az eredeti nyaláb spinje, vagyis mi a valószínűsége a eredeti spinállapotból a „fel”, illetve a „le” állapotba való átmenetnek.

A kísérlet pontos kvantummechanikai leírását nem szokták megadni, csak bizonyos a spint érintő formulákat írnak föl. Pedig nem túl bonyolult az eset. Tegyük fel, hogy a részecske kezdeti állapotában a spint valamely irányú a sajátvektora írja le. Ha a^+ , illetve a^- a „fel”, illetve a „le” (a mágneses mezővel párhuzamos, illetve azzal ellentétes) spin-állapotvektor, akkor $a = \alpha^+ a^+ + \alpha^- a^-$.

A részecske állapota legyen

$$\psi a = \psi(\alpha^+ a^+ + \alpha^- a^-) =: \psi^+ a^+ + \psi^- a^-,$$

ahol ψ egy hullámcsomag. A Schrödinger-egyenlet szerint a részecske állapota minden pillanatban

$$\varphi^+ a^+ + \varphi^- a^-$$

alakú lesz. Elég hosszú idő után φ^+ és φ^- lényegében egy-egy, egymástól távoli középpontú hullámcsomag számszorosa. Vagyis az eredmény egy „felfelé” spinű és egy „lefelé” spinű hullámcsomag *szuperpozíciója*. Szó sincs arról, hogy a részecske átment volna a „fel” vagy a „le” spin sajátállapotba.

A becsapódások szokásos interpretációja akkor lenne helytálló, ha az állapot a $\varphi^+ a^+$ és $\varphi^- a^-$ által meghatározott tiszta állapotok *keveréke volna*.

Továbbá azt is mondják, hogy a Stern–Gerlach-kísérlettel megmérhető a spin: a „felfelé” haladó nyalábban a „fel” spinállású (állapotú) részecskék vannak, a másikban pedig a „le” spinállásúak. Ez tipikusan az állapot és esemény szokásos összetévesztése, amiről már szóltunk. Egy állapot kimérése azt jelenti, hogy minden eseményre megmérjük, milyen valószínűséggel következik be. A Stern–Gerlach-kísérlet mint mérés a részecske adott állapotában csak a „felfelé” és a „lefelé” esemény valószínűségét adja meg, ami nem határozza meg az állapotot. Például, ha a becsapódások mennyisége a két helyen ugyanaz, a mérendő spinállapot lehet $\frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ + a^-)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ - a^-)$, $\frac{1+i}{2}a^+ + \frac{1-i}{2}a^-$, stb.

Egyébként a kísérlet mint mérés eredménye nem eldöntendő kérdésre adott válasz: se azt nem kérdezi, hogy „felfelé” áll-e a spined, sem azt, hogy „lefelé” áll-e.

1.9. A mechanikák érvényességi köre

A klasszikus mechanika az első fizikai elmélet, amely régóta igen jól kidolgozott, pontos matematikai alapokon nyugszik. Nagy sikere arra indította elődeinket, hogy azt higgyék, a világot a klasszikus fizika törvényszerűségei igazgatják. Az a meggyőződés alakult ki, hogy a világ determinisztikus, azaz bizonytalanság, valószínűség csak a tudásunk hiányának a következménye. Továbbá a folyamatok reverzibilisek, ami azt jelenti, hogy egy jelen állapotból egyértelműen meg lehet határozni bármely múltbeli állapotát.

A klasszikus statisztikus mechanika az igen nagy részecskeszámú rendszerek elméleteként alakult ki. Alapul azt fogadták el, hogy a részecskerendszer folyamatait a Hamilton-egyenlet (Newton-egyenlet) igazgatja, de képtelenség a 10 a sokadikon adatot mind ismernünk, tehát kénytelenek vagyunk valószínűséghez folyamodni. A „molekuláris káosz” feltételezése és bizonyos elhanyagolások, transzformációk után a statisztikus mechanika magyarázatot ad az indeterminisztikus és irreverzibilis jelenségekre. Ez azonban logikai nonszensz: ha a kindulási elv determinisztikus és reversibilis, akkor semmilyen tisztességes manipuláció nem indokol indeterminisztikus vagy irreverzibilis eredményt.

