

Összefonódás, koherens állapotok; kvantumos rotor áthaladása apertúrán

Doktori (Ph.D.) értekezés

Dömötör Piroska

Témavezető:

Dr. Benedict Mihály

egyetemi tanár

Fizika Doktori Iskola



SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM
ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK

Szeged

2016

Tartalomjegyzék

Bevezető	1
I. Koherens állapotok és összefonódottság	5
1. Bevezetés: qubitek összefonódása és koherens állapotai	7
1.1. A qubitek Hilbert-tere és a rajta ható operátorok	11
1.2. A szimmetrikus altér	13
1.3. Az atomi koherens állapotok definíciója	16
2. Összefonódás és koherens állapotok qubitek esetén	21
2.1. Formális kritérium szorzattá alakíthatóságra	21
2.2. Koherens állapotok és összefonódottság a szimmetrikus altérben	23
2.3. Az \mathbb{S} altérre merőleges vektorok mind összefonódottak	25
2.4. Összefoglalás	26
3. d -dimenziós rendszerek összefonódása és koherens állapotai	27
3.1. A quditek Hilbert-tere és a rajta ható operátorok	27
3.2. Formális kritérium szorzattá alakíthatóságra	30
3.3. A szimmetrikus altér	32
3.4. Általánosított koherens állapotok	35
3.5. A koherens állapotok és csak azok szorzatállapotok \mathbb{S} -ben	36
3.6. A szimmetrikus altérre merőleges vektorok mind összefonódottak	38
3.7. Összefoglalás	40
II. Apertúrán áthaladó forgó kétatomos molekula feladata	41
4. Bevezetés és elméleti áttekintés	43
4.1. Előzmények	44
4.1.1. Transzmisszió	45
4.1.2. Csapdázódás	45
4.2. Klasszikus elnyújtott részecskék	47
4.2.1. A klasszikus Hamilton-függvény	47
4.2.2. Klasszikus kényszerek	48
4.2.3. Klasszikus átmeneti valószínűség	49
4.3. Belső struktúrával rendelkező kvantumos részecske	50
4.3.1. A kvantum rotor	51
4.3.2. A kvantummechanikai szórási probléma	55
4.4. Összefoglalás	56

5. Forgó molekula problémájának megoldása analitikus közelítéssel	57
5.1. Egy analitikus közelítés	57
5.1.1. Általános egyenlet a módusokra	58
5.1.2. A módusokat szétcsatoló közelítés	59
5.1.3. Az effektív potenciálok tulajdonságai	60
5.1.4. A szórási probléma megoldása	63
5.2. Az analitikus közelítés eredményei	67
5.2.1. Alagutazás	68
5.2.2. Csapdázódás és rezonanciák	68
5.2.3. A rotor méret hatása	70
5.2.4. A tömegeloszlás paraméter hatása	71
5.2.5. Az analitikus közelítés megbízhatósága	71
5.3. Összefoglalás	72
6. Apertúrán áthaladó forgó molekula modellje: Numerikusan egzakt megoldás	75
6.1. A probléma térbeli particionálása és a Green-függvény	76
6.1.1. A Green-függvény definíciója	76
6.1.2. A rendszer particionálása és a probléma végeessé tétele	77
6.1.3. A Green-függvény megszorítása véges régióra: Sajátenergiás korrekciók . .	79
6.1.4. A Green-függvény és a szórási probléma kapcsolata	80
6.2. A releváns fizikai tulajdonságok származtatása a Green-függvény segítségével . .	81
6.2.1. Élettartam	82
6.2.2. Spektrális függvény	82
6.2.3. Állapotsűrűség (DOS)	83
6.2.4. Helyi állapotsűrűség (LDOS)	83
6.3. Diszkrét rács reprezentáció	83
6.4. Numerikus eredmények	85
6.4.1. A numerikus számítások technikai részleteiről	85
6.4.2. A valódi rezonanciák azonosítása	86
6.4.3. Állapotsűrűség és helyi állapotsűrűség	87
6.4.4. Transzmisszió különböző forgási szimmetriák esetén	88
6.4.5. A rendszer valódi kötött állapota	92
6.5. Összegzés	94
6.5.1. Megfontolások az energiáról	95
6.5.2. Kísérleti lehetőségek	95
6.6. Függelék: A Green-függvényes módszer technikai részletei	97
6.6.1. Általánosított Green-féle azonosság	97
6.6.2. Dobozra megszorított energia-sajátfüggvény és S-mátrix	98
6.6.3. Kétdimenziós félvégtelen drót Green-függvénye	100
Összefoglalás	103
Summary	107
Köszönetnyilvánítás	111
Publikációk	113
Irodalomjegyzék	115

Bevezető

Egy fizikai rendszer klasszikus és kvantummechanikai leírása nagyon lényeges különbségeket mutat. Ezek közül talán legfontosabb, hogy a kvantummechanikában alapvető elv az állapotok szuperpozíciójának lehetősége, míg ez a klasszikus mechanikában nem létezik. A szuperpozíció lehetőségét a matematikai struktúrában az biztosítja, hogy az állapotok leírására egy lineáris vektorteret – egy alkalmas \mathcal{H} komplex Hilbert teret – használunk, ahogyan azt először Neumann János fogalmazta meg teljes általánosságban [1]. A Hilbert-tér vektorai az ún. *tiszta* állapotok, amelyek esetén a fizikai rendszer állapotáról a kvantummechanika által megengedett minden információ a rendelkezésünkre áll. Az állapotok szuperpozíciójának lehetősége okozza azt, hogy a kvantummechanikában föllép az *összefonódottságnak* nevezett jelenség. Az irodalomban ez a fogalom kétfajta értelemben is használatos, és dolgozatunkban mi magunk is két különböző értelemben hivatkozunk majd rá.

Az egyik változat esetén már egyetlen kvantumos részecske leírásakor is szokás összefonódottságról beszélni abban a valójában szűkebb értelemben, amikor egy objektum különböző szabadsági fokainak szintjén lép föl ez a fogalom. Az egyik legegyszerűbb példa erre egy feles spinű részecske valamely irányában adott spinvetületének és a megfelelő térbeli impulzusállapotának összefonódása. A jól ismert Stern-Gerlach-féle kísérletben az eredetileg pl. x irányban haladó ezüstatom az erre merőleges pl. z irányú inhomogén mágneses mezővel való kölcsönhatás következtében egy

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+z\rangle \otimes |\uparrow\rangle + |-z\rangle \otimes |\downarrow\rangle) \quad (1)$$

alakú állapotba kerül. Itt a nyilak a belső spinállapot z irányú vetületének sajátállapotait jelentik, míg a $|+z\rangle$ ket vektor egy olyan (normált) térbeli állapotot jelez, amelyben a részecske impulzusának várható értékében a z komponens pozitív, a $|-z\rangle$ állapotban pedig ez a mennyiség negatív. Ennek megfelelően, ha a részecskét a $+z$ irányba eltérülve mérjük, az automatikusan azt is jelenti, hogy az a $|\uparrow\rangle$ spinállapotba került, vagy fordítva. Azaz az eltérés és a spin szabadsági fok ilyen összefonódása miatt a fotólemezen megjelenő csík helyéből már egyértelműen következik a spin értéke. Lényeges hangsúlyozni azonban, hogy a fenti $|\Psi\rangle$ állapot egy egyetlen egészként detektált objektumot pl. ezüstatomot ír le, és a tenzorszorzatokban elkülönített tényezők ezen objektum különböző szabadsági fokait jelölik, amelyek összefonódnak a kölcsönhatás következtében.

Egy másik – és gyakoribb értelemben vett – összefonódásról szokás beszélni abban az esetben, amikor több, de legalább két részecskéről van szó, és ezek külön-külön is detektálhatók. Erre az esetre a legegyszerűbb és legtöbbet idézett példa a D. Bohm [2] által analizált két feles spinű részecske spin szingulett állapota, amely már egy kétrészecskés állapottér eleme. Csupán a spinek állapotára koncentrálna és az állapot helyfüggését levá-

lasztva ennek alakja

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2), \quad (2)$$

ahol az alsó index jelzi azt hogy melyik részecskéről van szó. Ebben az állapotban az egyes tagok úgynevezett szorzatállapotok azaz egyrészecske állapotok egyszerű tenzorszorzatai. A két tag fönti egyszerű lineáris kombinációja viszont már nem ilyen, a $|\Psi^-\rangle$ nem írható föl olyan szorzatállapotként, ahol a tényezők külön külön az egyes részecskék állapotát adnák meg.

Az összefonódottság ez utóbbi lehetőségét a fizikusok körében nagy visszhangot kiváltó munkájában Schrödinger fogalmazta meg 1935-ben [3], ahol egy makroszkopikus test (egy macska) és egy radioaktív atom egy-egy állapotának összefonódottságának paradox voltát hangsúlyozta, s ennek kapcsán azon kételyeinek is hangot adott, hogy vajon a kvantummechanikára mint befejezett fizikai elméletre tekinthetünk-e. Ezen kérdésnek adott egy jóval mélyebb alátámasztást Einstein, Podolsky és Rosen (EPR) cikke [4], amelyben két egymással összefonódott kvantumállapotú részecskével végzett gondolat kísérletet elemeztek. Az analízis azt mutatta, hogy a kvantummechanika vagy a lokalitási elvet, vagy azt az EPR cikk szerzői által természetesnek gondolt előföltevést sérti, hogy ha egy objektumnál valamely tulajdonság az objektum megmérése, tehát megzavarása nélkül jelen van, akkor azt egy teljes elméletnek pontosan meg kell tudnia mondani. A kvantummechanika nem ilyen, s ezért nem tekinthető teljesnek állították Einstein és munkatársai. Mint az jól ismert, a (2) állapotot Bohm éppen az EPR paradoxon kapcsán vezette be. Így egy egyszerűbb rendszeren kétállapotú spinek segítségével ragadta meg az eredetileg a két részecske végtelen-dimenziós koordináta- illetve impulzus-állapotai segítségével demonstrált paradoxon lényegét.

Az EPR érvelés kísérleti ellenőrzésének lehetőségét a J. S. Bell által megfogalmazott egyenlőtlenségek [5] és ennek későbbi variánsai a CHSH-egyenlőtlenségek [6] teremtették meg. A technológiai fejlődés rövidesen lehetővé tette a gondolat kísérletek világából való kilépést és a tényleges kísérleti ellenőrzést. Megfelelő környezettel való irányított kölcsönhatás során sikerült ilyen „(2) típusú” állapotot létrehozni, és az ebből adódó korrelációkat detektálni. A J. Clauser, A. Aspect majd később A. Zeilinger által végzett – fotonok polarizációs állapotainak összefonódásán alapuló – kísérleti vizsgálatok nyomán [7, 8, 9] az a következtetés vonható le, hogy a valóság és az azt helyesen leíró kvantummechanika ellentmond az úgynevezett lokális realizmus elvének, s ez végső soron a két részecske összefonódott állapotának a következménye. Ez a tény kiemelkedő jelentőségű a természetben működő alapvető fizikai elvek megértése szempontjából. Az összefonódottság mint speciális sajátosság azonban az elmúlt évtizedekben ezen túlmenően is az érdeklődés középpontjába került, miután fölismerték, hogy erőforrásként szolgálhat kvantumos kommunikációs, illetve számítási algoritmusokban [10, 11].

Lényegesnek tartjuk még itt megjegyezni, hogy az összefonódott állapotok különös voltának fölismerését Schrödinger 1935-ös cikkének szokás tulajdonítani annak ellenére, hogy a szeparálhatóság, az összefonódottság és a Schmidt dekompozíciós eljárás [12, 13] jelentőségének diszkussziója már megtalálható Neumann János 1932-ben írt alapvető könyvének 6.2 alfejezetében is [1]. Neumann János erre vonatkozó elemzése azonban – valószínűleg érvelésének mély matematikai jellege, és az amögött megbúvó paradox szituáció fizikai elemzésének hiánya miatt – nem keltett lényeges figyelmet.

Munkánkban az összefonódás fönt említett mindkét vonatkozásával foglalkozunk. Az első részben több *különböző* kétállapotú, azaz egyenként kétdimenziós állapotterű részecske úgynevezett koherens állapotairól fogalmazunk meg állításokat, majd kiterjesztjük ezeket a d -dimenziós állapotterű objektumokra is. Ezt az inkább matematikai jellegű problémát követve a második részben egy speciális fizikai rendszert vizsgálunk. Egy egyszerre forgó és a haladó mozgást is végző kvantum os objektum apertúrá n való áthaladásának folyamatát modellezzük, amelynek során egy rotorral modellezett molekula transzlációs és forgási szabadsági fokainak összefonódása valósul meg.

Az értekezés fölépítése

A dolgozat első részében (I.) a kvantummechanika két fontos fogalmának az összefonódásnak és a koherens állapotoknak a kapcsolatát tárjuk föl. Az 1. fejezet az ezzel kapcsolatos ismereteket és definíciókat foglalja össze. Az 1.1 szakaszban röviden fölidézzük a qubitek fogalmát, a rajtuk ható operátorokat és a fölcsere lési relációkban kódolt algebrai struktúrát. Az 1.2 szakaszban fölépítjük a qubitek tenzorszorzat terének szimmetrikus alterét az impulzusmomentum algebrai elméletéből ismert j és m kvantumszámokkal is indexelhető ún. Dicke-féle állapotok [14] egy részhalmazának segítségével. Végül az 1.3 szakaszban ismertetjük az ún. atomi koherens állapotok fogalmát [15], amelyek a ma szokásos szóhasználatban tulajdonképpen qubitek szimmetrikus terének speciális állapotai.

A 2. fejezetben először egy formális kritériumot adunk meg (2.1 szakasz), amelynek segítségével az N qubites rendszer esetén a teljes szeparálhatóság föltételét egy a bizonyításainkhoz alkalmas alakba fogalmazzuk át. Ezután kerül sor annak az eredménynek a megfogalmazására, amely szerint a qubitek rendszerének szimmetrikus alterében a koherens állapotok – és csak azok – nem összefonódtak (2.2 szakasz), illetve bizonyítjuk azt is, hogy a szimmetrikus állapotok ortogonális komplementerében minden állapot összefonódtott (2.3 szakasz).

A 3. fejezet ezeknek az eredményeknek az általánosításait mutatja be arra az esetre, amikor a többrés zű rendszerek kettő helyett d -dimenziósak, azaz a részrendszerek állapotai ún. quditekkel adhatók meg. Ekkor a d -dimenzió által megszabott módon megszapornak a különböző állapotok közt kapcsolatot terem tő léptető operátorok és az állapotokat rendező diagonális nulla nyomú operátorok. Ezek rendszerét a 3.1 szakaszban tekintjük át, majd a qubiteknél látottakkal analóg módon definiáljuk az általánosított koherens állapotokat (3.4 szakasz). A qubiteknél alkalmazott logikai lépések mentén haladva – fölhasználva a párhuzamossági kritérium általánosítását (a 3.2 szakasz) bizonyítjuk az egyes állítások quditekre vonatkozó általánosítását (3.5 és 3.6 szakasz).

A dolgozat második részében (II.) az összefonódásnak a bevezetőben már említett másik szempontjával foglalkozunk: egy olyan problémát vizsgálunk, amelyben egy részecske két szabadsági fokának összefonódásáról lesz szó. Itt egy apertúrá n áthaladó forgó kétatomos molekula problémáját leíró rotor modellt vizsgálunk, ahol a haladó és forgási szabadsági fokok összefonódottságát az akadállyal való kölcsönhatás befolyásolja.

Ez a rész három fejezetre bomlik, melyből a 4. fejezet vezeti be a problémát. A 4.1. szakasz rövid kísérleti és elméleti áttekintése után a fejezet további részében a 4.2. szakaszban definiáljuk a modellt, amelyben a szimmetrikus forgó molekula egy vékony ernyő n

lévő résen szóródik. A mozgásnak két szabadsági foka van: (1) a tömegközéppont mozgása a rés szimmetria tengelye mentén és (2) forgás a rést tartalmazó síkban. A klasszikus mozgás során a részecskék orientációjuktól függően vagy átmennek vagy visszaverődnek. A 4.3. szakaszban ezen kétdimenziós szórási feladat kvantummechanikai megfogalmazását adjuk meg.

Az 5. fejezetben ismertetjük a forgó molekula modell szórási problémájának egy analitikus megoldását. Az eljárás során a forgási szabadsági fokot adiabatikusan eliminálva effektív potenciálok sorozatát kapjuk, amelyek meghatározzák a kölcsönhatási régióban a tömegközéppont mozgását (5.1.2. alszakasz). Ezeket az egydimenziós, minimummal rendelkező effektív potenciálokat tovább közelíthetjük harmonikus potenciállal, melynek segítségével a kölcsönhatási régió közelítő megoldásait analitikusan is megkapjuk (5.1.3. alszakasz). A számítások eredményét ezután az 5.2. szakaszban részletezzük és az 5.3. szakaszban foglaljuk össze.

A 6. fejezetben a forgó molekula modell szórási problémájának egy numerikus megoldását mutatjuk be. A numerikus megoldás a probléma Green-függvényének meghatározásán alapul a szóró objektumot tartalmazó véges tartományon, amelyre majd a rövidség kedvéért a „Doboz” szót használjuk. A 6.1. szakaszban röviden áttekintjük a Green-függvény kapcsolatát a véges tartományon vett hullámfüggvénnyel és az S mátrixszal. A szórás-probléma szempontjából releváns fizikai mennyiségek a Green-függvény segítségével kifejezhetők (6.2. szakasz), segítségükkel elemezzük majd numerikusan egzakt számításaink eredményét a 6.4. szakaszban. A fejezet végén a 6.5. szakaszban röviden összegezzük az analitikus és a numerikus számítások eredményeit, és áttekintjük a modell alkalmazhatóságának határait.

Befejezésül összefoglaljuk a dolgozatban ismertetett eredményeket magyar és angol nyelven. Az értekezést az irodalomjegyzék zárja. Itt megjegyezzük, hogy a többrészi összefonódásról és a koherens állapotokról külön-külön rendkívül nagyszámú cikk és könyv íródott az elmúlt években, amelyek közül mi szükségszerűen csak azokat tudtuk idézni, amelyek a jelen munka eredményeivel szoros kapcsolatban állnak. A második részben bemutatott eredményeknek viszont alig van előzménye az irodalomban, ezeknél a téma újdonsága miatt idézünk viszonylag kevesebb irodalmi munkát.

I. rész

Koherens állapotok és összefonódottság

1. fejezet

Bevezetés: qubitek összefonódása és koherens állapotai

A kvantumrendszerek egyik legsajátosabb tulajdonsága az összetett rendszerek lehetséges összefonódottsága. Tiszta állapotok esetén az összefonódottság fogalma könnyen érthető, tulajdonságai jól jellemezhetőek. Mint ismert, *tiszta* állapotról akkor beszélünk, ha egy fizikai rendszer állapotáról a kvantummechanika által egyáltalán megengedett minden információ a rendelkezésünkre áll. Egy ilyen állapotnak egy \mathcal{H} Hilbert-tér valamely eleme feleltethető meg. Általánosabb esetben az állapotoknak a \mathcal{H} -tér egydimenziós projekcióinak konvex lineáris kombinációi felelnek meg, ez a sűrűségoperátor, ami a klasszikus statisztikus fizikai állapot kvantumos általánosítása, és ez utóbbit *keverék* állapotnak nevezzük. A keverék állapotok esetén az összefonódottság teljes jellemzése még ma is nyitott matematikai probléma [16]. A fizikai megvalósíthatóság szempontjából viszont a tiszta állapotok összefonódottságának vizsgálata sem kevésbé fontos, hiszen a kvantumos algoritmusok és kommunikációs protokollok általában tiszta állapotokon alapulnak [11]. Ebben a dolgozatban is kizárólag tiszta állapotokkal foglalkozunk, azaz olyanokkal amelyeknél a többrésű rendszer együttes állapotait állapotvektorokkal vagy másképpen egydimenziós projekciókkal lehet megadni.

