

Függelék

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 jobb oldalának 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.

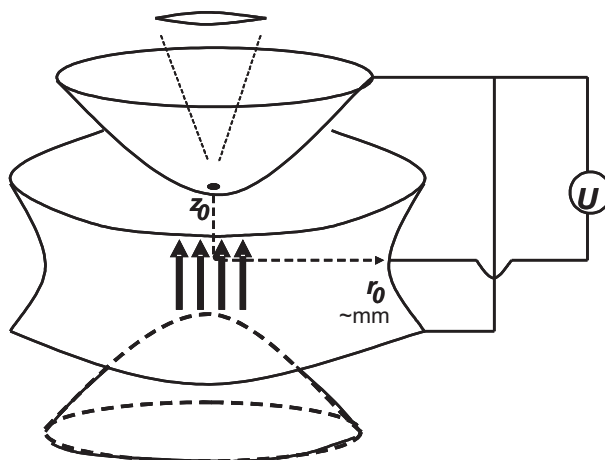
Ionokat a legkönnyebb csapdába fogni, mert rájuk hatnak a könnyen kialakítható erős elektromos terek. Egy pozitív töltésű ion a $\Phi(\vec{r})$ elektromos potenciál minimumában csapdázva marad, ha energiája eléggé kicsi.

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 visszاسugározzák; ezt egy CCD kamerára leképezve, a kamera mér-

¹⁵ Penning, a tudományos célú vákuumtechnika egyik megalapozója a harmincas években konstruált ilyen csapdákat, a vákuumot röntó 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.

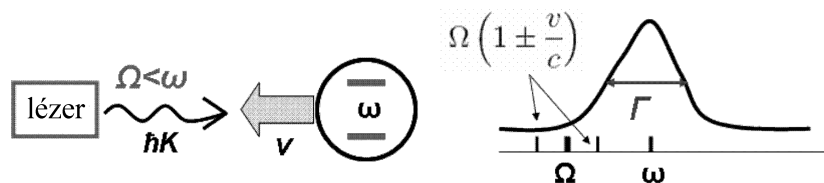
hető jelet ad. Kevésbé erőszakos beavatkozás az ion életébe a nem rezonáns, csak rezonanciához közeli fény szóródásának detektálása.

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 szembefutó 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.

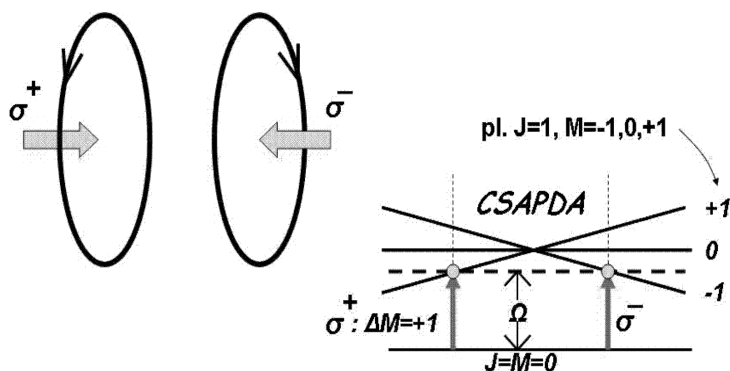
Az elért hőmérsékletet úgy lehet megmérni, hogy a hűtést kikapcsolva, rezonancia-fluoreszcenciával nézzük a hideg Maxwell-sebességeloszlású atomok szétszaladását. A megfigyelések szerint a Doppler-hűtéssel μK hőmérsékleteket lehet elérni, ami jobb a vártnál: a hűtés folyamatáról utóbb kiderült, hogy 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.

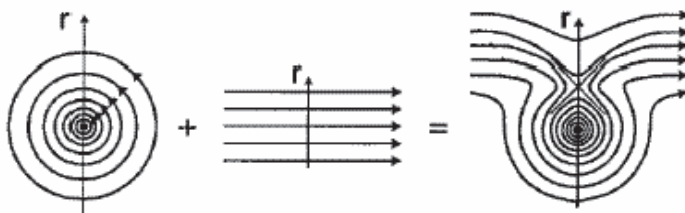
A hűtés előrehaladtával át lehet térni kisebb frekvenciájú lézerekre és ennek megfelelően választott, egymáshoz közelebb eső atomi energiaszintekre.

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 modellrendszereken. 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 nagyjóságú 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:

$$\tilde{H}_{SR}(t) = \hbar \left(\hat{\sigma}_- \tilde{\Gamma}^\dagger(t) + \hat{\sigma}_+ \tilde{\Gamma}(t) \right), \quad (\text{E.20})$$

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:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t) \tilde{\Gamma}^\dagger(t') \rangle &= \int_{-\infty}^t dt' \sum_j |\kappa_j|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_j)(t-t')} \\ &= \int_0^\infty d\tau \sum_j |\kappa_j|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_j)\tau}, \\ \int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t') \tilde{\Gamma}^\dagger(t) \rangle &= \int_{-\infty}^t dt' \sum_j |\kappa_j|^2 e^{-i(\omega_0 - \omega_j)(t-t')} \\ &= \int_0^\infty d\tau \sum_j |\kappa_j|^2 e^{-i(\omega_0 - \omega_j)\tau}\end{aligned}\tag{E.26}$$

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: $|\kappa_j|^2 \approx |\kappa(\omega_j)|^2$,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t) \tilde{\Gamma}^\dagger(t') \rangle &= \int_0^\infty d\tau \int d\omega' g(\omega') |\kappa(\omega')|^2 e^{i(\omega_0 - \omega')\tau}, \\ \int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t') \tilde{\Gamma}^\dagger(t) \rangle &= \int_0^\infty d\tau \int d\omega' g(\omega') |\kappa(\omega')|^2 e^{-i(\omega_0 - \omega')\tau}.\end{aligned}\tag{E.27}$$

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

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty d\tau e^{(\pm i\Omega - \varepsilon)\tau} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{-1}{\pm i\Omega - \varepsilon} = \pi \delta(\Omega) \pm i \mathcal{P} \frac{1}{\Omega},\tag{E.28}$$

amivel

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t) \tilde{\Gamma}^\dagger(t') \rangle &= \frac{\gamma}{2} - i\Delta, \\ \int_{-\infty}^t dt' \langle \tilde{\Gamma}(t') \tilde{\Gamma}^\dagger(t) \rangle &= \frac{\gamma}{2} + i\Delta,\end{aligned}\tag{E.29}$$

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:

$$\dot{\rho} = (-\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\tilde{\rho} + \hat{\sigma}_-\tilde{\rho}\hat{\sigma}_+)(\frac{\gamma}{2} - i\Delta) + (\hat{\sigma}_-\tilde{\rho}\hat{\sigma}_+ - \tilde{\rho}\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-)(\frac{\gamma}{2} + i\Delta), \quad (\text{E.31})$$

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-képhe; 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, $(\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j)$ -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 sűrűlődságnál!

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 jóságú 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 mennyiséget 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 titkosírásra, 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 összecsatolódnak 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. Félvezetőkből 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 kvantummérés 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 megbeszéljük 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 feláldozzák 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 lézerrimpulzusokat 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 rávetítené 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:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{G.5})$$

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 (trészük, 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 antirészecskék 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.