Épp fordítva áll a helyzet. A valóságban a folyamatok nem tisztán mechanikaiak, a részecskék a kölcsönhatásuk során elektromágneses sugárzást bocsátanak ki, nyelnek el. Ezek a folyamatok eleve indeterminisztikusak és irreverzibilisek, sajnos azonban egyelőre nincs egyenletünk a leírásukra. Ha elhanyagoljuk a sugárzást (amely viszont egy mikroszkopikus részecskékből álló rendszerben igencsak jelentős tényezője a folyamatoknak), akkor jutunk klasszikusan a determinisztikus és reverzibilis Hamilton-egyenlethez, kvantumosan a Schrödinger-egyenlethez.

Mind a klasszikus mechanika, mind a kvantummechanika akkor ad jó leírást, ha az elektromágneses sugárzás (és egyéb nem mechanikai, például gyenge, erős kölcsönhatás) elhanyagolható.

Ez az elhanyagolás elfogadható makroszkopikus testek alkotta rendszerek esetén, tehát a klasszikus mechanika, a Hamilton-egyenletek érvényességi köre viszonylag széles.

Mikroszkopikus testekre azonban ez az elhanyagolás már csak nagyon speciális esetekben alkalmazható. A kvantummechanika érvényességi köre igen szűk. A Schrödinger-egyenlet csak akkor ad megfelelő eredményt, ha a sugárzás kicsi; ez lényegében csak az alacsony energiás szórásoknál, valamint a stacionárius állapotoknál (amikor egyáltalán nincs sugárzás) teljesül. Ez utóbbi szemléletesen így fogalmazható meg: egy atomban az elektron energia-értékeit – a Hamilton-operátor sajátértékeit – jól adja meg a kvantummechanika; azonban a fény elnyelését (az atom gerjesztését) és a fény kisugárzását (a gerjesztés megszűnését) már nem írja le (lásd később).

1.10. A perturbációszámításról

1.10.1. Áttekintés a szokásos tárgyalásról

Van egy H alap-Hamilton-operátor, amihez járul egy K általában időtől függő perturbáció, vagyis a tényleges Hamilton-operátor $H + K$, a Schrödinger-egyenlet $\dot{\psi} = -i(H + K)\psi$.

Legyenek φ_n -ek a H sajátvektorai az E_n sajátértékekkel. A Schrödinger-

egyenlet megoldása

$$\psi(t) = \sum_m c_m e^{-iE_m t} \varphi_m$$

alakú lesz. Ezt az alakot behelyettesítve az egyenletbe (feltéve, hogy a végtelen összegzés és a differenciálás felcserélhető),

$$\dot{c}_n(t) = -i \sum_m K_{nm}(t) c_m e^{i(E_n - E_m)t}$$

adódik, ahol $K_{nm}(t) := \langle \varphi_n, K(t) \varphi_m \rangle$ (persze feltéve, hogy minden φ_n benne van $K(t)$ értelmezési tartományában minden t -re). Ennek a differenciálegyenletnek a megoldását fokozatos közelítéssel próbálják megtalálni. Nevezetesen, valamely $c_m^{(0)}$ nulladik közelítést (kezdő állapotot) a jobb oldalba betéve a bal oldalon megkapjuk az első közelítés deriváltját, $\dot{c}_n^{(1)}$ -t, mint az idő konkrét függvényét, amiből integrálással adódik maga az első közelítés. Ezt betéve a jobb oldalba, kapjuk a bal oldalon a második közelítés deriváltját, mint az idő konkrét függvényét, és így tovább. Általában a kezdő állapotnak egy φ_a -t vesznek, azaz (azaz $c_a^{(0)} = 1$, a többi együttható nulla), és azt mondják, $|c_n^{(k)}|^2$ a φ_n -be való átmenet valószínűsége (noha, mint tudjuk, szó sincs átmenetről) a k -ik közelítésben.