Két részből álló rendszer például két részecske esetén kölcsönhatás hiányában az egyik részecske Hilbert-tere és a másik részecske Hilbert-tere között semmi sem teremt kapcsolatot, így a két részecske együttes kvantumállapota az egyes Hilbert-terekben külön-külön is értelmezhető állapotok tenzori szorzata. Az ilyen nem összefonódott állapotokat *szeparálható* vagy szorzatállapotoknak nevezzük. Tehát két részrendszer esetén egy $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(A)} \otimes \mathcal{H}^{(B)}$ állapot szeparálható, ha

$$\text{létezik olyan } |a\rangle \in \mathcal{H}^{(A)} \text{ és } |b\rangle \in \mathcal{H}^{(B)}, \text{ hogy } |\Psi\rangle = |a\rangle_A \otimes |b\rangle_B, \quad (1.1)$$

azaz $|\Psi\rangle$ tenzorszorzat alakba írható.

A részecskék közötti kölcsönhatás bekapcsolásával azonban ebben az „egyik részecske - másik részecske” képből már általában összefonódást látunk. A kölcsönhatás során olyan állapot is létrejöhet, amely nem szeparálható egyik és másik Hilbert-térbeli állapotok szorzatává, hanem ilyen szorzatok lineáris kombinációjaként adódik. Ezeket az állapotokat *összefonódott* állapotoknak nevezzük. A szeparálhatóság definíciójából kiindulva tehát egy $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(A)} \otimes \mathcal{H}^{(B)}$ állapot összefonódott, ha nem létezik olyan $|a\rangle \in \mathcal{H}^{(A)}$ és $|b\rangle \in \mathcal{H}^{(B)}$,

hogy $|\Psi\rangle$ az (1.1) alakba írható, azaz ha

$$\text{bármely } |a\rangle \in \mathcal{H}^{(A)} \text{ és } |b\rangle \in \mathcal{H}^{(B)} \text{ esetén: } |\Psi\rangle \neq |a\rangle_A \otimes |b\rangle_B. \quad (1.2)$$

Tekintsük most példaként az egyik legegyszerűbb lehetőséget, a két darab qubitből, azaz kétállapotú részrendszerből fölépülő kvantumrendszert. Az A és B qubiteknek megfelelő \mathcal{H}_2 kétdimenziós Hilbert-tereket kifesztítő ortonormált bázisvektorokat jelölje $|0\rangle$ és $|1\rangle$. Ekkor az összetett rendszer $\mathcal{H}_2^{(A)} \otimes \mathcal{H}_2^{(B)}$ tenzorszorzat terét kifesztítik az

$$\begin{aligned} |00\rangle &:= |0\rangle_A \otimes |0\rangle_B, & |01\rangle &:= |0\rangle_A \otimes |1\rangle_B, \\ |10\rangle &:= |1\rangle_A \otimes |0\rangle_B, & |11\rangle &:= |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B \end{aligned} \quad (1.3)$$

bázisvektorok. Az (1.1) definíció szerint világos, hogy ezek szorzatállapotok. Természetesen találunk más szorzatállapotokat is, például ilyen a fönti $|00\rangle$ és $|01\rangle$ bázisállapotok alábbi kombinációja

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |01\rangle) = |0\rangle_A \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_B + |1\rangle_B). \quad (1.4)$$

Általában azonban a szuperpozíció matematikai lehetősége összefonódásra vezet. A legáltalánosabban lehetséges ($|c_{00}|^2 + |c_{01}|^2 + |c_{10}|^2 + |c_{11}|^2 \neq 0$)

$$|\Psi\rangle := \frac{1}{\sqrt{|c_{00}|^2 + |c_{01}|^2 + |c_{10}|^2 + |c_{11}|^2}} (c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle), \quad (1.5)$$

alakú lineáris kombinációkat, tetszőleges c_{ij} együtthatók esetén már nem lehet fölírni a $\mathcal{H}_2^{(A)}$ és $\mathcal{H}_2^{(B)}$ terekből vett vektorok elemi tenzorszorzataként, s ekkor az (1.2) definíciónak megfelelően összefonódott állapotokról beszélünk.

A legismertebb ilyen példák az úgynevezett Bell-állapotok, amelyek az (1.5) általános szuperpozícióból $(c_{00}, c_{01}, c_{10}, c_{11}) = (1/\sqrt{2}, 0, 0, \pm 1/\sqrt{2})$ illetve $(c_{00}, c_{01}, c_{10}, c_{11}) = (0, 1/\sqrt{2}, \pm 1/\sqrt{2}, 0)$ esetén adódnak:

$$|\Phi^\pm\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle \pm |11\rangle), \quad |\Psi^\pm\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle \pm |10\rangle). \quad (1.6)$$

Kettőnél több részrendszer esetén a szeparálhatóságra és az összefonódottságra vonatkozó fönti (1.1) és (1.2) lehetőségek természetes módon általánosíthatóak. N darab $\mathcal{H}^{(n)}$ részrendszer esetén tehát egy $|\Psi\rangle \in \bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}^{(n)}$ állapot *teljesen* szeparálható, ha

$$\text{léteznek olyan } |a_n\rangle \in \mathcal{H}^{(n)} \text{ állapotok, hogy } |\Psi\rangle = |a_1\rangle_1 \otimes |a_2\rangle_2 \otimes \cdots \otimes |a_N\rangle_N. \quad (1.7)$$

Ha nem ez a helyzet, azaz

$$\text{bármely } |a_n\rangle \in \mathcal{H}^{(n)} \text{ esetén: } |\Psi\rangle \neq |a_1\rangle_1 \otimes |a_2\rangle_2 \otimes \cdots \otimes |a_N\rangle_N, \quad (1.8)$$

akkor az állapot összefonódott. Az összefonódás jellege azonban a kettőnél több részrendszer miatt már többféle módon alakulhat. Az (1.8) definíció tartalmazza a semmilyen módon nem szeparálható globálisan összefonódott állapotokat és a részben szeparálhatóság köztes esetét is. Ez utóbbi esetben a teljes tenzorszorzat tér szempontjából nem szeparálható az állapot, de lehet találni olyan több részrendszert magában foglaló fölbontást ahol igen. A 3 qubit esetét vizsgálva ezeket a lehetőségeket egy-egy példán is bemutatjuk.

- Teljesen szeparálható állapot:

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|000\rangle + |010\rangle) = |0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle \quad (1.9)$$

- Részben szeparálható összefonódott állapot. Az 1. qubit leválasztható a maradék rendszerről, de a 2. és 3. qubit részrendszerében már összefonódást látunk:

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|001\rangle + |010\rangle) = |0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle) \quad (1.10)$$

- Semmilyen módon sem szeparálható, globálisan összefonódott állapot:

$$|\Psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|001\rangle + |010\rangle + |001\rangle). \quad (1.11)$$

Matematikai értelemben tehát a kettő vagy több részből összetett kvantumrendszerek összefonódását az teszi lehetővé, hogy az állapottér egy vektortér, ahol az összetett rendszer természetes módon adódó szorzatállapotai mellett azok tetszőleges lineáris kombinációi is a vektortér elemei. Az összefonódottság mennyiségi jellemzésére többféle koncepció ismert – például különböző összefonódási mértékek – mi azonban a kvantifikálással nem foglalkozunk, csak a fenti (1.7) és (1.8) definíciók szerinti esetek szétválasztását végezzük el az alább bemutatandó ún. koherens állapotok kapcsán.

Ahogy az már a dolgozat bevezetőjében jeleztük, a fenti tenzorszorzat fölbontás akkor is érdekes lehet, ha a föllépő egyes tényezők nem feltétlenül két külön is lokalizálható részecske állapotait jelentik. Munkánkban ebben az I. részében azonban az összefonódásra mint különböző egymástól függetlenül mérhető objektumok pl. különböző részecskék spinjeinek tulajdonságára tekintünk. Azon belül előbb N db feles spinnel vagy absztraktabban qubittel foglalkozunk, majd az eredményeket kiterjesztjük arra az esetre, ahol az egyes alrendszerek egy-egy d (véges) dimenziós Hilbert-tér vektoraival írhatók le. Eredményeinkkel kapcsolatot teremtünk az összefonódás és a tenzorszorzat tér úgynevezett koherens állapotai között.

A kvázi-klasszikus tulajdonságokat mutató koherens állapot fogalma elsősorban a harmonikus oszcillátor – vagy kvantumoptikában az oszcillátorral modellezhető mező módusok – leírásából ismert. A koherens állapotokat a harmonikus oszcillátor kapcsán először Schrödinger vezette be [17], olyan kvantumállapotokat keresve, melyek dinamikája a leginkább hasonlít a megfelelő klasszikus mozgásra, miközben az állapothoz tartozó hullámcsomag nem folyik szét, tehát „összetart”, azaz ebben az értelemben koherens. Később az 1960-as évek elején a kvantumoptika elveinek kialakításakor R. Glauber fogalmazta meg a mező általános koherens állapotainak tulajdonságait, és egyben részletes algebrai jellemzésüket is megadta [18]. Tőle függetlenül egyébként J. Klauder is fölismerte [19] ezeknek az állapotoknak a jelentőségét. A későbbiekben más típusú kvantumrendszerek esetén is sikerült definiálni koherens állapotokat, az oszcillátoron túlmutatóan elsőként éppen N db kétállapotú rendszer esetén [20, 15, 21]. A koherens állapotok általános tulajdonságairól azóta számos összefoglaló munka született, lásd például a [22, 23, 24] műveket.

Egy kvantumrendszer esetén a koherens állapotok lehetősége szempontjából az a lényeges sajátosság, hogy a vizsgált Hilbert-tér milyen algebrai struktúra hatását hordozza [25]. Ez természetesen attól függ, hogy milyen fizikai rendszert modellezünk, és a modellünk

milyen dinamikai szimmetria csoportot határoz meg. A Hilbert-tér ezen csoport ábrázolási tere, melyben az általánosított koherens állapotok egy referencia állapot megfelelő transzformáltjaiként adódnak.

A harmonikus oszcillátor ismertebb példája esetén az $\{\mathbb{1}, N, a^+, a\}$ operátorok Lie-algebrája a meghatározó, mely a Heisenberg-Weyl Lie-csoportból eredeztethető, az ábrázolási tér pedig az N operátor nem negatív egész számokkal indexelt sajátállapotai által kifeszített tér, ahol a $|0\rangle$ alapállapot – mely az ábrázolási tér extrémális állapota – lesz a referencia állapot. Ebben az esetben az α komplex számmal folytonosan paraméterezett koherens állapotokat a $|0\rangle$ referencia állapot alábbi eltoltjaiként kapjuk:

$$|\alpha\rangle := \mathcal{D}(\alpha) |0\rangle = \exp(\alpha a^+ - \alpha^* a) |0\rangle. \quad (1.12)$$

A feles spinek vagy kétállapotú atomok modellezésére alkalmas N részecskés qubit rendszer esetén is adottak a koherens állapot értelmes definíciójához szükséges matematikai föltételek [20]. A szokásos spin operátorok segítségével adott egy Lie-algebra és ezen keresztül egy Lie-csoport struktúra ($SU(2, \mathbb{C})$), amelyet a definiáló kétdimenziós Hilbert-téren és ezek tenzorhatványain is ábrázolhatunk. A koherens állapotokat – a tenzorhatvány szimmetrikus alterében – az impulzusnyomaték algebrai elméletéből ismert $\{J_z, J_+, J_-\}$ globális spin operátorok segítségével konstruálhatjuk meg. Ezek az állapotok a kétállapotú atomi rendszerek kontextusában bukkantak föl először az irodalomban, ezért többször *atomi koherens* állapotokként hivatkozunk rájuk [15].

Az összefonódás és a koherens állapotok fogalma külön-külön is lényeges szerepet játszik számos kvantummechanikai probléma esetében, azonban ezek szoros kapcsolatáról az irodalomban szinte alig történik említés. Az atomi koherens állapotok esetében a sokrészecskés tenzorszorzat struktúra miatt értelmes kérdés az állapotokat az összefonódottság szempontjából vizsgálni. A dolgozat ezen első részében, be fogjuk látni, hogy a sokrészecskés qubit állapotok szimmetrikus alterében pontosan a koherens állapotok a nem összefonódott állapotok. Megmutatjuk továbbá, hogy ezen az altéren kívül, azaz a szimmetrikus altér ortogonális komplementerében, minden állapot összefonódott. Az állításokat ezek után kiterjesztjük a d -dimenziós részekből álló összetett rendszerekre is.

A koherens állapotok és az összefonódottság kapcsolatát illetően saját munkánkat megelőzően, egyetlen közleményről van tudomásunk Brif és társszerzői részéről [26]. Ők egy összetett rendszer *két részre* bonthatósága szempontjából tettek megállapítást. Ezen állítás szerint a két részre bontás esetén a részek pontosan akkor nem összefonódottak, ha a fölbontott állapot egy koherens állapot volt, és a részrendszerek is ugyanannak a szimmetriacsoportnak az ábrázolását hordozták mint az eredeti rendszer. Munkánkban ezen cikktől független módon és általánosabban mondjuk ki az előző bekezdésben jelzett tételünket. A két részre bonthatóság helyett az N qubitből fölépülő rendszer teljes szeparálhatóságát vizsgáljuk. Ezen túlmenően a koherens állapotokat hordozó szimmetrikus altér ortogonális komplementerében lévő, speciális nem-szimmetrikus állapotokkal is foglalkozunk. Bizonyításaink és számításaink során a feladathoz tartozó Hilbert-tér struktúrája felől közelítünk, és a fizikusok számára az impulzusnyomaték elméletéből ismert vagy ahhoz hasonló érveket és fogalmakat használunk.

A fejezet további részében előzményként fölidézzük a qubitek fogalmát, a rajtuk ható operátorokat és a fölcsereleési relációkban kódolt algebrai struktúrát, amely megszabja a kétállapotú modellben lehetséges dinamikát. Majd az irodalom alapján ismertetjük az

atomi koherens állapotok konstrukcióját mint a qubit sokrészecske rendszer szimmetrikus alterének speciális állapotait. Saját eredményeinket az N qubites rendszerre vonatkozóan a 2. fejezetben, az N qudites rendszerre pedig a 3. fejezetben mutatjuk be.

1.1. A qubitek Hilbert-tere és a rajta ható operátorok

Az atomi koherens állapotok definíciójához olyan kétállapotú rendszereket kell tekintenünk, amelyek a feles spinnek megfelelő szimmetriával rendelkeznek. Ebben a szakaszban röviden fölidézzük a qubitek fogalmát, a rajtuk ható operátorokat és a fölcserélési relációkban kódolt algebrai struktúrát. A kétállapotú rendszert kifeszítő két ortogonális és normált bázisvektort – a qubitek esetén szokásos módon – jelölje $|0\rangle$ és $|1\rangle$. Így a Hilbert-ter, amiben dolgozunk:

$$\mathcal{H}_2 := \text{span}_{\mathbb{C}}\{|0\rangle, |1\rangle\} = \{c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \mid c_0, c_1 \in \mathbb{C} \text{ és } |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1\}. \quad (1.13)$$

Az egyes részrendszereket alkotó \mathcal{H}_2 Hilbert-térben – az egységoperátor mellett – az alábbi spin operátorok működnek:

$$S_x = \frac{1}{2}(|1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|), \quad S_y = \frac{1}{2i}(|1\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1|), \quad S_z = \frac{1}{2}(|1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0|). \quad (1.14)$$

Az S_i jelölést a feles spin mint speciális kétállapotú rendszer leírásából kölcsönözzük. Az (1.14) operátorokat pedig úgy választottuk meg, hogy $|0\rangle$ és $|1\rangle$ a spin z komponensének sajátállapotai legyenek. Tehát ezen operátorok mátrixai éppen a szokásos Pauli-mátrixok $1/2$ szeresei.

Mint az direkt számolással is ellenőrizhető az (1.14) operátorok záródnak a kommutátorra nézve

$$[S_i, S_j] = i\varepsilon_{ijk}S_k, \quad (1.15)$$

azaz érvényesek az impulzusnyomaték algebrától elvárt szokásos fölcserélési relációk. Így valóban a feles spin leírásánál szokásos algebrai struktúrával van dolgunk, és joggal emlegetünk spineket ebben a matematikai értelemben.

Az impulzusmomentum algebrából ismert jelölést tehát úgy választottuk meg, hogy a $|0\rangle$ és $|1\rangle$ bázisvektoraink az S_z operátorok sajátvektorai $m = \pm 1/2$ sajátértékkel. Továbbá a \mathcal{H}_2 bármely állapotvektora – így a $|0\rangle$ és $|1\rangle$ is – sajátvektora az $S^2 := S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ operátornak is $s(s+1)$ sajátértékkel, ahol $s = 1/2$. Így a két bázisvektort indexelhetjük az s és m sajátértékekkel is:

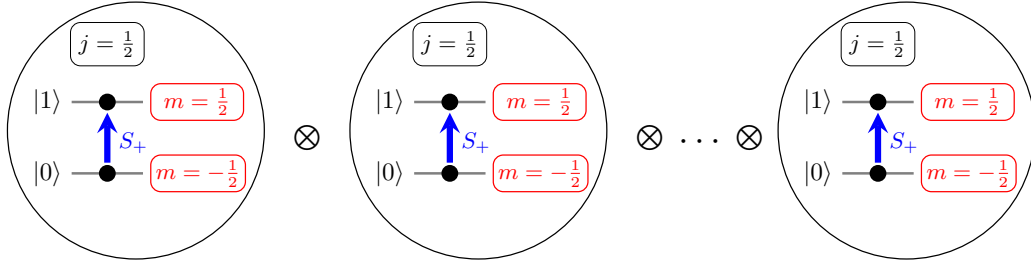
$$|0\rangle = |s = 1/2, m = -1/2\rangle, \quad |1\rangle = |s = 1/2, m = 1/2\rangle. \quad (1.16)$$

Az önadjungált S_x és S_y helyett a számolásokban rendszerint a fölfelé és lefelé léptető operátorokat érdemes tekinteni, amelyek a $|0\rangle$ és $|1\rangle$ bázisállapotokat egymásba viszik

$$S_+ := S_x + iS_y = |1\rangle\langle 0|, \quad S_- := S_x - iS_y = |0\rangle\langle 1|. \quad (1.17)$$

Az S_+ , S_- és S_z operátorhármas is záródik a kommutátorra nézve, hiszen

$$[S_+, S_-] = 2S_z \quad \text{és} \quad [S_z, S_{\pm}] = \pm S_{\pm}. \quad (1.18)$$



1.1. ábra. Az atomi koherens állapotokat N darab $SU(2, \mathbb{C})$ szimmetriát hordozó qubit tenzorszorzat-terében értelmezzük. Pontosabban ezen tenzorszorzat tér szimmetrikus alterében.

A fentieket az algebrai struktúra szempontjából szemlélve megjegyezzük, hogy a $|0\rangle$ és $|1\rangle$ bázisvektorok által kifeszített \mathcal{H}_2 kétdimenziós komplex vektortér az $SU(2, \mathbb{C})$ Lie-csoport definiáló ábrázolási tere. Itt az $SU(2, \mathbb{C})$ rövidítés szokásos módon az egydeterminánsú, két komplex dimenziós, unitér operátorokat takarja. Mint láttuk ezt az ábrázolást az S^2 operátor $s = 1/2$ -del adódó sajátértéke indexeli.

Az S_+ , S_- léptető operátorok kiegészülve a diagonális S_z -vel az (1.18)-ban bemutatott módon záródnak a kommutátorra, így módon kifeszítve a nulla nyomú operátorok $sl(2, \mathbb{C})$ Lie-algebráját. A \mathcal{H}_2 -n ábrázolt $SU(2, \mathbb{C})$ Lie-csoport elemek ezen Lie-algebra megfelelően kombinált elemeinek exponencializáltjaként adódnak. Egy tetszőleges $A \in sl(2, \mathbb{C})$ elemet választva egy szintén tetszőleges $\eta \in \mathbb{C}$ komplex szám segítségével képezhetünk $(\eta A - \eta^* A^\dagger)$ típusú *anti-hermitikus* operátor kombinációkat, melyek exponencializáltjaként adódnak az η -val folytonosan paraméterezett Lie-csoport elemek. Ebben az értelemben tehát a qubitek $SU(2, \mathbb{C})$ szimmetriát hordoznak.

Az általunk vizsgálandó $\bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_2^{(n)}$ tenzorszorzat tér a fentebb bevezetett \mathcal{H}_2 kétdimenziós terekből mint építőkövekből épül föl, ahogyan azt az 1.1 ábrával is szemléltetjük. A $\bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_2^{(n)}$ tenzorszorzat tér tiszta állapotait az egyes \mathcal{H}_2 terek standard $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ bázisának egyszerű tenzorszorzataiként adódó állapotok segítségével fejtjük ki. A két qubites rendszernél látott (1.3) vektorokhoz hasonlóan a rövidség kedvéért alkalmazzuk az alábbi szokásos jelölést:

$$|i_1 i_2 \cdots i_n \cdots i_N\rangle = |i_1\rangle_1 \otimes |i_2\rangle_2 \otimes \cdots \otimes |i_n\rangle_n \otimes \cdots \otimes |i_N\rangle_N, \quad i_n \in \{0, 1\}. \quad (1.19)$$

Így egy tetszőleges $|\psi\rangle \in \bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_2^{(n)}$ tiszta állapotot a standard $\bigotimes_{n=1}^N \{|0\rangle, |1\rangle\}$ bázisban kifejtve

$$|\psi\rangle = \sum_{i_n \in \{0,1\}} C_{i_1, i_2, \dots, i_n, \dots, i_N} |i_1 i_2 \cdots i_n \cdots i_N\rangle. \quad (1.20)$$

módon írhatunk föl, ahol előírjuk az $\sum_{i_n \in \{0,1\}} |C_{i_1, i_2, \dots, i_n, \dots, i_N}|^2 = 1$ normálási feltételt.

A megkülönböztethetetlen részecskékre vonatkozó (anti)szimmetrizálási előírást itt nem vesszük figyelembe, föltesszük hogy az egyes részecskék koordinátatérbeli hullámfüggvényei nem fednek át, és ilyenkor – amint erre Dicke [14] is rámutatott – nem kell a spin és a kapcsolódó statisztika kérdéskörével foglalkoznunk.

A tenzorszorzat térben az úgynevezett kollektív operátorokat az n -dik alrendszerben nemtriviális módon ható operátorok összegeként definiáljuk:

$$\tilde{X} = \sum_{n=1}^N X^{(n)}, \quad \text{ahol} \quad X^{(n)} = \mathbb{1}_1 \otimes \mathbb{1}_2 \otimes \cdots \otimes X_n \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_N. \quad (1.21)$$

A fönti kollektív operátor definícióval megalkottuk a $SU(2, \mathbb{C})$ Lie-csoport definiáló ábrázolásának N -edik tenzorhatványát. Az egyes kétdimenziós irreducibilis ábrázolások tenzorszorzata már reducibilis lesz, azaz fölbomlik irreducibilis ábrázolások direkt összegére. Ebben a direkt összegben számunkra a tenzorszorzat tér szimmetrikus altere által hordozott irreducibilis ábrázolás lesz lényeges. Fizikus beszédmóddal fogalmazva az (1.21) formula alapján N darab feles spin összeadásáról van szó. A következő szakaszban megmutatjuk, hogy a létrejövő „összegben” a részrendszerek cseréje szempontjából szimmetrikus alter éppen a lehetséges legnagyobb ($j = N \cdot 1/2$) impulzusnyomatékhoz tartozó ábrázolást hordozza.

1.2. A szimmetrikus alter

Ebben a szakaszban fölépítjük a qubitek tenzorszorzat terének szimmetrikus alterét az impulzusnyomaték algebrai elméletéből ismert j és m kvantumszámokkal is indexelhető ún. Dicke-féle állapotok egy részhalmazának segítségével [15, 14]. Az N qubitet leíró $\bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_2^{(n)}$ vektortérben tekintsük továbbra is a standard $\bigotimes_{n=1}^N \{|0\rangle, |1\rangle\}$ bázist. Ezen bázis segítségével a vektortér fölbontható fix számú $|1\rangle$ -ek és ennek megfelelően fix számú $|0\rangle$ -k tenzorszorzataként adódó bázisvektorok által kifeszített alterek direkt összegére.

Tekintsük először azokat a báziselemeket, amelyeknek utolsó k qubitje $|1\rangle$ és ezeket jelölje:

$$|N - k, k\rangle := \underbrace{|0\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |0\rangle_{N-k}}_{N-k} \otimes \underbrace{|1\rangle_{N-k+1} \otimes \cdots \otimes |1\rangle_N}_k. \quad (1.22)$$

Ezekből az S_N permutációs csoport elemeinek a segítségével, olyan további bázisvektorok generálhatóak, amelyekben a fix számú $|1\rangle$ és ennek megfelelően fix számú $|0\rangle$ qubiteket fölcseréljük egymás közt. A N darab qubitet egy σ permutációnak megfelelően cserélő P_σ operátorok természetes módon reprezentálják az S_N permutációs csoport elemeit a qubitek $\bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_2^{(n)}$ terén, azaz

$$P_\sigma |i_1 i_2 \cdots i_n \cdots i_N\rangle = |i_{\sigma(1)} i_{\sigma(2)} \cdots i_{\sigma(n)} \cdots i_{\sigma(N)}\rangle \quad (1.23)$$

módon hatnak a tenzorszorzat tér bázisvektorain.

Az előző $|N - k, k\rangle$ vektorból kiindulva és az egyes qubiteket permutálva megkapjuk a fix számú $|1\rangle$ -et tartalmazó alteret:

$$V_k^N := \text{span}_{\mathbb{C}}\{P_\sigma |N - k, k\rangle, \text{ ahol } \sigma \in S_N\}. \quad (1.24)$$

Ezek a V_k^N alterek diszjunktak, mivel a különböző, de fix számú $|1\rangle$ -es qubitek miatt az elemeik páronként merőlegesek egymásra. Így az eredeti Hilbert-tér a V_k^N -ek direkt

összegeként fölbomlik:

$$\bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_2^{(n)} = V_0^N \oplus V_1^N \oplus \cdots \oplus V_k^N \oplus \cdots \oplus V_N^N. \quad (1.25)$$

A dimenziókat megvizsgálva látjuk, hogy az összesen $N + 1$ darab ilyen altér valóban kifeszíti a teljes teret, hiszen egy-egy ilyen altér $\dim(V_k^N) = \binom{N}{k}$ dimenziós. Ezeket a dimenziókat a binomiális együtthatókra vonatkozó jól ismert azonossággal összegezve pedig éppen a fölbontott tér dimenzióját kapjuk:

$$\sum_{k=0}^N \dim(V_k^N) = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} = 2^N = \dim\left(\bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_2^{(n)}\right). \quad (1.26)$$

Példaként nézzük meg a 3 qubit esetét, amikor is a $\bigotimes_{n=1}^3 \mathcal{H}_2^{(n)}$ tenzorszorzat tér az alábbi módon bomlik föl:

$$\underbrace{\{|000\rangle\}}_{V_0^3} \oplus \underbrace{\text{span}_{\mathbb{C}}\{|001\rangle, |010\rangle, |100\rangle\}}_{V_1^3} \oplus \underbrace{\text{span}_{\mathbb{C}}\{|011\rangle, |101\rangle, |110\rangle\}}_{V_2^3} \oplus \underbrace{\{|111\rangle\}}_{V_3^3}. \quad (1.27)$$

Minden egyes ilyen V_k^N altérben konstruálhatunk egy-egy állapot vektort, amely szimmetrikus a lehetséges permutációkra nézve, azaz a qubitek tetszőleges fölcserélése esetén sem változik meg. Ehhez válasszunk egy-egy vektort az egyes alterekben – mondjuk éppen az $|N - k, k\rangle$ -kat. Majd alkalmazzuk rájuk az összes lehetséges permutáció (normált) összegeként definiált \mathcal{S} szimmetrizáló operátort:

$$\mathcal{S} |N - k, k\rangle = \mathcal{N} \sum_{\sigma \in S_N} P_{\sigma} |N - k, k\rangle, \quad (1.28)$$

ahol a P_{σ} -k továbbra is az N darab qubitet permutáló operátorok, \mathcal{N} pedig egy megfelelően megválasztott normálási faktor [27]. Világos, hogy ily módon tetszőleges részrendszercserék szempontjából szimmetrikus állapotot kapunk, hiszen bármely P_{σ} permutációt alkalmazva az \mathcal{S} után az csak átrendezi az összeg tagjait, és visszaadja az eredeti \mathcal{S} operátort:

$$P_{\sigma} \mathcal{S} = \mathcal{N} \sum_{\eta \in S_N} P_{\sigma} P_{\eta} = \mathcal{N} \sum_{\sigma \cdot \eta \in S_N} P_{\sigma \cdot \eta} = \mathcal{S}, \quad (1.29)$$

így $P_{\sigma} \mathcal{S} |N - k, k\rangle = \mathcal{S} |N - k, k\rangle$.

Ezt a szimmetrizáló leképezést az összes $k = 0, 1, \dots, N$ indexre elvégezve $N + 1$ darab páronként merőleges és szimmetrikus állapotot kapunk, amelyek kifeszítik az eredeti tér \mathbb{S} szimmetrikus alterét:

$$\mathbb{S} := \text{span}_{\mathbb{C}}\{\mathcal{S} |N - k, k\rangle; \text{ ahol } k = 0, 1, \dots, N\} \quad (1.30)$$

Vezessünk be most egy a továbbiakban hasznosnak bizonyuló jelölést a szimmetrikus vektorok nem normált verziójára:

$$|N \rangle_k := \binom{N}{k}^{\frac{1}{2}} \mathcal{S} |N - k, k\rangle, \quad (1.31)$$

amely a binomiális együtthatókkal analóg módon arra utal, hogy az egyes szimmetrikus bázisállapotok esetén N qubitből k darab van az $|1\rangle$ -es állapotban. Példaként vegyük ismét a 3 qubit esetét, ekkor az (1.31) jelöléssel:

$$\begin{aligned} |3\rangle &= |111\rangle, \\ |2\rangle &= |011\rangle + |101\rangle + |011\rangle, \\ |1\rangle &= |001\rangle + |010\rangle + |100\rangle, \\ |0\rangle &= |000\rangle. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Az $|0\rangle^N = |00 \dots 0\rangle$ és az $|N\rangle = |11 \dots 1\rangle$ „szélső” vektorok nyilvánvalóan szorzatállapotok. A szimmetrikus alteret kifeszítő többi állapot esetén azonban hiába tudjuk, hogy hány alrendszer van az $|1\rangle$ -es állapotban, ezek a bázisvektorok arról már nem tartalmaznak információt, hogy pontosan mely alrendszer van a $|0\rangle$ -ás vagy $|1\rangle$ -es állapotban, hiszen minden egyes ilyen lehetőség azonos amplitúdóval szerepel. Így a szimmetrikus alter azon bázisállapotai, amelyekre $k \neq 0$ illetve $k \neq N$ már összefonódtak.

Eddigiekben a részecskék cseréje, azaz permutációs szempontból vizsgáltuk a Hilbert-teret. Megalkottuk a szimmetrikus alteret, amelynek bázisvektorait N -el és k -val indexeltük. Tekintsük most már a globális spin operátorokat, amelyeket (1.21)-nek megfelelően az egyes qubiteken ható spin operátorok összegeként értelmezhetünk:

$$J_\alpha := \sum_{n=1}^N S_\alpha^{(n)}, \quad (\alpha = x, y, z, +, -). \quad (1.33)$$

Az \mathbb{S} szimmetrikus alteret kifeszítő $\mathcal{S} |N - k, k\rangle$ (1.28) bázisállapotok – ennek megfelelően természetesen az $|N\rangle_k$ (1.31) nem normált állapotok is – sajátvektorai a J_z operátornak, mégpedig $m = -N/2 + k$ sajátértékkel. A J_z operátor tehát éppen azt számolja, hogy hány $|1\rangle$ -es qubitet tartalmaz a szimmetrizált bázisunk. A szimmetrikus alteret kifeszítő (1.28) bázisvektorok továbbá a $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ operátornak is sajátvektorai $j(j+1)$ sajátértékkel, ahol $j = N/2$. Így ezen bázisvektorainkat az N és k indexek helyett $j = N/2$ -vel és a z -irányú spin m sajátértékeivel is indexelhetjük [14, 15], ahol m lehetséges értékei $-N/2, -N/2 + 1, \dots, N/2$:

$$\left| j = \frac{N}{2}, m = -\frac{N}{2} + k \right\rangle = \binom{N}{k}^{-\frac{1}{2}} |N\rangle_k \quad k \in \{0, 1, \dots, N\}. \quad (1.34)$$

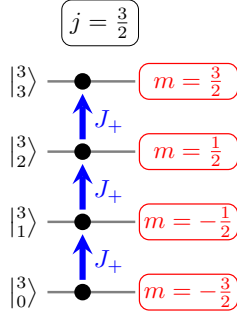
Megjegyezzük, hogy ebben a szakaszban még megőriztük a szokásos fizikus jelölés $1/2$ -es szorzótényezőit (lásd (1.14)), de a következő fejezetben ezt el fogjuk hagyni.

A J_\pm globális léptető operátorok az impulzusnyomaték algebrának megfelelően transzformálják egymásba az (1.34) állapotokat. A j és m szerinti indexeléssel ez a jól ismert

$$J_\pm |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \quad (1.35)$$

formula szerint történik, ami könnyen lefordítható az N és k indexekre is az alábbi módon

$$J_+ |N\rangle_k = (k+1) |N\rangle_{k+1} \quad \text{és} \quad J_- |N\rangle_k = (N-k+1) |N\rangle_{k-1}, \quad k \in \{0, 1, \dots, N\}. \quad (1.36)$$



1.2. ábra. Az \mathbb{S} szimmetrikus alteret kifeszítő nem normált állapotok $N = 3$ qubit esetén. Az egyes bázisvektorokat a J_z operátor m sajátértéke címkézi. A különböző sajátértékekhez tartozó állapotokat pedig a fölfelé és (a lefelé) léptető operátorok kapcsolják össze.

A fönti tulajdonságokat az 1.2 ábrán is szemléltettük $N = 3$ darab qubit példáján. Az egyes bázisállapotokat a J_z operátor m sajátértékével „súlyoztuk”, ahogyan azt az ábra is próbálja sugallani.

Az egyes J_i kollektív operátorok ugyanazokat a kommutációs relációkat teljesítik mint építőköveik az egyes részrendszerekben ható S_i spin operátorok. Az (1.34) formula alapján tehát úgy is fogalmazhatunk, hogy a qubitek tenzorszorzat terének \mathbb{S} szimmetrikus altere az $SU(2, \mathbb{C})$ Lie-csoport $j = N/2$ -vel indexelt, $N + 1$ dimenziós irreducibilis ábrázolását hordozza.

1.3. Az atomi koherens állapotok definíciója

Ebben a szakaszban bevezetjük a kétállapotú atomok (qubitek) rendszerében definiálható kvázi-klasszikus tulajdonságokat mutató koherens állapotokat. Ehhez kiindulásként tekintsük a J_z legkisebb sajátértékéhez tartozó, így a lefelé léptető J_- operátor által már kinullázott ún. „legkisebb súlyú” állapotot:

$$|j = N/2, m = -N/2\rangle = \left| \begin{smallmatrix} N \\ 0 \end{smallmatrix} \right\rangle = |00 \cdots 0\rangle. \quad (1.37)$$

Ebben az állapotban a J_z értéke pontosan $-N/2$, míg a J_x és J_y operátoroknak nincs határozott értéke, a várható értékük viszont nulla. Ezen (1.37) referencia állapot megfelelő transzformációjával olyan állapotot szeretnénk előállítani melyben a \mathbf{J} operátor adott vetületének továbbra is határozott értéke van.

Az ilyen tulajdonságú ún. *atomi koherens* állapotokhoz úgy jutunk, ha a fönti „legkisebb súlyú” állapotot a globális spin operátorokból képzett

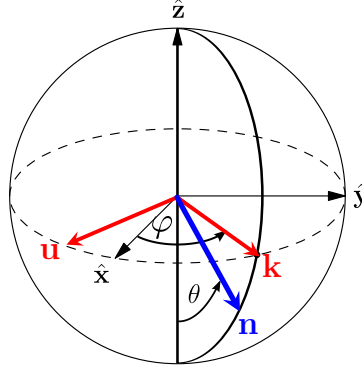
$$\mathcal{R}(\varphi, \theta) := \exp[-i\theta(J_x \sin \varphi - J_y \cos \varphi)] = \exp[-i\theta(\mathbf{J} \cdot \mathbf{u})] \quad (1.38)$$

exponenciális operátorral az alábbi módon eltranszformáljuk [15]:

$$|\tau_n\rangle := \mathcal{R}(\varphi, \theta) \left| \begin{smallmatrix} N \\ 0 \end{smallmatrix} \right\rangle. \quad (1.39)$$

Először is figyeljük meg, hogy $\mathcal{R}(\varphi, \theta)$ nem vezet ki a $j = N/2$ sajátértékkel címkézett \mathbb{S} szimmetrikus altérből, hiszen az exponensben szereplő $\mathbf{J} \cdot \mathbf{u}$ operátor fölcserélhető J^2 -tel.

Az (1.38) $\mathcal{R}(\varphi, \theta)$ transzformáció θ szögű forgatást jelent az $\mathbf{u} = (\sin \varphi, -\cos \varphi, 0)$ irányvektor által kijelölt tengely körül, az alább mindjárt részletezendő értelemben.



1.3. ábra. A forgatást paraméterező θ és φ szögek jelentése. A háromdimenziós térben az $\mathbf{u} = (\sin \varphi, -\cos \varphi, 0)$ irányú vektor körül forgatunk θ szögben, ahol a θ szöget a z -tengely negatív ágától mérjük. Ennek a qubitek Hilbert-terében az (1.38) transzformáció felel meg. A \mathbf{n} vektor a $-\hat{\mathbf{z}}$ vektor \mathbf{u} körüli θ szögű elforgatottja, mely a koherens állapotok ún. Bloch-vektora (1.44).

Megfontolásainkhoz tekintsük az \mathbf{u} „tengely” mellett a rá merőleges $\mathbf{k} = (\cos \varphi, \sin \varphi, 0)$ vektort és segítségével a $J_u := \mathbf{J} \cdot \mathbf{u}$, $J_k := \mathbf{J} \cdot \mathbf{k}$ operátorokat a J_z -vel kiegészítve. Ezen páronként merőleges globális spin operátor hármas éppen egy \mathbf{u} körüli θ szögű forgatásnak megfelelő módon transzformálódik:

$$\begin{aligned} \exp(-i\theta J_u) J_u \exp(i\theta J_u) &= J_u \\ \exp(-i\theta J_u) J_k \exp(i\theta J_u) &= J_k \cos \theta + J_z \sin \theta \\ \exp(-i\theta J_u) J_z \exp(i\theta J_u) &= -J_k \sin \theta + J_z \cos \theta, \end{aligned} \quad (1.40)$$

ahol a szögek jelölését lásd az 1.3 ábrán. Innen a $|\tau_n\rangle$ állapotban vett várható értékek már gyorsan adódnak

$$\langle \tau_n | J_u | \tau_n \rangle = 0; \quad \langle \tau_n | J_k | \tau_n \rangle = \frac{N}{2} \sin \theta; \quad \langle \tau_n | J_z | \tau_n \rangle = -\frac{N}{2} \cos \theta. \quad (1.41)$$

Ennél azonban több is igaz, a $|\tau_n\rangle$ koherens állapotban \mathbf{J} -nek határozott értéke van a $-\hat{\mathbf{z}}$ irány $\mathbf{n} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, -\cos \theta)$ elforgatottjában. Ennek igazolásához tekintsük az (1.40) összefüggések közül az utolsót, amiben fölfedezhetjük a $\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}$ vetületet:

$$\exp(-i\theta J_u) J_z \exp(i\theta J_u) = -(J_x \cos \varphi + J_y \sin \varphi) \sin \theta + \cos \theta J_z = -\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}. \quad (1.42)$$

Ezt fölhasználva

$$\begin{aligned} (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) |\tau_n\rangle &= -[\exp(-i\theta J_u) J_z \exp(i\theta J_u)] \exp(-i\theta J_u) |m = -N/2\rangle = \\ &= -\exp(-i\theta J_u) J_z |m = -N/2\rangle = \frac{N}{2} \exp(-i\theta J_u) |m = -N/2\rangle = \frac{N}{2} |\tau_n\rangle. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Tehát a $|\tau_n\rangle$ koherens állapot a $\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}$ operátor sajátállapota a legmagasabb lehetséges $N/2$ sajátértékkel:

$$(\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) |\tau_n\rangle = \frac{N}{2} |\tau_n\rangle. \quad (1.44)$$

Az \mathbf{n} egységvektort az állapot Bloch-vektorának is szokás nevezni, hasonlóan az egy qubites esethez. Az $\begin{pmatrix} N \\ 0 \end{pmatrix} = |11 \dots 1\rangle$ állapot, amely nyilvánvalóan szimmetrikus és nem összefonódott, de emellett maga is egy koherens állapot, az $\mathbf{n} = -\hat{\mathbf{z}}$ vektorral jellemezhető, ami konzisztensen a korábbiakkal mutatja, hogy J_z sajátállapota $m = -N/2$ sajátértékkel.