Különösen látványos az időtől független perturbáció esete, amikor egyszerűen ki lehet integrálni a közelítő lépéseket. Lássuk a „folklórt”!

Ekkor

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 = 2|K_{na}|^2 \frac{1 - \cos(E_n - E_a)t}{(E_n - E_a)^2}.$$

1. „Ez a kifejezés akkor vesz fel nagy értéket, ha $E_n = E_a$. Számottevő valószínűséggel csak egyenlő energiájú állapotok közt következik be átmenet. (Az energiamegmaradás tételéről az állapotegyenlet automatikusan számot ad).”

2. „Előfordul, hogy nem egy kiszemelt sajátállapot érdekel bennünket, hanem megelégszünk annak ismeretével, hogy mi a valószínűsége bizonyos típusú állapotok bármelyikébe történő átmenetnek. Ennek kiszámításánál a bennünket érdeklő összes végállapotra összegezni kell:”

$$W := \sum_l |c_l^{(1)}(t)|^2 = \sum_l 2|K_{la}|^2 \frac{1 - \cos(E_l - E_a)t}{(E_l - E_a)^2}.$$

„Különösen ez a helyzet akkor, ha a lehetséges végállapotok igen sűrűn (egymáshoz megkülönböztethetetlenül közel) helyezkednek el, vagy esetleg folytonos sokaságot alkotnak. Ilyen esetben $\rho(E_l) dE_l$ jelölje azon állapotok számát, amelyek a bennünket érdeklők közül a dE_l intervallumba esnek.” Ekkor

$$W = 2 \int_{E'}^{E''} |K_{la}|^2 \frac{1 - \cos(E_l - E_a)t}{(E_l - E_a)^2} \rho(E_l) dE_l.$$

3. Ezután $\rho(E_l)$ -t $\rho(E_a)$ -val közelítve, az $x := \frac{(E_l - E_a)t}{2}$ új integrálási változó bevezetésével

$$W = t |K_l|_{E_l=E_a}^2 \rho(E_a) \int_{(E' - E_a)t}^{(E'' - E_a)t} \frac{1 - \cos 2x}{x^2} dx$$

adódik.

4. „Térjünk át a $t \rightarrow \infty$ határesetre.” Ekkor az integrál értéke 2π , tehát

$$W = 2\pi t |K_l|_{E_l=E_a}^2 \rho(E_a).$$

5. Ebből „az időegység alatt bekövetkező átmenet valószínűségeként a következő eredmény adódik:”

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{W}{t} = 2\pi |K_l|_{E_l=E_a}^2 \rho(E_a).$$

Elemezzük, miről is van szó a fentiekben.

1. Ez úgy értelmes, hogy a kifejezésnek a határértékét kell venni, miközben E_n tart E_a -hoz. Az eredmény

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 = |K_{na}|^2 t^2 \quad \text{ha} \quad E_n = E_a. \quad (1)$$

Az átmenet valószínűség t^2 -tel arányos.

2-3-4. Ez a ködösítés azért kell, hogy egy t -t lecsaljanak, vagyis az átmenet már csak t -vel látszik arányosnak.

5. Ez meg azért kell, hogy még egy t -t lecsaljanak, és egy szépnek mondható eredmény álljon elő. De ha az időegységre eső átmeneti valószínűség konstans, akkor, hiába minden, elég nagy idő eltelte után a valószínűség nagyobb lesz 1-nél.