Az $\mathcal{R}(\varphi, \theta)$ (1.38) megadásánál az exponenciális kitevőjében szereplő kifejezés átírható a léptető operátorok segítségével. Kihasználva az (1.17) alapján adódó

$$J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-), \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \quad (1.45)$$

inverz összefüggéseket és a θ illetve φ szögek helyett bevezetve az

$$\eta := \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \quad (1.46)$$

komplex paramétert:

$$\mathcal{R}(\varphi, \theta) = \mathcal{R}(\eta) = \exp(\eta J_+ - \eta^* J_-). \quad (1.47)$$

A koherens állapot $|\tau_n\rangle$ jelölése – egy a forgatási szögek helyett lehetséges – másik paraméterezésre utal, amit alább részletezünk. Megmutatható, hogy érvényes az alábbi Baker-Champbell-Hausdorff (BCH) típusú összefüggés [25]

$$\mathcal{R}(\eta) = \exp(\eta J_+ - \eta^* J_-) = \exp(\tau J_+) \exp(\gamma J_z) \exp(-\tau^* J_-), \quad (1.48)$$

ahol $\tau \in \mathbb{C}$ és $\gamma \in \mathbb{R}$ az η -k segítségével kifejezhető az alább részletezett módon.

Az (1.48) kapcsolatnak minden $SU(2, \mathbb{C})$ ábrázolás esetén, így az építőköveket adó $j = 1/2$ -höz tartozó legalacsonyabb dimenziós esetben is teljesülnie kell, ahonnan adódik, hogy

$$\begin{pmatrix} \cos|\eta| & \frac{\eta}{|\eta|} \sin|\eta| \\ -\frac{\eta^*}{|\eta|} \sin|\eta| & \cos|\eta| \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \tau \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{-\gamma/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\tau^* & 1 \end{pmatrix} \quad (1.49)$$

Innen pedig az η komplex szám korábban már bevezetett (1.46) paraméterezésével

$$\tau = \tan \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}, \quad \text{és} \quad \cos \frac{\theta}{2} = e^{-\gamma/2} \Leftrightarrow \gamma = \ln(1 + |\tau|^2). \quad (1.50)$$

Az (1.48) formula jobb oldalán álló szorzatból az először ható operátor a $|j, m = -j\rangle$ -eken egységoperátorként hat, hiszen a nulla kitevőt leszámítva a lefelé léptető operátor tetszőleges hatványa kinullázza $|j, m = -j\rangle$ -t

$$e^{-\tau^* J_-} |j, -j\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\tau^* J_-)^n}{n!} |j, -j\rangle = \mathbb{I} |j, -j\rangle = |j, -j\rangle. \quad (1.51)$$

Ezek után a középső operátor csak szoroz, hiszen J_z sajátállapotára hat:

$$e^{\gamma J_z} |j, -j\rangle = e^{-\gamma j} |j, -j\rangle = \left(\frac{1}{1 + |\tau|^2} \right)^j |j, -j\rangle. \quad (1.52)$$

A szorzat fölbontás utolsóinak ható operátora hajtja végre valójában a lényeges transzformációkat:

$$e^{\tau J_+} |j, -j\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\tau J_+)^n}{n!} |j, -j\rangle = \sum_{n=0}^{2j} \binom{2j}{n}^{\frac{1}{2}} \tau^n |j, -j+n\rangle. \quad (1.53)$$

Az (1.52) és az (1.53) alapján, az utóbbiban elvégezve az $m = -j + n$ átindexelést, megkaptuk a $|\tau_n\rangle$ koherens állapot $|j, m\rangle$ szimmetrikus bázisállapotok – azaz J_z szimmetrikus sajátállapotai – szerinti kifejtését:

$$|\tau_n\rangle = \sum_{m=-j}^j \binom{2j}{j+m}^{\frac{1}{2}} \frac{\tau^{j+m}}{(1+|\tau|^2)^j} |j, m\rangle. \quad (1.54)$$

2. fejezet

Összefonódás és koherens állapotok qubitek esetén

Ebben a fejezetben a 2.2. szakaszban fogjuk igazolni azt az állítást, hogy *egy \mathbb{S} szimmetrikus altérbeli állapot akkor és csak akkor nem összefonódott, ha atomi koherens állapot* [A1]. Majd a fejezet további részében – a 2.3. szakaszban – az \mathbb{S} szimmetrikus altér \mathbb{S}_\perp ortogonális komplementerével foglalkozunk és igazoljuk, hogy *tetszőleges \mathbb{S}_\perp altérbeli vektor összefonódott* [A1]. Mindezek előtt azonban a 2.1. szakaszban egy formális kritériumot adunk meg, amely az N qubites rendszer esetén a teljes szeparálhatóság föltételét egy a bizonyításainkhoz alkalmas alakba fogalmazza át.

2.1. Formális kritérium N qubites rendszer tiszta állapotának szorzattá alakíthatóságára

Meyer és Wallach [28] nyomán egy N qubitből fölépülő rendszerben egy tiszta állapot szeparálható vagy összefonódott voltát eldönthetjük az alábbi formális eljárás segítségével. Az eljárást a szerzők egy N qubit összefonódását jellemző mérték bevezetésénél alkalmazták, számunkra azonban a mérték mögött rejtőző párhuzamossági kritérium bizonyul hasznosnak.

Tekintsünk egy tetszőleges $|\psi\rangle \in \bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_2^{(n)}$ tiszta állapotot a standard $\bigotimes_{n=1}^N \{|0\rangle, |1\rangle\}$ bázisban kifejtve, ahogyan azt az (1.20) formula is megadja. Az n -edik qubitet kiszemelve a $|\psi\rangle$ állapotot fölbonthatjuk az alábbi módon

$$|\psi\rangle = |0\rangle_n \otimes |u^n\rangle + |1\rangle_n \otimes |v^n\rangle, \quad (2.1)$$

bármely $n = 1, 2, \dots, N$ esetén. Itt az $|u^n\rangle$ és $|v^n\rangle \in \bigotimes_{n=1}^{N-1} \mathcal{H}_2^{(n)}$ belüli vektorokat jelöl, amelyek általában nem normáltak.

A fönti (2.1) fölbontást használva megmutathatjuk, hogy $|\psi\rangle$ akkor és csak akkor szorzatállapot, ha $|u^n\rangle$ és $|v^n\rangle$ minden lehetséges n -re párhuzamosak.

Az állítás egyik fele, nevezetesen, hogy szorzatállapot esetén a párhuzamossági tulajdonság teljesül – azaz az $|u^n\rangle = \alpha_n |v^n\rangle$ egyenlőség fönnáll – a következőképpen látható

be. Tegyük föl, hogy $|\psi\rangle$ szorzatállapot, azaz

$$|\psi\rangle = \bigotimes_{i=1}^N (a_i |1\rangle_i + b_i |0\rangle_i), \quad (2.2)$$

alakba írható, ahol $|a_i|^2 + |b_i|^2 = 1$. Ekkor az $|u^n\rangle$ és $|v^n\rangle$ vektorok alakja:

$$|u^n\rangle = b_n \bigotimes_{\substack{i=1 \\ i \neq n}}^N (a_i |1\rangle_i + b_i |0\rangle_i), \quad |v^n\rangle = a_n \bigotimes_{\substack{i=1 \\ i \neq n}}^N (a_i |1\rangle_i + b_i |0\rangle_i) \quad (2.3)$$

és ezek nyilvánvalóan párhuzamosak.

A fordított állítás igazolásához tegyük föl, hogy $|u^n\rangle$ párhuzamos $|v^n\rangle$ -nel minden lehetséges n -re és megmutatjuk, hogy ekkor $|\psi\rangle$ szükségképpen szorzatállapot. A párhuzamossági föltétel szerint tehát a két vektor csak egy komplex együtthatóban térhet el egymástól, vagyis minden n -re: $|v^n\rangle = \alpha_n |u^n\rangle$, ahol $\alpha_n \in \mathbb{C}$. Így tetszőleges n -el indexelt qubitet kiemelve a lehetséges $\{1, 2, \dots, N\}$ közül $|\psi\rangle$ -t fölírhatjuk az alábbi alakban:

$$|\psi\rangle = (|0\rangle_n + \alpha_n |1\rangle_n) \otimes |u^n\rangle = (1 + |\alpha_n|^2)^{-1/2} (|0\rangle_n + \alpha_n |1\rangle_n) \otimes |\tilde{u}^n\rangle, \quad (2.4)$$

ahol a második egyenlőségénél kiemeltük az n -edik qubitet normáló $(1 + |\alpha_n|^2)^{-1/2}$ faktort, és ezzel bevezettük az $|\tilde{u}^n\rangle := (1 + |\alpha_n|^2)^{1/2} |u^n\rangle$ normált, $N - 1$ qubites állapotot.

A (2.4) alakot fölhasználva a szorzattá alakíthatóságot a részrendszerek N száma szerinti teljes indukcióval bizonyítjuk. Ehhez először az $N = 2$ esetet kell megvizsgálnunk. Ekkor az állítás nyilvánvalóan igaz, hiszen (2.4)-ben mondjuk az első qubitet kiszemelve

$$|\psi\rangle = (1 + |\alpha_1|^2)^{-1/2} (|0\rangle_1 + \alpha_1 |1\rangle_1) \otimes |\tilde{u}^1\rangle, \quad (2.5)$$

ahol a maradék $|\tilde{u}^1\rangle$ már egy qubites állapot. Így a szorzat alak áll előttünk.

Ezek után be kell még látnunk, hogy az állítás öröklődik a részrendszerek N számának egyenkénti növelésével. Tegyük föl tehát, hogy az állítás igaz $N - 1$ qubites állapotok esetén, azaz a párhuzamossági föltételekből adódik a szorzattá alakíthatóság. Majd tekintsünk egy $|\psi\rangle$ N qubites állapotot, amely szintén teljesíti a párhuzamossági föltételeket.

Először az i -dik qubitet kiszemelve használjuk a párhuzamosságból (2.4) alapján adódó szorzat alakot. Ezután a kapott $|\tilde{u}^i\rangle$ $N - 1$ qubites állapotról kellene belátnunk, hogy bármely qubitet kiszemelve tudja a párhuzamossági föltételeket. Ehhez bontsuk föl $|\tilde{u}^i\rangle$ -t – a (2.1)-ben bemutatott módon – tetszőleges j -edik ($j \neq i$) qubit szerint:

$$|\psi\rangle = \frac{(|0\rangle_i + \alpha_i |1\rangle_i)}{\sqrt{1 + |\alpha_i|^2}} \otimes |\tilde{u}^i\rangle = \frac{(|0\rangle_i + \alpha_i |1\rangle_i)}{\sqrt{1 + |\alpha_i|^2}} \otimes (|0\rangle_j \otimes |u^{ij}\rangle + |1\rangle_j \otimes |v^{ij}\rangle), \quad (2.6)$$

és igazoljuk $|u^{ij}\rangle$ és $|v^{ij}\rangle$ párhuzamosságát.

Szemléljük ehhez a fönti fölbontást a j -edik qubit szempontjából:

$$|\psi\rangle = |0\rangle_j \otimes \frac{(|0\rangle_i + \alpha_i |1\rangle_i)}{\sqrt{1 + |\alpha_i|^2}} \otimes |u^{ij}\rangle + |1\rangle_j \otimes \frac{(|0\rangle_i + \alpha_i |1\rangle_i)}{\sqrt{1 + |\alpha_i|^2}} \otimes |v^{ij}\rangle, \quad (2.7)$$

és hasonlítsuk össze az

$$|\psi\rangle = \frac{(|0\rangle_j + \alpha_j |1\rangle_j)}{\sqrt{1 + |\alpha_j|^2}} \otimes |\tilde{u}^j\rangle. \quad (2.8)$$

alakokkal, ami (2.4) alapján a j -dik qubitre alkalmazott párhuzamossági föltételből adódik. Az összehasonlítás eredményeként

$$\frac{|\tilde{u}^j\rangle}{\sqrt{1+|\alpha_j|^2}} = \frac{(|0\rangle_i + \alpha_i |1\rangle_i)}{\sqrt{1+|\alpha_i|^2}} \otimes |u^{ij}\rangle \quad \text{és} \quad \alpha_j \frac{|\tilde{u}^j\rangle}{\sqrt{1+|\alpha_j|^2}} = \frac{(|0\rangle_i + \alpha_i |1\rangle_i)}{\sqrt{1+|\alpha_i|^2}} \otimes |v^{ij}\rangle, \quad (2.9)$$

ahonnan következik, hogy $\alpha_j |u^{ij}\rangle = |v^{ij}\rangle$, azaz tetszőleges j -re állnak a párhuzamossági föltételek. Ekkor az indukciós föltevés értelmében (2.6)-ban az $|\tilde{u}^i\rangle$ $N-1$ qubites állapot szorzattá alakítható, így a párhuzamossági föltételeket teljesítő $|\psi\rangle$ N qubites állapot szorzatállapot.

2.2. Koherens állapotok és összefonódottság a szimmetrikus altérben

Ebben a szakaszban igazoljuk, hogy egy \mathbb{S} szimmetrikus altérbeli állapot akkor és csak akkor nem összefonódott, ha atomi koherens állapot [A1].

A koherens állapotok szorzatállapot volta a definícióból nem látszik azonnal, de viszonylag gyorsan kikövetkeztethető. Ehhez használjuk föl az (1.31) formulával praktikusán bevezetett jelölésünket a $|\tau_n\rangle$ koherens állapot $|j, m\rangle$ szimmetrikus bázisállapotok szerinti (1.54) kifejtésében. A $j = N/2$ és $m = -N/2 + k$ összefüggéseknek megfelelően kihasználva az $\binom{2j}{j+m} = \binom{N}{k}$ egyenlőséget az összegben megjelenik az $\binom{N}{k}$ nem normált szimmetrikus állapot, így éppen a binomiális tételt látjuk magunk előtt, ahonnan már adódik $|\tau_n\rangle$ szorzat alakja:

$$|\tau_n\rangle = \sum_{k=0}^N \frac{\tau^k}{(1+|\tau|^2)^{\frac{N}{2}}} \binom{N}{k} = \frac{1}{(1+|\tau|^2)^{\frac{N}{2}}} (|0\rangle + \tau |1\rangle)^{\otimes N}. \quad (2.10)$$

A (2.10) kifejezéssel tehát explicite megadtuk a szorzat alakot, és ezzel nyilvánvalóvá tettük, hogy $|\tau_n\rangle$ nem összefonódott.

Másrészről közelíthetünk a forgató operátorok szemszögéből is. Akár az (1.38) akár az (1.47) alakot vesszük, az exponenciálisban a globálisan ható operátorok az egyes részrendszereken ható operátorok összegei (1.21). Ezek az operátorok pedig egymással páronként fölcserélhetőek, hiszen más-más részrendszeren hatnak, ennek megfelelően az exponensben szereplő összegek

$$\exp(\tilde{X}) = \exp\left(\sum_{n=1}^N X^{(n)}\right) = \prod_{n=1}^N \exp(X^{(n)}). \quad (2.11)$$

módon szétesnek. Az egyes $\exp(X^{(n)})$ tényezők pedig csak az n -edik qubitre ható lokális unitér transzformációk. Ilyen lokálisan végrehajtott transzformációk hatására azonban összefonódottság nem jöhet létre [29], tehát ami eredetileg szorzatállapot volt az meg is marad szeparálható szorzatállapotnak.

A fordított állítás belátása valamivel bonyolultabb. Ebben az esetben azt kell igazoljuk, hogy a szimmetrikus altér minden szorzatállapota egy-egy koherens állapot. Ehhez tekintsünk egy tetszőleges $|\psi\rangle$ szimmetrikus állapotot, ami az alteret kifeszítő bázisvektorokkal kifejtve:

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k}^{\frac{1}{2}} c_k \left| j = \frac{N}{2}, m = -\frac{N}{2} + k \right\rangle \in \mathbb{S}. \quad (2.12)$$

Itt a kifejtési együtthatókból a binomiális együtthatók gyökét kiemeltük, mert ekkor az $\left| \begin{smallmatrix} N \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle$ nem normált bázisvektorok segítségével a bizonyítás szempontjából egyszerűbb érvelést használhatunk. A $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ normáltsági kikötésből következően a

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^N c_k \left| \begin{smallmatrix} N \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle \quad (2.13)$$

kifejtésben a c_k komplex együtthatók teljesítik a

$$\sum_{k=0}^N \binom{N}{k} |c_k|^2 = 1 \quad (2.14)$$

föltételt.

A N darab qubit közül kiválasztva a n -ediket egyszerűen látható, hogy a $\left| \begin{smallmatrix} N \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle$ nem normált állapotnak mindig meg van az a tulajdonsága, hogy

$$\left| \begin{smallmatrix} N \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle = |0\rangle_n \otimes \left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle + |1\rangle_n \otimes \left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ k-1 \end{smallmatrix} \right\rangle, \quad (2.15)$$

alakba írható, ahol $\left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ k-1 \end{smallmatrix} \right\rangle$ illetve $\left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle$ az $N-1$ qubit megfelelő szimmetrikus állapotait jelöli. Ahol definíció szerint $\left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ -1 \end{smallmatrix} \right\rangle = \left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ N \end{smallmatrix} \right\rangle = 0$. A fönti fölbontás az elemi matematikából a binomiális együtthatókra jól ismert $\binom{N}{k} = \binom{N-1}{k} + \binom{N-1}{k-1}$ azonosság qubitekre vonatkozó verziója, amely bármely $n = 1, 2, \dots, N$ esetén érvényes, és az $\left| \begin{smallmatrix} N \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle$ állapotok permutációs szimmetriájának következménye.

A (2.15) fölbontást fölhasználva $|\psi\rangle$ -t fölírhatjuk a (2.1) alaknak megfelelően:

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^N c_k \left| \begin{smallmatrix} N \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle = \sum_{k=0}^N c_k \left(|0\rangle_n \otimes \left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle + |1\rangle_n \otimes \left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ k-1 \end{smallmatrix} \right\rangle \right). \quad (2.16)$$

A 2.1. szakaszban bevezetett formális kritérium értelmében $|\psi\rangle$ szorzatállapot, ha az

$$|u^n\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} c_k \left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle \quad \text{és} \quad |v^n\rangle = \sum_{k=1}^N c_k \left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ k-1 \end{smallmatrix} \right\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} c_{k+1} \left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle \quad (2.17)$$

vektorok párhuzamosak minden lehetséges fölbontás, azaz minden lehetséges n index esetén. $|v^n\rangle$ esetén a második egyenlőségnél az összegzési indexet már 1-gyel eltoltuk. Így már könnyen látszik, hogy az együtthatókra fönnálló

$$c_{k+1} = \tau c_k \quad (\tau \in \mathbb{C}) \quad (2.18)$$

rekurzív összefüggés szükséges a párhuzamossághoz. Azaz a c_k kifejtési együtthatók

$$c_k = \tau^k c_0 \quad (2.19)$$

módon kifejezhetőek a legalacsonyabb indexű c_0 segítségével. Ennek megfelelően $|\psi\rangle$ az alábbi alakot ölti:

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^N (\tau^k c_0) \left| \begin{smallmatrix} N \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle = c_0 \sum_{k=0}^N \tau^k \left| \begin{smallmatrix} N \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle = c_0 (|0\rangle + \tau |1\rangle)^{\otimes N}, \quad (2.20)$$

ahol $c_0 = (1 + |\tau|^2)^{-N/2}$ a normáltság miatt. Ezt összehasonlítva a koherens állapotok (2.10) alakjával látjuk, hogy a szimmetrikus altérben csak a koherens állapotok nem összefonódtak.