1.11. Egy közelítés nélküli példa

Legyen a Hilbert-tér \mathbb{C}^2 , és

$$H := \begin{pmatrix} -E & 0 & 0 \\ 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & -E \end{pmatrix}, \quad K := \alpha \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} & 0 \\ e^{-i\omega t} & 0 & e^{-i\omega t} \\ 0 & e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}.$$

A $2\beta := 2E - \omega$ jelöléssel a Schrödinger-egyenlet

$$\begin{aligned} i\dot{c}_1 &= \alpha c_2 e^{i\omega t}, \\ i\dot{c}_2 &= \alpha c_1 e^{-i\omega t} + \alpha c_3 e^{-i\omega t}, \\ i\dot{c}_3 &= \alpha c_2 e^{i\omega t}. \end{aligned}$$

Ez viszonylag egyszerűen megoldható, a $\lambda := \sqrt{\beta^2 + 2\alpha^2}$ jelöléssel a $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = c_3(0) = 0$ kezdeti feltétellel

$$\begin{aligned} c_1(t) &= \frac{1}{2} \left(1 + e^{-i\beta t} \frac{\lambda \cos \lambda t - i\beta \sin \lambda t}{\lambda} \right), \\ c_2(t) &= i e^{-i\beta t} \frac{\alpha}{\lambda} \sin \lambda t, \\ c_3(t) &= \frac{1}{2} \left(-1 + e^{-i\beta t} \frac{\lambda \cos \beta t - i\beta \sin \lambda t}{\lambda} \right), \end{aligned}$$

amiből

$$|c_1(t)|^2 = \frac{1}{4} \left((\cos \lambda t + \cos \beta t)^2 + \left(\frac{\lambda \sin \beta t + \beta \sin \lambda t}{\lambda} \right)^2 \right),$$

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\alpha^2}{\lambda^2} \sin^2 \lambda t,$$

$$|c_3(t)|^2 = \frac{1}{4} \left((\cos \lambda t - \cos \beta t)^2 + \left(\frac{\lambda \sin \beta t - \beta \sin \lambda t}{\lambda} \right)^2 \right).$$

Az „átmeneti valószínűségek” a λ és β által meghatározott peridodikus függvények összegeként áll elő. Ez igaz akkor is, amikor a perturbáció állandó, azaz $\omega = 0$. Nincs csak átmenet: visszajövet is van.

Érdekes a speciális $\beta = 0$ azaz $\omega = 2E$ eset – a perturbáló frekvencia éppen az energiaszintek közötti különbség – az „átmeneti valószínűségek” tisztán peridodikusan változnak:

$$|c_1(t)|^2 = \frac{1}{4}(1 + \cos \lambda t)^2, \quad |c_2(t)|^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \lambda t, \quad |c_3(t)|^2 = \frac{1}{4}(1 - \cos \lambda t)^2.$$

Szokásos szöveg: „ha a hidrogénatomot bevilágító fény frekvenciája épp egy energiaszint-különbségnek felel meg, akkor az elektron átugrik a megfelelő szintre”. Erről szó sincs; még arról sem, hogy ide-oda ugrál, hanem arról, hogy vacillál (oszcillál) az összes szint között.

1.12. A klasszikus és kvantumos állapotfogalom szemléltése

Tekintsünk egy klasszikus, illetve kvantumos eseményrendszert, amelyet *négy különböző elemi esemény* feszít ki:

B:=Borivás, S:=Sörivás, K:=Kólaivás, T:=Tonikivás.

Állapotelőkészítések: az egyetem épületeiben megszólalnak a hangszórók, és felhívják a hallgatókat három különféle alkalommal, hogy gyülekezzenek az aulában mert

I:= Ivászat lesz,

Sz:=Szeszivászat lesz,

Bi:=Borivászat lesz.

Tehát háromféle állapotról van szó.

Összegyűlik a hallgatók sokasága. Mérés végrehajtása: Bort innál? Sört innál? stb. eldöntendő kérdések. A válaszok relatív gyakoriságával adódnak az események valószínűségei a háromféle állapotban.

Klasszikus eset: a hallgatók különfélék, akármelyike a négy ital közül határozottan csak az egyik italt szereti. Íme a valószínűségek:

-	B	S	K	T
I	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$
Sz	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0
Bi	1	0	0	0

Továbbá

-	B vagy S
I	$\frac{1}{2}$
Sz	1
Bi	1

Ehhez nem kell magyarázat.