2.3. Az \mathbb{S} altérre merőleges vektorok mind összefonódottak

Ebben a szakaszban az \mathbb{S} szimmetrikus altér \mathbb{S}_\perp ortogonális komplementerével foglalkozunk és igazoljuk, hogy *tetszőleges \mathbb{S}_\perp altérbeli vektor összefonódott*.

Állításunkat indirekt módon bizonyítjuk, azaz föltételezzük az ellenkezőjét és ebből a föltételezésből kiindulva addig fűzzük a gondolatmenetet amíg ellentmondásra nem jutunk. Az indirekt bizonyítás logikájának megfelelően tehát tegyük föl, hogy létezik egy olyan $|\varphi\rangle$ (nem nulla) vektor az \mathbb{S}_\perp altérben, amely faktorizálható, azaz:

$$\exists |\varphi\rangle \in \mathbb{S}_\perp : \quad |\varphi\rangle = \bigotimes_{n=1}^N (a_n |0\rangle_n + b_n |1\rangle_n), \quad (2.21)$$

ahol $|a_n|^2 + |b_n|^2 = 1$ minden egyes n -nel indexelt qubit esetén. Ezek után elkezdjük vizsgálni $|\varphi\rangle$ vetületét a szimmetrikus alteret kifeszítő $\left| \begin{smallmatrix} N \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle$ állapotokra. Mivel $|\varphi\rangle$ az ortogonális komplementer tér eleme, bármely szimmetrikus állapotra vett vetületének nullát kell adnia. A szisztematikus vetület-számítás során azonban végül ellentmondásba ütközünk.

Elsőként vetítsük le a $|\varphi\rangle$ állapotot az $\left| \begin{smallmatrix} N \\ 0 \end{smallmatrix} \right\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \cdots \otimes |0\rangle$ szimmetrikus állapotra.

A vetület eltűnéséből adódik, hogy az a_n együtthatók szorzata nulla, azaz $\prod_{n=1}^N a_n = 0$. Ennek alapján legalább egy a_n -nek nullának kell lennie. A jelölést nagyban megkönnyíti, ha föltesszük, hogy az első együttható tűnik el, azaz $a_1 = 0$. Ez nem von le semmit a bizonyítás általánosságából, hiszen bármikor átindexelhetjük az egyes részrendszereket. Így tehát az eddigiek alapján

$$|\varphi\rangle = b_1 |1\rangle_1 \bigotimes_{n=2}^N (a_n |0\rangle_n + b_n |1\rangle_n) \quad (2.22)$$

alakú.

Folytassuk most a szisztematikus vetítési procedúrát az $\left| \begin{smallmatrix} N \\ 1 \end{smallmatrix} \right\rangle$ szimmetrikus állapottal.

Az együtthatókra a $b_1 \prod_{n=2}^N a_n = 0$ föltételt nyerjük, hiszen a vetületnek nullát kell adnia.

Innen $b_1 \neq 0$ alapján a $\prod_{n=2}^N a_n = 0$ megkötés adódik az a_n együtthatók szorzatára. Az általánosság megszorítása nélkül ismét föltehetjük, hogy $a_2 = 0$, így a $|\varphi\rangle$ állapot alakja:

$$|\varphi\rangle = b_1 |1\rangle_1 \otimes b_2 |1\rangle_2 \bigotimes_{n=3}^N (a_n |0\rangle_n + b_n |1\rangle_n). \quad (2.23)$$

Folytatva az előbbi eljárást a soron következő $\left| \begin{smallmatrix} N \\ 2 \end{smallmatrix} \right\rangle$ szimmetrikus állapottal, a $b_1 b_2 \prod_{n=3}^N a_n = 0$

föltételből adódik, hogy $\prod_{n=3}^N a_n = 0$, hiszen $b_1 \neq 0$ és $b_2 \neq 0$. Az általánosság megszorítása nélkül ismét föltehetjük, hogy $a_3 = 0$.

Tovább folytatva a vetületek kiszámítását rendre az $\left| \begin{smallmatrix} N \\ 3 \end{smallmatrix} \right\rangle, \left| \begin{smallmatrix} N \\ 4 \end{smallmatrix} \right\rangle, \dots, \left| \begin{smallmatrix} N \\ N-1 \end{smallmatrix} \right\rangle$ szimmetrikus állapotokra és beazonosítva az ennek következtében eltűnő együtthatókat végül a

$$|\varphi\rangle = \left(\prod_{n=1}^N b_n \right) |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 \otimes |1\rangle_3 \otimes \cdots \otimes |1\rangle_N \quad (2.24)$$

alakhoz jutunk. Ez azonban ellentmondásra vezet. Vetítsük le ugyanis $|\varphi\rangle$ -t az utolsónak maradt $|^N_N\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes \cdots |1\rangle$ állapotra. Ennek a vetületnek az eltűnéséből a $\prod_{n=1}^N b_n = 0$ adódik, de ez a szorzat már csak úgy lehet nulla, ha $|\varphi\rangle$ maga a nulla vektor lenne.

Tehát ellentmondásra jutottunk, azaz nem létezik szorzatállapot a szimmetrikus altér komplementerében, így itt bármely állapot szükségképpen összefonódott.

2.4. Összefoglalás

Ebben a fejezetben az atomi koherens állapotok számos jól ismert tulajdonságához [15] sikerült egy újabb adalékot hozzátennünk. Ezen állapotok kvázi-klasszikusságát mutatja az az itt bizonyított tény is, hogy a szimmetrikus altérben az atomi koherens állapotok és csak azok a nem összefonódott állapotok. Igazoltuk továbbá, hogy a szimmetrikus altérben kívül, azaz a szimmetrikus altér \mathbb{S}_\perp ortogonális komplementerében tetszőleges állapot összefonódott.

Megjegyezzük még, hogy a [15] referenciában tárgyalt analógia a harmonikus oszcillátor koherens állapotai és az N részecskés atomi koherens állapotok között az összefonódottság kérdéskörére nem vihető át. Az oszcillátor-módus esetén ugyanis egyetlen rendszer különböző állapotairól van szó, míg az atomi koherens állapotok egy sokrészecske rendszerhez rendelhetőek hozzá. Másrésztől azonban, több külön-külön koherens állapotban lévő oszcillátor módus összefonódása szintén egy releváns és érdekes kérdés [30].

3. fejezet

d-dimenziós rendszerek összefonódása és koherens állapotai

Ebben a fejezetben olyan N darab részrendszerből álló kvantumrendszert tekintünk, amelynek minden egyes részrendszere egy-egy „qudit”, azaz egy d véges dimenziós Hilbert-tér $SU(d, \mathbb{C})$ szimmetriával. Ezen a rendszeren bemutatjuk az általánosított koherens állapotok koncepcióját. Az itt bevezetett általánosabb koherens állapot fogalom természetesen tartalmazza az előző 2. fejezetben tárgyalt qubitese esetet.

A kétállapotú alrendszereket fölváltó d -dimenziós alrendszerek esetén sokasodnak a léptető operátorok és a háromdimenziós térbeli forgatással való „analógia” már nem működik. De a struktúra lényegi része, a léptető operátorok és az azok kommutátoraként megkapható nulla nyomú diagonális operátorok továbbra is léteznek, csak számuk szaporodik meg. Ennek megfelelően itt nem egyetlen nulla nyomú diagonális operátor sajátértékei címkézik a szimmetrikus alteret kifeszítő bázisállapotokat, hanem egy J_z -vel analóg operátor halmaz sajátértékeinek az összessége.

Be fogjuk bizonyítani, hogy az \mathbb{S} szimmetrikus alterében egy tiszta állapot akkor és csak akkor nem összefonódott ha koherens állapot. Ehhez általánosítjuk a qubitese esetben használt párhuzamossági föltételeken alapuló szorzattá alakíthatósági kritériumunkat. Azt is megmutatjuk, hogy a szimmetrikus alter \mathbb{S}_\perp ortogonális komplementerében az összes állapot összefonódott.

3.1. A quditok Hilbert-tere és a rajta ható operátorok

Az atomi koherens állapotok fogalmát abban az értelemben általánosítjuk, hogy az építőkockaként szolgáló kétállapotú (qubit) rendszerek helyett, d -állapotú rendszereket tekintünk. Tehát egy N azonos részrendszerből fölépülő rendszert tekintünk, ahol az egyes részrendszerek egy d -dimenziós Hilbert-tér elemei. Ezek a qubitek után „qudit”-nek nevezett elemek a qubit fogalom általánosításaként az $SU(d, \mathbb{C})$ Lie-csoport legalacsonyabb dimenziós hű ábrázolását hordozzák.

A qudit rendszert kifeszítő ortogonális és normált bázisvektorokat jelölje rendre $|1\rangle$,

$|2\rangle, |3\rangle, \dots$ és végül $|d\rangle$. Így a Hilbert tér, amin dolgozunk:

$$\mathcal{H}_d := \text{span}_{\mathbb{C}}\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |d\rangle\} = \left\{ \sum_{i=1}^d c_i |i\rangle \mid c_i \in \mathbb{C} \text{ és } \sum_{i=1}^d |c_i|^2 = 1 \right\}. \quad (3.1)$$

Az egyes $SU(d, \mathbb{C})$ szimmetriájú részrendszerekben a szokásos operátor bázist választjuk, amely analóg a qubitek esetén föllépő lefelé és fölfelé léptető operátorokkal illetve a z -irányú spin operátorral. A fölfelé és lefelé léptető operátorokat tetszőleges $i > j$ indexre

$$E_{ji}^\dagger = E_{ij} = |i\rangle\langle j| \quad \text{és} \quad E_{ji} = |j\rangle\langle i| \quad (3.2)$$

definiálja. Összesen $d(d-1)/2$ ilyen operátor létezik. Ezek nulla nyomú operátorok, és a \mathcal{H}_d teret kifeszítő bázisvektorokat éppen úgy választottuk meg, hogy

$$E_{ij} |k\rangle = \delta_{kj} |i\rangle \quad \text{és} \quad E_{ji} |k\rangle = \delta_{ki} |j\rangle \quad (3.3)$$

teljesüljön. A léptető operátor párok kommutátoraira – az (1.18) formulával analóg módon – szintén nulla nyomú operátorok adódnak, amelyek diagonálisak a választott bázisunkban:

$$[E_{ij}, E_{ij}^\dagger] = |i\rangle\langle i| - |j\rangle\langle j| =: H_{ij}. \quad (3.4)$$

d -dimenziós Hilbert-terünkben $d-1$ lineárisan független önadjungált egyidejűleg diagonalizálható operátor működhet (az egységoperátortól eltekintve). Ennek megfelelően a H_{ij} operátorok közül kiválaszthatjuk az egymás utáni indexekkel jelölt $H_{i+1,i}$ típusú operátorokat. A qubitek esetéhez képest ez a $d-1$ darab operátor lép a J_z helyébe, azaz a $H_{i+1,i}$ -k sajátértékei címkézik az egyes $|k\rangle$ bázisállapotokat. Jelölésünkkel konzisztensen ezzel a választással az $|1\rangle$ lesz az ún. legkisebb súlyú állapot, abban az értelemben, hogy a címkéző sajátértékek összege $|1\rangle$ esetén lesz minimális. Ezt $d=3$ -ra a 3.1 ábrán szemléltettük is.

A főnti operátorok természetesen $d=2$ – azaz a qubitek – esetében megfeleltethetőek a korábbi 1. fejezetből jól ismert spin operátoroknak (lásd (1.14) és (1.17)):

$$H_{21} \simeq S_z, \quad E_{12}^\dagger = E_{21} \simeq S_+ = S_x + iS_y, \quad E_{12} \simeq S_- = S_x - iS_y. \quad (3.5)$$

Az E_{ij} , E_{ij}^\dagger , $H_{i+1,i}$ operátorok bázist alkotnak – az úgynevezett Cartan-Weyl bázist [31] – a d -dimenziós, nulla nyomú operátorok terében. Valóban, ezek az operátorok záródnak a kommutátorra nézve, hiszen általában két tetszőleges léptető operátor kommutátora

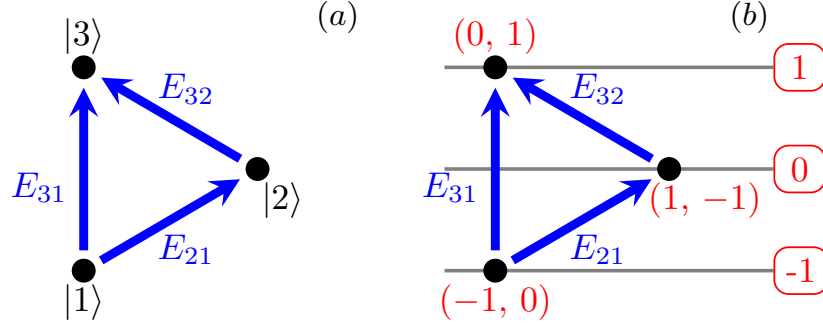
$$[E_{ij}, E_{kl}] = \delta_{jk} E_{il} - \delta_{il} E_{jk}, \quad (3.6)$$

míg tetszőleges $H = \text{diag}(h_1, h_2, h_3, \dots, h_n)$ diagonális és a $\sum_{i=1}^n h_i = 0$ föltétel mellett nulla nyomú operátorra

$$[H, E_{kl}] = (h_k - h_l) E_{kl}. \quad (3.7)$$

Így a kommutátor záródik a kiválasztott egymástól független $H_{i+1,i}$ -kre is.

Az $\{E_{ij}, E_{ij}^\dagger, H_{i+1,i}\}$ operátorok tehát kifeszítik a nulla nyomú operátorok $sl(d, \mathbb{C})$ Lie-algebráját [32]. Közülük azután η komplex együtthatóval tetszőleges $(\eta A - \eta^* A^\dagger)$ típusú anti-hermitikus operátorkombinációkat képezve, ezek exponencializáltja már $SU(d, \mathbb{C})$ -beli operátor lesz.



3.1. ábra. A quditok tere $d = 3$ esetben. A három választott bázisállapotot $|1\rangle$, $|2\rangle$ és $|3\rangle$ jelöli, amelyek az $SU(3, \mathbb{C})$ csoport legkisebb dimenziós hű ábrázolását hordozzák. Az egyes állapotokat a fölfelé léptető operátorok az ábrán jelzett módon kapcsolják össze. A három diagonális H_{ij} operátor közül kettő lineárisan független. A H_{21} és H_{32} operátorokat választva a két sajátérték összegének a segítségével a (b) ábrán bemutatott módon rendezhetjük az $|1\rangle$, $|2\rangle$ és $|3\rangle$ állapotokat. Ezzel a választással az $|1\rangle$ lesz a legkisebb súlyú.

Az általunk vizsgálandó $\bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_d^{(n)}$ tenzorszorzat tér a fentebb bevezetett d -dimenziós \mathcal{H}_d qudit terekből épül föl. Ebben az N qudites térben egy tetszőleges tiszta állapotot az egyes \mathcal{H}_d terek standard $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |d\rangle\}$ bázisának egyszerű tenzorszorzataiként adódó állapotok segítségével fejtjük ki. Ezekre a rövidség kedvéért ismét alkalmazzuk az alábbi jelölést:

$$|i_1 i_2 \dots i_n \dots i_N\rangle = |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle, \quad i_n \in \{1, 2, \dots, d\}. \quad (3.8)$$

Így egy tetszőleges $|\psi\rangle$ tiszta állapotot a standard bázisban

$$|\psi\rangle = \sum_{k_1, k_2, \dots, k_N=1}^d c(k_1 k_2 \dots k_N) |k_1 k_2 \dots k_N\rangle, \quad (3.9)$$

módon fejthetünk ki, előírva még a $\sum_{k_1, k_2, \dots, k_N=1}^d |c(k_1 k_2 \dots k_N)|^2 = 1$ normálási feltételt, ahol $c(k_1 k_2 \dots k_N)$ komplex együtthatókat a zárójelben szereplő d^N lehetséges indexkiosztás azonosítja.

A tenzorszorzat térben az úgynevezett kollektív operátorokat most is az n -dik alrendszerben nemtriviális módon ható operátorok összegeként definiáljuk:

$$\tilde{X} = \sum_{n=1}^N X^{(n)}, \quad \text{ahol} \quad X^{(n)} = \mathbb{1}_1 \otimes \mathbb{1}_2 \otimes \dots \otimes X_n \otimes \dots \otimes \mathbb{1}_N. \quad (3.10)$$

Így megkonstruáljuk az $SU(d, \mathbb{C})$ Lie-csoport definiáló ábrázolásának N -edik tenzorhatványát. Ennek irreducibilis ábrázolások direkt összegére bontásából számunkra ismét a tenzorszorzat tér szimmetrikus altere által hordozott irreducibilis ábrázolás lesz lényeges.

3.2. Formális kritérium N qudit-es rendszer tiszta állapotának szorzattá alakíthatóságára

Az N azonos *qudit*-ből fölépülő Hilbert-térben egy formális eljárást adunk annak eldöntésére, hogy egy állapot teljesen faktorizálható vagy nem. Ez a kritérium a 2.1. szakaszban már qubitek esetében bemutatott kritérium általánosítása d -dimenziós részrendszerekre.

Tekintsünk ismét egy tetszőleges $|\psi\rangle \in \bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_d^{(n)}$ tiszta állapotot, melyet a standard $\bigotimes_{n=1}^N \{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |d\rangle\}$ bázisban fejtünk ki. Ekkor az n -edik quditet kiszemelve ($n = 1, 2, \dots, N$) a $|\psi\rangle$ állapot az alábbi módon fölbontható:

$$|\psi\rangle = |1\rangle_n \otimes |u_n^1\rangle + |2\rangle_n \otimes |u_n^2\rangle + \dots + |d\rangle_n \otimes |u_n^d\rangle = \sum_{k=1}^d |k\rangle_n \otimes |u_n^k\rangle, \quad (3.11)$$

ahol a $|k\rangle_n$ vektorok a d -dimenziós $\mathcal{H}_d^{(n)}$ standard bázisvektorai, míg az $|u_n^k\rangle$ vektorok $\bigotimes_{n=1}^{N-1} \mathcal{H}_d^{(n)}$ -beli, általában nem normált vektorokat jelölnek, minden egyes $k = 1, 2, \dots, d$ -re.

A fönti (3.11) fölbontást használva megmutatható, hogy $|\psi\rangle$ akkor és csak akkor szorzatállapot (azaz $|\psi\rangle$ akkor és csak akkor nem összefonódott), ha az $|u_n^k\rangle$ vektorok minden lehetséges n szerinti fölbontás esetén párhuzamosak, azaz ha $|u_n^1\rangle \parallel |u_n^2\rangle \parallel \dots \parallel |u_n^d\rangle$.

Ahhoz, hogy ezt az állítást igazoljuk először megvizsgáljuk, hogy szorzatállapot esetén a kívánt föltételek teljesülnek. Tegyük föl tehát, hogy $|\psi\rangle$ szorzatállapot, amelyet az

$$|\psi\rangle = \bigotimes_{n=1}^N (a_n^1 |1\rangle_n + a_n^2 |2\rangle_n + \dots + a_n^d |d\rangle_n) = \bigotimes_{n=1}^N \left(\sum_{i=1}^d a_n^i |i\rangle_n \right) \quad (3.12)$$

alábbi alakban írtunk föl valamely a_n^i együtthatókkal, amely együtthatók teljesítik a $\sum_{i=1}^d |a_n^i|^2 = 1$ föltételt minden lehetséges n esetén. Az n -edik qudit kiemelését végrehajtva ezt a szorzatállapotot

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= a_n^1 |1\rangle_n \bigotimes_{j \neq n} \sum_{k=1}^d a_j^k |i\rangle_j + a_n^2 |2\rangle_n \bigotimes_{j \neq n} \sum_{i=1}^d a_j^i |i\rangle_j + a_n^d |d\rangle_n \bigotimes_{j \neq n} \sum_{i=1}^d a_j^i |i\rangle_j = \\ &= \sum_{k=1}^d |k\rangle_n \left\{ a_n^k \bigotimes_{j \neq n} \sum_{i=1}^d a_j^i |i\rangle_j \right\} \end{aligned} \quad (3.13)$$

módon átírhatjuk, ahonnan már könnyen beazonosíthatóak az $|u_n^k\rangle$ vektorok:

$$|u_n^k\rangle = a_n^k \bigotimes_{j \neq n} \sum_{i=1}^d a_j^i |i\rangle_j. \quad (3.14)$$

A fönti (3.14) alakból pedig azonnal látszik, hogy ezek a vektorok csupán az a_j^i tényezőkben különböznek, azaz bármely n -et is tekintjük a (3.11) fölbontásban az $|u_n^k\rangle$ vektorok szükségképpen párhuzamosak.

A fordított esetben tegyük föl, hogy a föltételek teljesülnek, azaz tegyük föl az $|u_n^k\rangle$ vektorok párhuzamosságát a (3.11) dekompozícióban fixált bármely $n = 1, 2, \dots, N$ esetén. Más szavakkal ez azt jelenti, hogy az egyenként d darab vektor csak egy-egy komplex együtthatóban térhet el egymástól, azaz $|u_n^k\rangle = \beta_n^k |u_n^1\rangle$, ahol $k = 2, \dots, K$ és $\beta_n^k \in \mathbb{C}$.

Ezt fölhasználva és tetszőleges n -el indexelt quditet kiemelve $|\psi\rangle$ -t fölírhatjuk az alábbi alakban:

$$|\psi\rangle = (1 + \sum_{k=2}^d |\beta_n^k|^2)^{-1/2} \left(|1\rangle_n + \sum_{k=2}^d \beta_n^k |k\rangle_n \right) \otimes |\tilde{u}_n^1\rangle \quad \forall n, \quad (3.15)$$

Itt már eleve kiemeltük az n -edik quditet normáló $(1 + \sum_{k=2}^d |\beta_n^k|^2)^{-1/2}$ faktort, és ezzel bevezettük az $|\tilde{u}_n^k\rangle = |u_n^k\rangle / \sqrt{\langle u_n^k | u_n^k \rangle}$ normált, $N - 1$ qudites állapotot.

A szorzattá alakíthatóságot a részrendszerek N száma szerinti teljes indukcióval bizonyítjuk. Ehhez először az $N = 2$ esetet kell megvizsgálunk. Ekkor az állítás nyilvánvalóan igaz, hiszen (3.15)-ben mondjuk az első quditet kiszemelve

$$|\psi\rangle = (1 + \sum_{k=2}^d |\beta^k|^2)^{-1/2} \left(|1\rangle_1 + \sum_{k=2}^d \beta_1^k |k\rangle_1 \right) \otimes |\tilde{u}_1^1\rangle, \quad (3.16)$$

ahol a fennmaradó $|\tilde{u}_1^1\rangle$ már egy egy qudites állapot, így éppen a kívánt szorzat alak áll előttünk.

Tegyük föl tehát, hogy az állítás igaz $N - 1$ qudites állapotok esetén, azaz a párhuzamossági föltételekből adódik a szorzattá alakíthatóság, majd innen lépünk tovább az N qudites állapotok esetére. Először az i -dik quditet kiszemelve használjuk a párhuzamosságból (3.15) alapján adódó szorzat alakot, ahol $|\tilde{u}_i^1\rangle \in \bigotimes_{n=1}^{N-1} \mathcal{H}_d^{(n)}$ egy $N - 1$ qudites állapot.

$$|\psi\rangle = \frac{(|1\rangle_i + \sum_{k=2}^d \beta_i^k |k\rangle_i)}{\sqrt{1 + \sum_{k=2}^d |\beta_i^k|^2}} \otimes |\tilde{u}_i^1\rangle \quad (3.17)$$

Az indukciós bizonyítás során a $|\tilde{u}_i^1\rangle$ állapotról kell belátnunk, hogy tudja a párhuzamossági föltételeket. Ehhez bontsuk föl $|\tilde{u}_i^1\rangle$ -t a (3.11) formulának megfelelően a j -edik qudit szerint:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{(|1\rangle_i + \sum_{k=2}^d \beta_i^k |k\rangle_i)}{\sqrt{1 + \sum_{k=2}^d |\beta_i^k|^2}} \otimes \left(\sum_{l=1}^d |l\rangle_j \otimes |u_{ij}^l\rangle \right) = \\ &= \sum_{l=1}^d |l\rangle_j \otimes \left(\frac{(|1\rangle_i + \sum_{k=2}^d \beta_i^k |k\rangle_i)}{\sqrt{1 + \sum_{k=2}^d |\beta_i^k|^2}} \otimes |u_{ij}^l\rangle \right). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Összehasonlítva a fönti alakot az eleve a j -edik qudit szerinti fölbontásból adódó

$$|\psi\rangle = \frac{(|1\rangle_j + \sum_{l=2}^d \beta_j^l |l\rangle_j)}{\sqrt{1 + \sum_{l=2}^d |\beta_j^l|^2}} \otimes |\tilde{u}_j^1\rangle \quad (3.19)$$

alakkal a $|u_{ij}^l\rangle$ -ek párhuzamossága már könnyen adódik, hiszen

$$\frac{|\tilde{u}_j^1\rangle}{\sqrt{1 + \sum_{k=2}^d |\beta_j^k|^2}} = \frac{(|1\rangle_i + \sum_{k=2}^d \beta_i^k |k\rangle_i)}{\sqrt{1 + \sum_{k=2}^d |\beta_i^k|^2}} \otimes |u_{ij}^1\rangle, \quad (3.20)$$

miközben $l = 2, 3, \dots, d$ esetén

$$\beta_j^l \frac{|\tilde{u}_j^1\rangle}{\sqrt{1 + \sum_{k=2}^d |\beta_j^k|^2}} = \frac{(|1\rangle_i + \sum_{k=2}^d \beta_i^k |k\rangle_i)}{\sqrt{1 + \sum_{k=2}^d |\beta_i^k|^2}} \otimes |u_{ij}^l\rangle. \quad (3.21)$$

Innen pedig adódik, hogy $\beta_j^l |u_{ij}^1\rangle = |u_{ij}^l\rangle$. Így az indukciós föltevés miatt $|\tilde{u}_i^1\rangle$ szorzatállapot, ekkor azonban a (3.17) N quditese állapot is szükségképpen szorzat alakba írható.

3.3. A szimmetrikus altér

A szimmetrikus alteret az 1.2. szakaszban a qubitek esetén már vázolt módon konstruáljuk meg. Kiindulásként egy olyan N részecskés állapotot tekintünk, amelyben az egyes alrendszerek száma az $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots, |d\rangle$ állapotokban rendre $n_1, n_2, n_3, \dots, n_d$, ahol $n_k \in \mathbb{N}$ és természetesen $\sum_{k=1}^d n_k = N$. Az ilyen állapotok által kifeszített alteréből, választunk egyet, konkrétan az alábbi *nemszimmetrikus* állapotot.

$$|n_1, \dots, n_d\rangle := \underbrace{|1\rangle \otimes |1\rangle \otimes \dots \otimes |1\rangle}_{n_1} \otimes \underbrace{|2\rangle \otimes \dots \otimes |2\rangle}_{n_2} \otimes |3\rangle \otimes \dots \otimes |d-1\rangle \otimes \underbrace{|d\rangle \otimes \dots \otimes |d\rangle}_{n_d}, \quad (3.22)$$

ahol világosan látszik, hogy mely alrendszerünk mely állapotban van. A szimmetrikus állapotokat ebből az \mathcal{S} szimmetrizáló operátor segítségével nyerjük, azaz alkalmazzuk rá az N alrendszer egymás közötti összes lehetséges permutációját:

$$|n_1, n_2 \dots n_d\rangle_{\mathcal{S}} := \mathcal{S} |n_1, n_2 \dots n_d\rangle = \mathcal{N} \sum_{\sigma \in S_N} P_{\sigma} |n_1, n_2 \dots n_d\rangle, \quad (3.23)$$

ahol a P_{σ} -k jelölik az N darab quditet permutáló operátorokat, \mathcal{N} pedig egy megfelelően megválasztott normálási faktor. Ez az állapot továbbra is rendelkezik azzal a tulajdonsággal, hogy az egyes alrendszerek száma az egyes $|k\rangle$ állapotokban n_k , de már nem tudjuk megmondani, hogy mely alrendszer van az adott bázisállapotban. A szimmetrikus állapotban az összes ilyen lehetőség azonos amplitúdóval fordul elő.

A (3.23) leképezést az összes lehetséges indexelésre elvégezve megkapjuk az eredeti $\bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_d$ tenzorszorzat tér \mathbb{S} *szimmetrikus* alterét:

$$\mathbb{S} := \text{span}\{\mathcal{S} |n_1, n_2 \dots n_d\rangle \mid n_k \in \mathbb{N}, \sum_{k=1}^d n_k = N\} \leq \bigotimes_{n=1}^N \mathcal{H}_d, \quad (3.24)$$

amelyet

$$\dim \mathbb{S} = \binom{N+d-1}{N} \quad (3.25)$$

darab páronként merőleges és szimmetrikus állapotot feszít ki. Mivel a (3.22) szerint az $\sum_{k=1}^d n_k = N$ föltétel mellett kiosztandó n_1, n_2, \dots, n_d számok éppen a d elem N -ed rendű ismétléses kombinációjának alapesetét valósítják meg.

A részrendszerek cseréje helyett az $SU(d, \mathbb{C})$ szimmetriát kihasználva is megkaphatjuk a szimmetrikus alteret kifeszítő bázisállapotokat. A qubitek esetén már láttuk, hogy a léptető operátor nem vezetett ki a szimmetrikus altérből és a legkisebb súlyú állapotból indulva végig lépegethetünk a szimmetrikus alteret kifeszítő bázisállapotokon, ahogyan ezt az 1.2 ábrán is próbáltuk szemléltetni.

Ennek megfelelően használhatjuk itt is a léptető operátorokat, hogy az $|N, 0, \dots, 0\rangle = |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 \otimes \dots \otimes |1\rangle_N \equiv |11\dots 1\rangle$ nyilvánvalóan szimmetrikus állapotból kiindulva megkonstruáljuk a szimmetrikus alteret kifeszítő $|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle_S$ állapotokat. A kiindulásul szolgáló $|11\dots 1\rangle$ az egyetlen olyan állapot, amelyet a lefelé léptető operátorok annihilálnak, azaz

$$\tilde{E}_{ji} |11\dots 1\rangle = 0, \quad \text{ahol } i > j \text{ és } i, j \in \{1, 2, \dots, d\} \text{ tetszőleges.} \quad (3.26)$$

A Lie-algebrák reprezentáció elméletéből kölcsönzött kifejezéssel – ez az úgynevezett *legkisebb súlyú állapot*. Valóban a (3.29) egyenletre előretekintve explicite is látjuk, hogy a diagonális \tilde{H}_{i1} operátorok – amelyek sajátértékeikkel rendezik a szimmetrikus állapotokat – mindannyian a lehető legkisebb $-N$ értéket adják $|N, 0, \dots, 0\rangle \equiv |11\dots 1\rangle$ esetén. De ez direkt számolással is adódik, csupán \tilde{H}_{i1} definícióját fölhasználva.

Egymás után alkalmazva az $\tilde{E}_{ji}^\dagger = \tilde{E}_{ij} = \sum_{n=1}^N E_{ij}^{(n)}$ (lásd a (3.10) definíciót) kollektív léptető operátorok hatványait kapjuk, hogy

$$\mathcal{N} (\mathbb{1})^{n_1} (\tilde{E}_{21})^{n_2} (\tilde{E}_{31})^{n_3} \dots (\tilde{E}_{d1})^{n_d} |11\dots 1\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle_S, \quad (3.27)$$

ahol $\sum_{k=1}^d n_k = N$, és a normálási faktor

$$\mathcal{N} = \frac{1}{n_2! \dots n_d!} \left(\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_d!} \right)^{-1/2}. \quad (3.28)$$

A (3.27) definícióban az egyes faktorok fölcserélhetőek, hisz (3.6) alapján $[\tilde{E}_{i1}, \tilde{E}_{j1}] = 0$ ha $i \neq j$. Így a $\sum_{k=1}^d n_k = N$ föltétel mellett lehetséges operátorok számát úgy kapjuk, hogy a (3.27) definícióban szereplő d darab különböző elemből választunk N darabot. Ez megint az ismétléses kombinációk alapesete, így a lehetséges operátorszorzatok számára a korábban már megkapott (3.25) eredmény adódik.

A (3.27) definícióban mind a legkisebb súlyú $|11\dots 1\rangle$ állapot, mind az alkalmazott léptető operátorok szimmetrikusak, azaz a részecskék permutálása esetén nem változnak, így az eredményként adódó állapot szükségképpen a szimmetrikus altérben fekszik. Két különböző számsorozattal leírt $|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle$ állapot nyilvánvalóan merőleges és ez a merőlegesség öröklődik az $|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle_S$ szimmetrizált verziók esetén is, hiszen ezek az állapotok sajátállapotai a \tilde{H}_{i1} önadjungált operátoroknak:

$$\tilde{H}_{i1} |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle_S = (n_i - n_1) |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle_S, \quad (3.29)$$

ennek megfelelően a különböző n_i -khez tartozó állapotok szükségképpen ortogonálisak.

A fönti (3.29) sajátérték könnyen meghatározható, ha a (3.27) definícióra egy tetszőleges \tilde{H}_{i1} operátort alkalmazunk, majd használjuk az

$$[\tilde{H}_{i1}, \tilde{E}_{i1}] = 2\tilde{E}_{i1} \implies \tilde{H}_{i1}\tilde{E}_{i1} = 2\tilde{E}_{i1} + \tilde{E}_{i1}\tilde{H}_{i1} \quad (3.30)$$

$$[\tilde{H}_{k1}, \tilde{E}_{i1}] = \tilde{E}_{i1} \text{ ha } i \neq k \implies \tilde{H}_{k1}\tilde{E}_{i1} = \tilde{E}_{i1} + \tilde{E}_{i1}\tilde{H}_{k1} \quad (3.31)$$

fölcserélési relációkat, amelyek a (3.6) és (3.7) általános összefüggések speciális esetei. Kihasználva továbbá, hogy $\tilde{H}_{i1} |1\ 1\ \dots\ 1\rangle = -N |1\ 1\ \dots\ 1\rangle$ az $(n_2 + n_3 + \dots + 2n_i + \dots + n_d - N) = n_i - n_1$ sajátértéket kapjuk

A következőkben hasznos lesz az alábbi jelölés az $|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle_S$ szimmetrikus vektorok nem normált verziójára:

$$|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle^N := \left(\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_d!} \right)^{1/2} |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle_S. \quad (3.32)$$

Például $N = 3$ darab $d = 3$ állapotú rendszer esetén egy lehetséges eset:

$$|1, 2, 0\rangle^3 = \sqrt{3} |1, 2, 0\rangle_S = |1\ 2\ 2\rangle + |2\ 1\ 2\rangle + |2\ 2\ 1\rangle. \quad (3.33)$$

Vagy egy másik példa $N = 3$ darab $d = 4$ állapotú rendszer esetén:

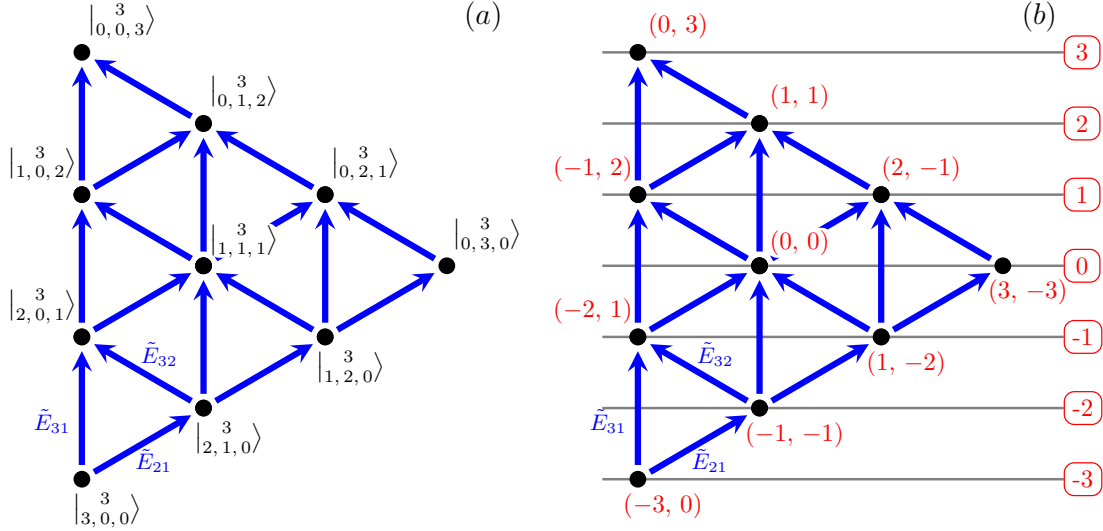
$$|2, 0, 0, 1\rangle^3 = \sqrt{3} |2, 0, 0, 1\rangle_S = |1\ 1\ 4\rangle + |1\ 4\ 1\rangle + |4\ 1\ 1\rangle. \quad (3.34)$$

Megjegyezzük, hogy az $|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle$ állapotokból kiindulva az $|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle^N$ állapotokat direktben is előállíthatjuk. Ehhez a teljes S_N permutációs csoportot faktorizálnunk kell az $|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle$ állapotot fixen hagyó stabilizátor részcsoporthal. Azaz tekintjük az $\mathcal{S}_N/\mathcal{G}$ faktorcsoporthat, ahol

$$\mathcal{G} = \{P_\sigma \in S_N \mid P_\sigma |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle\} \quad (3.35)$$

mindazon permutációk részcsoportha, amelyek az $|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle$ állapotot invariánsan hagyják. (Azaz a \mathcal{G} beli permutációk csak azokat az alrendszereket cserélik föl egymás közt, amelyek az $|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle$ jelölésnek megfelelően azonos $|k\rangle$ állapotban vannak.) Ezek után a faktorcsoporthat elemeit, azaz a mellékosztályok egy-egy reprezentánsát alkalmazva éppen a nem normalizált szimmetrikus állapotokhoz jutunk:

$$\sum_{\tilde{P}_\sigma \in \mathcal{S}_N/\mathcal{G}} \tilde{P}_\sigma |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle =: |n_1, n_2, \dots, n_d\rangle^N. \quad (3.36)$$



3.2. ábra. Az \mathbb{S} szimmetrikus alteret kifeszítő nem normált állapotok $N = 3$ és $d = 3$, azaz 3 darab 3 állapotú alrendszer esetén. Az egyes bázisvektorokat a J_z operátort fölváltó \tilde{H}_{32} és \tilde{H}_{21} operátorok (Cartan rész-algebra független elemei) sajátértékeivel súlyozzuk. A sajátértékeket a (b) ábrán pirossal tüntettük föl. A vízszintes egyenesek pedig a két sajátérték összege szerint rendezik az állapotokat. A különböző súlyú állapotokat a fölfelé és (a lefelé) léptető \tilde{E}_{21} \tilde{E}_{31} és \tilde{E}_{32} operátorok illetve adjungáltjaik kapcsolják össze az ábrán bemutatott módon.

3.4. Általánosított koherens állapotok

Ebben a szakaszban földézzük a koherens állapot általános esetben érvényes definícióját, amely bizonyos kritériumoknak eleget tévő szimmetria csoportok esetén működőképes [23, 25]. Mi az általános eljárást az N quditből fölepülő rendszerre fogjuk alkalmazni, ahol az egyes részrendszerek $SU(d, \mathbb{C})$ szimmetriával rendelkeznek. A konstrukció a harmonikus oszcillátornál ismert, illetve az (1.47) formulával analóg módon folytonosan paraméterezett unitér eltolási operátorok segítségével a koherens állapotba transzformálja az alapállapotot.