Kvantumos eset: a hallgatók egyformák az ital tekintetében, akármelyiket egyformán szeretik. Íme a valószínűségek:

-	B	S	K	T
I	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$
Sz	$\frac{5}{8}$	$\frac{5}{8}$	$\frac{1}{40}$	$\frac{1}{40}$
Bi	1	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{4}$

Magyarázat:

I : értelemszerű

SZ : szeszivászatra vannak felkészülve, ezért, amikor meghallják valamelyik szeszre vonatkozó kérdést, erősen hajlanak az igen válaszra; a szeszmentesre vonatkozó kérdés meglepi őket, mert nem arról volt szó, de néhányan azt gondolják, miért ne ihatnánk mást is.

Bi: borivásra vannak felkészülve, ezért a borra vonatkozó kérdésre persze, hogy igennel felel mindenki. A többi kérdés meglepi őket, de mint az előbb, miért ne? Viszont a sör- meg a kólaivás nem népszerű, mert gondolják, majd úgyis jön a bor, és ne keverjük. A tonikot viszont szívesen veszik a remélt bor előtt.

Továbbá

-	B vagy S
I	$\frac{2}{5}$
Sz	1
Bi	1

Magyarázat:

I: ha egyszer ivászat, jöjjön bármi! Ezért van a $\frac{2}{5} > \frac{1}{4} + \frac{1}{4}$

Másféle állapotelőkészítések: az egyetem épületeiben négy-négy emeleten egy időben megszólalnak a hangszórók, mindegyik emeleten az alábbi más-más szöveggel: gyülekezzetek az aulában mert

B-S-K-T:= Borivászat lesz, Sörivászat lesz, Kólaivászat lesz, Tonikivászat lesz.

Aztán két-két emeleten kétféle szöveggel:

B-S:= Borivászat lesz, Sörivászat lesz.

Tehát itt két állapotról van szó.

Feltesszük, hogy mindegyik emeleten ugyanannyi hallgató volt. Összegyűlik a sokaságuk, mérés mint előbb.

Klasszikus eset:

-	B	S	K	T
B-S-K-T	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$
B-S	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0

Érthető: az egyik emeletről jönnek a borivók, a másiktól a sörivók, stb, ugyanannyian.

Kvantumos eset:

-	B	S	K	T
B-S-K-T	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$
B-S	$\frac{4,5}{8}$	$\frac{4,5}{8}$	$\frac{1,5}{8}$	$\frac{1,5}{8}$

Érthető: egyenlő arányban vannak összekeverve a különféle ivászatra hangolt hallgatók, a valószínűségek egyenlők. És az első állapotban nagyobbak, mint $\frac{1}{4}$, a másodikban pedig nagyobbak, mint $\frac{1}{2}$, mert noha például borra van előkészítve, szívesen elfogad más is.

Az esetek matematikai leírása:

Klasszikusan: az eseménytér a $\{B, S, K, T\}$ hatványhalmaza. Az állapotok a valószínűségekkel magukról beszélnek.

Kvantumosan: az eseménytér a \mathbb{R}^3 Hilbert-tér altérhálója, és az elemi események

$$B := \sim (1, 1, \sqrt{2/3}), \quad S := \sim (1, -1, \sqrt{2/3}),$$

$$K := \sim (-1, 1, \sqrt{2/3}), \quad T := \sim (-1, -1, \sqrt{2/3}),$$

ahol \sim az adott vektor által kifeszített egydimenziós altér projektorát jelöli.

Az első állapotelőkészítésnél mind a három állapot tiszta lesz, mégpedig

$$I := \sim (0, 0, 1),$$

$$S_z := \sim (1, 0, \sqrt{2/3}),$$

$$B_i := \sim (1, 1, \sqrt{2/3}).$$

A második állapotelőkészítéseknél keverék állapotok jönnek létre létre, mégpedig

$$B-S-K-T := \frac{1}{4}(B_i + S_i + K_i + T_i),$$

$$B-S := \frac{1}{2}(B_i + S_i).$$