Az állapotokat a 3.1. szakaszban vázolt módon rendeztük és a legkisebb súlyú $|1\ 1\ \dots\ 1\rangle$, azaz az összes lefelé léptető operátor által annihilált állapotra alkalmazzuk az összes értelmes fölfelé léptető operátorból konstruált unitér „forgatást”. Világos, hogy a fölfelé léptető operátorok egy jelentős része is kinullázza $|1\ 1\ \dots\ 1\rangle$ -t, konkrétan

$$\tilde{E}_{ij} |1\ 1\ \dots\ 1\rangle = 0, \quad \text{ahol } 1 < j < i \leq d. \quad (3.37)$$

Vegyük tehát azokat a fölfelé léptető operátorokat, amelyek nem nullázzák ki:

$$\tilde{E}_{i1} |1\ 1\ \dots\ 1\rangle \neq 0, \quad \text{ahol } 1 < i \leq d. \quad (3.38)$$

Ezeknek az operátoroknak az adjungáltját, azaz a lefelé léptető párját véve $\eta_n \in \mathbb{C}$ komplex együtthatók segítségével képezzük az

$$\eta_n \tilde{E}_{n1} - \eta_n^* (\tilde{E}_{n1})^\dagger = \eta_n \tilde{E}_{n1} - \eta_n^* \tilde{E}_{1n} \quad (3.39)$$

anti-hermitikus, nulla nyomú, azaz $\mathfrak{su}(d)$ -beli operátorokat. Az összes lehetséges ilyen operátor összegét véve eljutunk az általánosított koherens állapotok definíciójához:

$$|\vec{\eta}\rangle := U(\vec{\eta}) |1\ 1\ \dots\ 1\rangle = \exp\left(\sum_{n=2}^d \eta_n \tilde{E}_{n1} - \eta_n^* \tilde{E}_{n1}^\dagger\right) |1\ 1\ \dots\ 1\rangle, \quad (3.40)$$

ahol $\vec{\eta} = \{\eta_n \in \mathbb{C}\}$ egy $d-1$ dimenziós komplex vektor, amely folytonosan parametrizálja a koherens állapotot. Az exponensben szereplő operátor az \mathbb{S} térben ható anti-hermitikus operátor, azaz adjungálás esetén éppen az ellentettjére változik, ez pedig biztosítja, hogy $U(\vec{\eta})$ az \mathbb{S} -en ható unitér transzformáció legyen.

A Baker-Campbell-Hausdorff formula általánosítását [25] használva a (3.40) formulával definiált $U(\vec{\eta})$ transzformáció az alábbi módon fölbonlik

$$U(\vec{\eta}) = \exp\left(\sum_{i=2}^d \tau_i \tilde{E}_{i1}\right) \exp\left(\sum_{i=2}^d \gamma_i \tilde{H}_{i1}\right) \exp\left(-\sum_{i=2}^d \tau_i \tilde{E}_{1i}\right) \quad (3.41)$$

ahol $\gamma_i \in \mathbb{R}$ míg $\tau_i \in \mathbb{C}$ konstansok. A qubitek esetén az (1.49) és (1.50) formulákkal az η és a τ illetve γ közötti kapcsolatot explicite módon is megadtuk. Ezt a kapcsolatot itt is föltárhathatnánk, de a bizonyítás szempontjából csak a fölbonlás ténye számít. A (3.41) fölbonlás amúgy az $[\tilde{E}_{i,1}, \tilde{E}_{1,j}] = \tilde{E}_{i,j}$, (ahol $i \neq j$) és $[\tilde{E}_{i,1}, \tilde{E}_{1,i}] = \tilde{H}_{i,1}$ kommutációs relációkon múlik, amelyek a (3.7) és (3.6) speciális esetei.

A (3.41) fölbonlásból először ható operátor önmagába viszi a kiindulási $|1\ 1\ \dots\ 1\rangle$ állapotot, hiszen a $\tilde{E}_{1,i}$ operátorok annihilálják $|1\ 1\ \dots\ 1\rangle$ -t. Így az exponenciális operátort sorfejtéssel értelmezve, csak a sorfejtés első tagja az $\mathbb{1}$ ad nem nulla járulékot:

$$\exp\left(\sum_{i=2}^d \tau_i \tilde{E}_{i1}\right) |1\ 1\ \dots\ 1\rangle = \left[\mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\sum_{i=2}^d \tau_i \tilde{E}_{i1}\right)^n\right] |1\ 1\ \dots\ 1\rangle = \mathbb{1} |1\ 1\ \dots\ 1\rangle. \quad (3.42)$$

Ezután a (3.41) fölbonlásban másodjára szereplő operátor sem hoz jelentős változást, hiszen $|1\ 1\ \dots\ 1\rangle$ a \tilde{H}_{i1} operátorok sajátállapota, így azok összegének exponenciálisa szorzó operátorként hat rá. Konkrétan a (3.29) összefüggés alapján $\tilde{H}_{i1} |1\ 1\ \dots\ 1\rangle = -N |1\ 1\ \dots\ 1\rangle$, így

$$\exp\left(\sum_{i=2}^d \gamma_i \tilde{H}_{i1}\right) |1\ 1\ \dots\ 1\rangle = \exp\left(-N \sum_{i=2}^d \gamma_i\right) |1\ 1\ \dots\ 1\rangle = \mathcal{N} |1\ 1\ \dots\ 1\rangle. \quad (3.43)$$

Mivel a γ_i együtthatók valósak, így a (3.41) fölbonlás második tényezőjének hatására egy pozitív valós \mathcal{N} normálási tényező jelenik meg. Tehát a lényeges hatást a (3.41) fölbonlás alapján utolsóként ható operátor fejt ki, azaz

$$|\vec{\eta}\rangle = \mathcal{N} \exp\left(\sum_{i=2}^d \tau_i \tilde{E}_{i1}\right) |1\ 1\ \dots\ 1\rangle. \quad (3.44)$$

3.5. A koherens állapotok és csak azok szorzatállapotok \mathbb{S} -ben

A (3.44) alakot fölhasználva megmutatjuk, hogy az $|\vec{\eta}\rangle$ koherens állapotok qudithek szorzataként írhatóak. Az exponenciálisban szereplő összeg \tilde{E}_{i1} operátorai egymással föl-

cserélhetőek, így az exponenciális operátor faktorizálható:

$$|\vec{\eta}\rangle = \mathcal{N} \exp \left(\sum_{i=2}^d \tau_i \tilde{E}_{i1} \right) |1\ 1\ \dots\ 1\rangle = \mathcal{N} \prod_{i=2}^d \exp \left(\tau_i \tilde{E}_{i1} \right) |1\ 1\ \dots\ 1\rangle. \quad (3.45)$$

Ezután kihasználva, hogy az \tilde{E}_{i1} operátorok az egyes alrendszerekben ható operátorok összegei (3.10), amelyek csak az n -edik részrendszerben hatnak nem triviális módon kapjuk, hogy:

$$|\vec{\eta}\rangle = \mathcal{N} \prod_{i=2}^d \exp \left(\tau_i \tilde{E}_{i1} \right) |1\ 1\ \dots\ 1\rangle = \mathcal{N} \bigotimes_{n=1}^N \exp \left(\sum_{i=2}^d \tau_i E_{i,1}^{(n)} \right) |1\rangle_n. \quad (3.46)$$

Az egyes $E_{i1}^{(n)}$ operátorok csak az $|1\rangle$ bázisállapotokat „mozgatják”, azaz kettő, vagy több ilyen operátor egymás utáni hatása szükségképpen kinullázza az $|1\rangle$ bázisállapotot:

$$\left(E_{j1}^{(n)} \right)^{q_j} \left(E_{i1}^{(n)} \right)^{q_i} |1\rangle_n = 0 \quad \text{ha} \quad q_i + q_j \geq 2 \quad (q_i, q_j \in \mathbb{N}). \quad (3.47)$$

Így az exponenciális operátort sorbafejtve csak az első két tag ad járulékot

$$\exp \left(\sum_{i=2}^d \tau_i E_{i,1}^{(n)} \right) |1\rangle_n = \left[\mathbb{1} + \sum_{i=2}^d \tau_i E_{i,1}^{(n)} + \mathcal{O} \left((E_{i,1}^{(n)})^2 \right) \right] |1\rangle_n = \left[\mathbb{1} + \sum_{i=2}^d \tau_i E_{i,1}^{(n)} \right] |1\rangle_n. \quad (3.48)$$

Ahonnán azonnal adódik, hogy

$$|\vec{\eta}\rangle = \mathcal{N} \bigotimes_{n=1}^N (|1\rangle + \tau_2 |2\rangle + \tau_3 |3\rangle + \dots + \tau_d |d\rangle)_n. \quad (3.49)$$

A (3.49) kifejezéssel tehát – a τ_i paraméterezést használva – explicite megadtuk a szorzat alakot, és ezzel nyilvánvalóvá tettük, hogy $|\vec{\eta}\rangle$ nem összefonódott.

A fordított állítás igazolásához azt kell megmutassuk, hogy a szimmetrikus altér minden szorzatállapota egy-egy koherens állapot. Ehhez tekintsünk egy tetszőleges $|\psi\rangle$ \mathbb{S} -beli állapotot, amit az alteret kifeszítő nem normált (3.32) bázisvektorok segítségével fejtünk ki:

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1 + \dots + n_d = N} C_{n_1, n_2, \dots, n_d} \left| \overset{N}{n_1, n_2, \dots, n_d} \right\rangle. \quad (3.50)$$

A C_{n_1, n_2, \dots, n_d} együtthatók tetszőleges komplex számok, amelyek teljesítik a $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ normáltsági föltételt, azaz

$$\sum_{n_1 + \dots + n_d = N} |C_{n_1, n_2, \dots, n_d}|^2 \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_d!} = 1. \quad (3.51)$$

A $\left| \overset{N}{n_1, n_2, \dots, n_d} \right\rangle$ nem normált állapotoknak megvan az alábbi tulajdonsága

$$\left| \overset{N}{n_1, n_2, \dots, n_d} \right\rangle = \sum_{k=1}^d |k\rangle_n \otimes \left| \overset{N-1}{n_1, n_2, \dots, n_k-1, \dots, n_d} \right\rangle, \quad (3.52)$$

ahol $\left| \begin{smallmatrix} N \\ n_1, n_2, \dots, n_d \end{smallmatrix} \right\rangle = 0$ definíció szerint, ha $n_k > N$ vagy $n_k < 0$ valamely $k \in \{1, 2, \dots, d\}$ indexre. A fenti (3.52) fölbontások az elemi matematikából a polinomiális együtthatókra ismert

$$\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_d!} = \sum_{k=1}^d \frac{(N-1)!}{n_1! n_2! \dots (n_k-1)! \dots n_d!} \quad (3.53)$$

azonosság quditekre vonatkozó verziója, amely bármely $n = 1, 2, \dots, N$ esetén érvényes, és az $\left| \begin{smallmatrix} N \\ n_1, n_2, \dots, n_d \end{smallmatrix} \right\rangle$ állapotok permutációs szimmetriájának következménye.

A (3.52) fölbontást fölhasználva, $|\psi\rangle$ szimmetrikus altérbeli állapotot fölírhatjuk a (3.11) alaknak megfelelően:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^d |k\rangle_n \otimes |u_n^k\rangle, \quad (3.54)$$

ahol

$$|u_n^k\rangle = \sum_{n_1 + \dots + n_d = N} C_{n_1, n_2, \dots, n_d} \left| \begin{smallmatrix} N-1 \\ n_1, n_2, \dots, n_k-1, \dots, n_d \end{smallmatrix} \right\rangle.$$

Tegyük föl most már, hogy $|\psi\rangle$ nem összefonódott, ekkor A 3.2. szakaszban bevezetett formális kritérium értelmében az $|u_n^k\rangle$ vektorok párhuzamosak minden lehetséges fölbontás esetén:

$$\begin{aligned} |u_n^1\rangle \parallel |u_n^2\rangle &\Rightarrow \tau_2 \cdot C_{n_1, n_2, \dots, n_d} = C_{n_1-1, n_2+1, \dots, n_d} \\ &\vdots \\ |u_n^1\rangle \parallel |u_n^d\rangle &\Rightarrow \tau_d \cdot C_{n_1, n_2, \dots, n_d} = C_{n_1-1, n_2, \dots, n_d+1} \end{aligned} \quad (3.55)$$

ahol a τ_i ($i \in \{2, \dots, d\}$) együtthatók tetszőleges komplex számok. Ezek a rekurzív összefüggések azt eredményezik, hogy a C_{n_1, n_2, \dots, n_d} kifejtési együtthatók kifejezhetők a $C_{N, 0, \dots, 0}$ együttható segítségével az alábbi módon:

$$C_{n_1, n_2, \dots, n_d} = \tau_2^{n_2} \cdot \dots \cdot \tau_d^{n_d} \cdot C_{N, 0, \dots, 0}. \quad (3.56)$$

Ezt a kifejezést visszaírva az eredeti (3.50) kifejtésbe azonnal látjuk, hogy a nem összefonódott $|\psi\rangle$ szükségképpen koherens állapot:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{n_1 + \dots + n_d = N} C_{n_1, n_2, \dots, n_d} \left| \begin{smallmatrix} N \\ n_1, n_2, \dots, n_d \end{smallmatrix} \right\rangle = \sum_{n_1 + \dots + n_d = N} \tau_2^{n_2} \cdot \dots \cdot \tau_d^{n_d} \cdot C_{N, 0, \dots, 0} \left| \begin{smallmatrix} N \\ n_1, n_2, \dots, n_d \end{smallmatrix} \right\rangle \\ &= C_{N, 0, \dots, 0} \bigotimes_{n=1}^N (|1\rangle + \tau_2 |2\rangle + \tau_3 |3\rangle + \dots + \tau_d |d\rangle)_n \end{aligned} \quad (3.57)$$

Ezt összehasonlítva a koherens állapotok (2.10) alakjával látjuk, hogy a szimmetrikus altérben csak a koherens állapotok nem összefonódtak.

3.6. A szimmetrikus altérre merőleges vektorok mind összefonódtak

Ebben a szakaszban a szimmetrikus altér \mathbb{S}_\perp ortogonális komplementerében lévő állapotokkal foglalkozunk. Be fogjuk bizonyítani, hogy tetszőleges \mathbb{S}_\perp altérbeli vektor összefonódott. Állításunkat indirekt módon bizonyítjuk, azaz föltételezzük hogy létezik olyan

$|\varphi\rangle \in \mathbb{S}_\perp$ állapot, amelyet szorzat alakba írható:

$$|\varphi\rangle = \bigotimes_{n=1}^N (a_n^1 |1\rangle_n + a_n^2 |2\rangle_n + \dots + a_n^d |d\rangle_n) = \bigotimes_{n=1}^N \sum_{k=1}^d a_n^k |k\rangle_n, \quad (3.58)$$

ahol $\sum_{k=1}^d |a_n^k|^2 = 1$ minden egyes $n = 1, 2, \dots, N$ qudit index esetén.

Ezek után szisztematikusan elkezdjük vizsgálni $|\varphi\rangle$ vetületét a szimmetrikus alteret kifesztítő állapotokra. Mivel $|\varphi\rangle \in \mathbb{S}_\perp$, bármely szimmetrikus állapottal vett belső szorzatának nullát kell adnia.

Elsőként vetítsük le $|\varphi\rangle$ -t az $|1_{N,0,\dots,0}\rangle = |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 \otimes \dots \otimes |1\rangle_N$ legkisebb súlyú szimmetrikus állapotra. A vetület eltűnéséből adódik, hogy $\prod_{n=1}^N a_n^1 = 0$, azaz az a_n^1 együtthatók közül legalább egynek nullának kell lennie. A jelölést nagyban megkönnyíti, ha föltesszük, hogy $a_1^1 = 0$ az eltűnő együttható.

Ekkor

$$|\varphi\rangle = (a_1^2 |2\rangle + a_1^3 |3\rangle + \dots + a_1^d |K\rangle)_1 \bigotimes_{n=2}^N \left(\sum_{k=1}^d a_n^k |k\rangle_n \right).$$

Vetítsünk ezután azokra a szimmetrikus állapotokra, amelyek $n_1 = N - 1$ darab $|1\rangle$ -esből és 1 darab más fajta quditből épülnek föl:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} |1_{N-1,1,\dots,0}\rangle; \quad \frac{1}{\sqrt{N}} |1_{N-1,0,1,\dots,0}\rangle; \quad \dots \quad \frac{1}{\sqrt{N}} |1_{N-1,0,\dots,1}\rangle. \quad (3.59)$$

Mivel a vetületeknek nullát kell adniuk, $N - 1$ darab megkötést kapunk az együtthatókra:

$$a_1^k \prod_{n=2}^N a_n^1 = 0, \quad \text{bármely } k = 2, \dots, d \text{ esetén.} \quad (3.60)$$

Az összes a_1^k nem lehet nulla, hiszen akkor $|\varphi\rangle$ a nulla vektor lenne. Így az összes föltételben szereplő szorzat tűnik el, azaz $\prod_{n=2}^N a_n^1 = 0$. Tehát az a_n^1 együtthatók közül ($n \neq 1$) legalább egy biztosan nulla, és az általánosság megszorítása nélkül föltehetjük, hogy $a_2^1 = 0$.

Következő lépésként azokra a szimmetrikus állapotokra vetítünk, amelyek $n_1 = N - 2$ darab $|1\rangle$ -esből és 2 darab más fajta quditből épülnek föl. A vetületek nulla értékéből végül arra következtetünk, hogy $\prod_{n=3}^N a_n^1 = 0$. Ezek szerint egy újabb a_n^1 együttható lesz nulla, mondjuk $a_3^1 = 0$. Szisztematikusan folytatva a fönti eljárást $n_1 = N - 3, \dots, 1, 0$ esetére végül arra jutunk, hogy $a_1^1 = a_2^1 = \dots = a_N^1 = 0$. Vagyis a $|1\rangle$ állapot együtthatói a (3.58) szorzatban minden egyes alrendszerben nullák.

Ezután a fönt elkezdett eljárást folytatva következő lépésként a $|2\rangle$ -es állapot együtthatóiról látjuk be, hogy mindannyian szükségképpen eltűnnek. Kezdve a vetítéseket az $n_2 = N$ -nel jellemzett szimmetrikus állapottal, azaz $|2_{N,0,\dots,0}\rangle = |2\rangle_1 \otimes |2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |2\rangle_N$ -vel, majd folytatva az $n_2 = N - 1, \dots, 1, 0$ esetekkel végül arra jutunk, hogy $a_1^2 = a_2^2 = \dots = a_N^2 = 0$. Ezután az $n_3 = \dots = n_d = N$ eseteket is szisztematikusan végigjátszva az összes a_n^k -ra nullát kapunk, ez azonban azt jelenti, hogy $|\varphi\rangle$ csak a nullvektor lehet.

Ezzel ellentmondásra jutottunk: a $|\varphi\rangle$ szorzatállapot nem lehet merőleges az \mathbb{S} szimmetrikus alterre. Átfogalmazva mindezt a \mathbb{S}_\perp ortogonális komplementerben minden elem szükségképpen összefonódott.

3.7. Összefoglalás

Ebben a fejezetben bemutattuk az általánosított koherens állapotok koncepcióját, ahol az N részrendszert d -dimenziós $SU(d, \mathbb{C})$ szimmetriát hordozó quditok alkotják. Az állapotok kvázi-klasszikusságának újabb jeleként megmutattuk, hogy a szimmetrikus altérben értelmezett koherens állapotok pontosan a szorzatállapotok osztályával esnek egybe, így azok nem összefonódtak. A bizonyításhoz általánosítottuk a qubites esetben használt párhuzamossági föltételeken alapuló szorzattá alakíthatósági kritériumunkat. Továbbá azt is igazoltuk, hogy a szimmetrikus altéren kívül, azaz a szimmetrikus altér \mathbb{S}_\perp ortogonális komplementerében tetszőleges állapot összefonódott.

II. rész

Apertúrán áthaladó forgó kétatomos molekula feladata

4. fejezet

Bevezetés és elméleti áttekintés

Egy merev elnyúlt alakú tárgy klasszikusan csak úgy férhet át egy méreténél kisebb apertúrán, ha megfelelő orientációval közelít felé. Ezt a geometriai szempontot jól illusztrálja a Münster (katedrális) építéséhez kapcsolódó néphagyomány a németországi Ulm városában. Ahogyan a helyi monda tartja, ezen hatalmas épület építési munkálataihoz a mesterek hosszú gerendákat szállítottak a városba. A kocsikon keresztben (menetirányra merőlegesen) fekvő faanyagot azonban sehogyan sem sikerült áthozniuk a városkapun. A lehetséges megoldásokon tanakodva a mesterek már a kapu kiszélesítését tervezték. Ekkor azonban egyikőjük észrevette a fészket építő verebet, amint éppen hosszú szalmaszálat vitt szűk helyen fekvő fészkéhez. A mesterek először jót nevettek, hogy a kicsiny madár ugyanazon „lehetetlen” feladattal szembesül mint ők. A veréb azonban a szűk réshez érve csak elfordította a fejét és a hosszába állított szalmaszállal könnyedén átrepült a szűk nyíláson. Így lett a veréb (Ulmer Spatz) Ulm városának egyik jelképe.

Belső struktúrával rendelkező részecskék (pl. kétatomos molekula) esetén a struktúra akkor is lényegesen befolyásolja a kicsiny apertúrán való áthaladást, ha azt a kvantummechanika alapján kívánjuk tárgyalni. A strukturált (nem pontszerű) részecskék klasszikus és kvantumos leírásából levonható következtetések között azonban érdekes különbségek mutatkoznak. Ezek a kvantummechanikai leírásnak abból a sajátosságából fakadnak, amelyek már pontszerű részecskék esetén is jelentkeznek: a mozgás leírása a valószínűségi amplitúdó terjedésére vonatkozó szórási probléma megoldását jelenti. Egy belső szabadsági fokokkal is rendelkező objektum esetén ezen túlmenően a szórási probléma során a translációs és a belső szabadsági fokok kvantumos összefonódása elkerülhetetlen, és ez a feladat megoldását igencsak megnehezíti. Az értekezésnek ebben a második részében az összefonódottságnak egy ilyen aspektusát vizsgáljuk abban a viszonylag egyszerű esetben, amikor az apertúrán áthaladó objektum egy a tömegközéppontja körül forogni képes szimmetrikus, lineáris molekula, egy rotor. A jelzett összefonódás ennek megfelelően itt a translációs és rotációs szabadsági fokok között keletkezik.

A probléma amiatt is érdekes, mert egy ilyen részecske már a klasszikus esetben is nem-triviális kényszerek mentén mozog. A kvantummechanikai leírásban ezek a kényszerek a hullámfüggvényre kirótt peremföltételként jelentkeznek, és a kvantumos terjedés hullámtulajdonságaiban pl. a transzmisszióban rezonanciákat eredményeznek, amely a rotor késleltetett áthaladását jelenti, azaz egy olyan csapdázódási jelenséget, amit klasszikusan nem tapasztalunk.

Munkánknak ebben a részében lassú („ultrahideg”) strukturált részecske kvantumos szóródását vizsgáljuk vékony ernyőn lévő apertúrán egy olyan esetben, amikor az apertúra nagysága összemérhető a részecske kiterjedésével. Megmutatjuk, hogy ha a tömegközépponti mozgás energiája alacsonyabb vagy összemérhető az első forgási gerjesztett állapot energiájával, akkor a transzmissziós valószínűség a klasszikushoz képest drámaian visszaszorul [33, 34]. Ezenkívül a részecske rövid időre csapdázódhat is az apertúrában, ahogyan azt a transzmisszióban föllépő rezonanciák mutatják.

A jelen 4. fejezetben ismertetjük a feladathoz kapcsolódó kísérleti és elméleti előzményeket, bemutatjuk a problémát és annak modelljét. Eredményeinket ezután két külön fejezetben tárgyaljuk. A következő 5. fejezet alkalmas közelítések segítségével analitikus számításokkal mutatja be a rotor szóródására vonatkozó eredményeket. Az ezt követő 6. fejezet pedig a bonyolult peremföltételek okozta nehézség kezelésére alkalmas numerikus módszert mutat be, amely egyrészt reprodukálja és megerősíti az analitikus közelítés eredményeit, másrészt rámutat az analitikus módszer alkalmazhatóságának korlátaira, és azokban az esetekben is eredményre vezet, amikor az analitikus közelítés már nem működik.

4.1. Kísérleti és elméleti előzmények

A kvantummechanika fontos mérföldköve volt annak fölismerése, hogy nemcsak az elektromágneses hullámok, hanem a nem nulla nyugalmi tömegű részecskék is hullámtulajdonságokkal rendelkeznek, s ezt először elektronok interferenciájával sikerült demonstrálni az 1920-as években. A Born-féle valószínűségi értelmezés az *egyes* részecskék valószínűségi amplitúdójának interferenciáját kimutató Jönsson–Tonomura-féle kísérletek nyomán vált nehezen kétségbevonható tényné. Az elektronoknál jóval nagyobb neutronokon túl az atomok, illetve molekulák esetén is megfigyelhető hullám-részecske kettősség megnyilvánulását az utóbbi években mind elméleti, mind kísérleti szempontból számos jelenség kapcsán vizsgálták. Mint ismert a részecskék hullám-szerű viselkedése akkor mutatkozik meg, ha de Broglie hullámhosszuk összemérhető, vagy nagyobb, mint az adott akadályt jellemző karakterisztikus hossz. Ezt a határt elérve sikerült atomok és nagyobb molekulák részen vagy rácson való diffrakcióját is demonstrálni [35, 36, 37].

A korábbi elméleti munkákban jellemzően csak a részecskék tömegközépponti mozgását vették figyelembe és a struktúrát, azaz a részecske alakját, néhány kivételtől eltekintve elhanyagolhatónak tekintették. Ezen kivételek közé tartozik a [38] munka, amely egy összetett részecske, egy deuteron magreakcióit írta le egy kétatomos molekula disszociációjával analóg módon, s amelynél a mag a céltárggyal való kölcsönhatás következtében alakváltozáson eshet át. Kiemelnénk még Bužek és munkatársai cikkét, akik forgási és rezgési szabadsági fokkal is rendelkező, síkban szabadon mozgó molekula, Gauss alakú potenciál páron vett szórását vizsgálták [39]. Ez a konstrukció mintegy modellezi a Young-féle kétréses kísérletet. A számítások során azt találták, hogy a belső struktúra jelenléte, pontosabban annak a haladó mozgáshoz való csatolódása lerontja a kialakuló interferencia képet.

Az alacsony hőmérsékletek fizikájának folyamatos fejlődése további új lehetőséget nyitott a belső struktúrával rendelkező nagyobb atomi részecskék szórásának vizsgálatában. Az alábbi három, mérföldkőnek számító, kísérletet külön is kiemelnénk: (i) atomos Bose-

Einstein kondenzátumból [40], illetve fermionikus kondenzátumból [41] létrehozott ultrahideg (nK hőmérsékletű) molekulák degenerált kvantumgázának szeparálása az atomos gáztól, (ii) hélium dimerek és nagyobb klaszterek atomokon és rácson való szórásakor [42] megfigyelhető árnyékolási effektus [37] és (iii) az úgynevezett Jefimov (Efimov) állapotok (három azonos bozon kötött állapotainak) létrehozása [43] alacsony hőmérsékletű cézium [44] és kálium [45, 46] atomok ütköztetésével.

A kísérleti technológiák fejlődése lehetővé tette, hogy részecskék apertúrán vagy apertúra sorozaton való áthaladását laboratóriumban is vizsgálják abban az esetben, amikor azok karakterisztikus mérete összemérhető az apertúrával. Megfigyelték többek között atomok és molekulák résen és rácson való elhajlását és interferenciáját. Ilyen kísérletek történtek például Rydberg atomokkal [47] vagy hélium klaszterekkel [42]. Vizsgálták továbbá biomolekulák és fullerén [48] mechanikai rácsokon való szórását is.

Ezen kísérleti eredmények fényében kézenfekvőnek tekinthető tehát a kérdés, hogy mi a helyzet egy olyan esetben, ahol a részecske alakja is szerepet játszhat. Mi egy különösen egyszerű strukturált részecske modellt vizsgálunk, amely azonban figyelemre érdemes effektusokat mutat. Ez egy mereven forgó lineáris molekula modellje, amely egy vele összemérhető nagyságú apertúrán halad át. Vizsgálatainkban két egymással összefüggő kérdésre az ilyen részecskék transzmissziójára és csapdázódására fogunk koncentrálni.

4.1.1. Transzmisszió

Ha egy ilyen folyamatot, amelynek során a részecske áthalad egy apertúrán leegyszerűsítve klasszikusan szeretnénk értelmezni, akkor is figyelembe kell vennünk a részecske alakját és térbeli helyzetét az apertúrához képest. Hiszen nyújtott alakú merev test klasszikusan csak úgy férhet közvetlenül át egy méreténél kisebb résen, ha megfelelő irányban áll.

Kicsiny objektumok mozgása esetén, ahol már a kvantummechanika szabályai érvényesek, egy hasonló találkozás kimenete jelentősen eltérhet a klasszikus trajektóriák alapján jóslattól. A kvantumelméletben egy forogni képes objektum megfelelő helyezkedéssel való átcsusszanása az apertúrán összefonódást hoz létre az orientációt és a haladó mozgást leíró szabadsági fokok között. Mindaddig a kapcsolódó kísérleti vizsgálatok [43, 49] csak apró változásokat észleltek a transzmissziós valószínűségben, amelyeket ilyen kvantumos effektusoknak tulajdonítottak. Amint azt dolgozatunkban megmutatjuk a szabadsági fokok ezen összefonódása rezonanciákat okoz és akár a részecskék teljes visszaverődése is lehetséges [A4, A5].

4.1.2. Csapdázódás

Egy részecske csapdázódását klasszikusan általában valamilyen vonzó erőnek tulajdonítjuk. A kvantummechanika azonban módosítja ezt az elképzelést, a klasszikusan kontinuum számosságú lehetséges energiákat megszámlálhatóan végtelenné téve, míg taszító potenciálok esetében az állapotok a kvantummechanikában is kontinuum számosságúak. Érdekes azonban, amint azt Neumann János és Wigner Jenő 1929-ben megmutatta [50], hogy ez még taszító potenciál esetében sincs mindig így. Egy olyan teljesen taszító gömbszimmetrikus potenciálgát is rendelkezik kötött állapottal, amely növekvő távolság-

gal gyorsan tart a mínusz végtelenbe annak ellenére, hogy nincs egy második potenciálgát, amely klasszikusan biztosítaná a lokalizációt.

Hasonló, a részecske hullámtermészetéből eredeztethető, kötött állapotok jelennek meg olyan lépcsős potenciál esetén, amely a távolság növelésével lépcsőzetesen tart a mínusz végtelenbe. Amikor a lépcsőfokok magasságának és szélességének az aránya egy megfelelő érték, akkor a lépcsőfokok széleiről visszaverődő kimenő hullámok destruktív interferenciája jön létre, ami egy „kötő” effektust eredményez [51, 52, 53].

Mindkét említett példa háromdimenziós gömbszimmetrikus potenciálokra vonatkozott [54]. Azonban akár már két dimenzióban is előállhat olyan eset, hogy a klasszikusan kötött állapottal nem rendelkező rendszernek kvantumosan már van ilyen állapota. Például egy atom vagy egy elektron mozgását olyan csatornára korlátozva, amely elágazást vagy merőleges keresztezést tartalmaz, a részecskéknek lesz az elágazás környékén lokalizált kötött állapota. Ilyen állapotok megjelennek három [55], vagy négy [56] kiágazást tartalmazó keresztezéseknél is; és mindezt sikerült kísérletileg is megvalósítani [57, 58].

Szintén kötött állapotok jelenhetnek meg egy meghajlított hullámvezetőben [59, 60, 61, 62] (kísérleti igazolás a [63]-ban) vagy egy olyan csatornában, amelynek fodrozódó/hullámos a fala [64]. Ilyen szokatlan kötött állapotokkal kapcsolatos néhány további megfontolás található [65]-ben, míg az utóbbi idők kísérleteivel kapcsolatban lásd [66]-ot.

Ezekben a példákban a „kötés” az egynél több dimenzióban bekövetkező interferencia következménye, amit úgy is értelmezhetünk mint a különböző irányokban terjedő hullámoknak a peremföltétel miatti összecsatolódása. Ebben az értelemben a klasszikus mechanikai kényszereket leíró d’Alembert elv kvantumos általánosításáról van szó [67, 68, 69]. Amikor a perem hirtelen változik, mint például egy éles saroknál, akkor a szórás során másodlagos hullámok keletkeznek, amelyeket nem lehet elhanyagolni [70, 71]. Amikor a változás sima és lassú, azaz adiabatikus, egy effektív potenciál segítségével alacsonyabb dimenzióssá tehetjük a problémát [59, 60, 61]. A rotor apertúrán való szórásának tanulmányozása során az utóbbi megközelítést alkalmazzuk. A translációs és a forgási szabadsági fokot az apertúra bonyolult módon összefonja, amit a tömegközéppont mozgására ható effektív potenciállal tudunk részben figyelembe venni.

Az effektus, amelyet az alábbiakban tárgyalunk hasonló a kétdimenziós hullámvezetőkben terjedő hullámok esetén tapasztaltakhoz, amikor a vezető mentén a falak távolsága adiabatikusan változik. Ebben az esetben a longitudinális és a transzverzális mozgás összecsatolódik. Ahol pedig a hullámvezető kiszélesedik majd ismét visszanyeri eredeti szélességét, a longitudinális mozgást jellemző effektív vonzó potenciál kötött állapotok létrejöttét is megengedi [34]. Hasonlóan, ahol a hullámvezető előbb összeszűkül majd újra kiszélesedik egy taszító potenciálhegy keletkezik, amelyen a részecskének át kell alagutaznia.

Egy mozgó vonatkoztatási rendszerben a hullámvezető változó szélessége úgy is értelmezhető mint a korlátozó falak távolságának időbeli változása. Így tehát egy olyan dobozba zárt részecske problémájához jutunk, ahol a korlátozó falak távolsága időben változik [72, 73]. Egy ilyen jellegű időfüggés olyan fázistolást hoz létre, amelyet neutronszerelési kísérletekben is megfigyeltek [74].

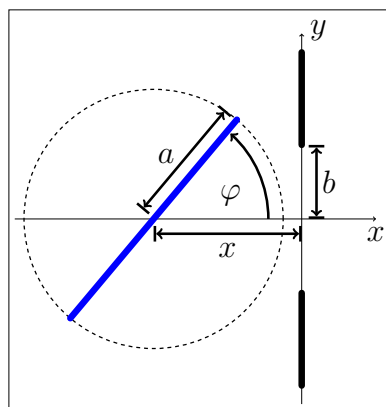
4.2. Klasszikus elnyújtott részecskék

Munkánkban egy leegyszerűsített kétdimenziós forgó molekula modellt vizsgálunk. A merev de irányítható belső struktúrával rendelkező részecske egy vékony ernyőn lévő résen szóródik. Tehát egy M tömegű merev rotort tekintünk, amelynek tömege szimmetrikusan oszlik el hosszúsága $(2a)$ mentén, azaz a tehetetlenségi nyomatéka

$$\mathcal{M} := M \times (\kappa a)^2. \quad (4.1)$$

Itt bevezettük a dimenziótlan κ tömegeloszlás paramétert, amely egyenlő 1-gyel egy súlyzó modellel leírható kétatomos molekula esetén, illetve $1/\sqrt{3}$ -nak adódik egy homogén rúdra.

Az egyszerűség miatt arra az esetre szorítkozunk, amikor a tömegközéppont csak az apertúra szimmetriatengelye mentén mozoghat, ez az x tengely. Az $x = 0$ -ban található rés $2b$ széles és merőleges az x tengelyre, ahogy azt a 4.1. ábra illusztrálja.



4.1. ábra. A szimmetrikus rotor geometriai elhelyezkedése a vékony ernyőn lévő réshez képest. A $2a$ hosszúságú rotor tömegközéppontja csak az x tengely mentén mozoghat a $2b$ szélességű rés felé, amely az $x = 0$ síkban helyezkedik el. A rotor csak az ernyőre merőleges síkban – az ábra síkjában – mozoghat. A rotor forgását jellemző φ szöget az x tengelytől mérjük. Ezen az ábrán $b/a = 0.5$.

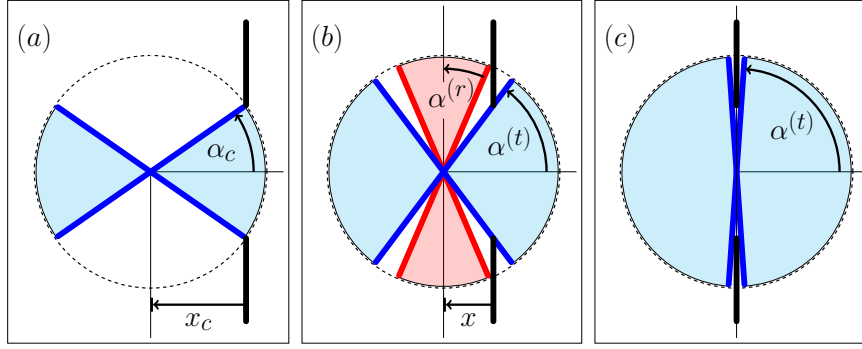
4.2.1. A klasszikus Hamilton-függvény

A rendszernek két szabadsági foka van: A tömegközéppont haladó mozgása, amit az x helykoordináta és a hozzá tartozó p_x impulzus ír le, illetve a forgási szabadsági fok, amit a φ szög és a kapcsolódó p_φ impulzusnyomaték jellemez. A rendszer Hamilton-függvénye

$$H = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{p_\varphi^2}{2\mathcal{M}}, \quad (4.2)$$

független az x hely és φ szög változóktól.

A mechanikai probléma egy konkrét megoldásához a kezdeti feltételek megadására is szükség van. Azaz a $t \rightarrow -\infty$ időpontban, amikor a rotor még távol van az apertúrától, meg kell adnunk a tömegközéppont x helyét és p_x impulzusát, továbbá definiálnunk kell a forgás φ_0 kezdeti szögét és a kezdeti impulzusnyomatékát.



4.2. ábra. Geometriai kapcsolat a tömegközéppont x helye és a megengedett forgási szögek között, három jellemző esetben. Itt az apertúra méret per rotorhossz arányt, azaz a c paramétert $c = 0.5$ -nek választottuk. (a) A rotor geometriája amikor éppen eléri a rés szélét. Ez a helyzet definiálja azt a kritikus távolságot, az $x_c := \sqrt{a^2 - b^2}$ -t, ahonnan érződik a rés hatása. Innentől kezdve a rotor forgása akadályozott. (b) Az apertúrához még közelebb eső részen, $|x| < x_c$ két megengedett szögtartomány van. A résen áthaladó rotorok szöge a 0 körüli $2\alpha^{(t)}(x)$ széles intervallumra korlátozódik, ezt kék satírozás jelöli. Az ernyőről visszaverődő rotorok szöge pedig a $\pi/2$ körül szimmetrikusan elhelyezkedő $2\alpha^{(r)}(x)$ széles tartományba eshet, amit piros satírozás jelöl. Az ábrán az $x = 0.43 a$ esetet ábrázoltuk. (c) A rotor geometriája $x = 0$ -ban, azaz a rés közepén. Itt a visszavert rotorok számára elérhető szögtartomány – $\alpha^{(r)}(0) = 0$ -val összhangban – eltűnik. Mivel rés fala végtelenül vékony a rotor tetszőleges szögben állhat, ahogy ez $\alpha^{(t)}(0) = \pi/2$ -ből is látszik, de teljesen körbefordulni nem tud.

4.2.2. Klasszikus kényszerek

A klasszikus leírásban az ernyő és a rajta lévő rés a mozgást akadályozó kényszerként jelentkezik, melynek hatására a rotor számára elérhető forgási szögtartomány beszűkül. A rotor szabadon mozoghat amíg tömegközéppontjának ernyőtől vett távolsága nagyobb, mint az

$$x_c := \sqrt{a^2 - b^2} = a\sqrt{1 - c^2}, \quad a > b, \quad (4.3)$$

kritikus távolság. Ahogyan a tömegközéppont közelebb kerül az apertúrához, a rotor már nem tud szabadon körbefordulni, ezt a 4.2. ábra is mutatja, néhány kiválasztott esetben. Megjegyezzük, hogy x_c csak az $a > b$ esetben definiált; ha $b > a$ akkor a részecske szabadon áthalad a résen.

A (4.3) formulában bevezettük az apertúra méret per rotorhossz arányt:

$$c := \frac{b}{a}, \quad (4.4)$$

amely paraméter fontos szerepet fog játszani a későbbiekben.

Egy klasszikus rotor csak akkor juthat át a résen (transzmisszió), ha az x tengellyel vett hajlásszöge az $x = -x_c$ kritikus távolságban a $[-\alpha_c, \alpha_c]$ intervallumba esik, ahol a kritikus szög

$$\alpha_c := \arctan \frac{b}{x_c} = \arctan \frac{b}{\sqrt{a^2 - b^2}} = \arctan \frac{c}{\sqrt{1 - c^2}}. \quad (4.5)$$

Minden más hajlásszög esetén a klasszikus rotor visszaverődik.

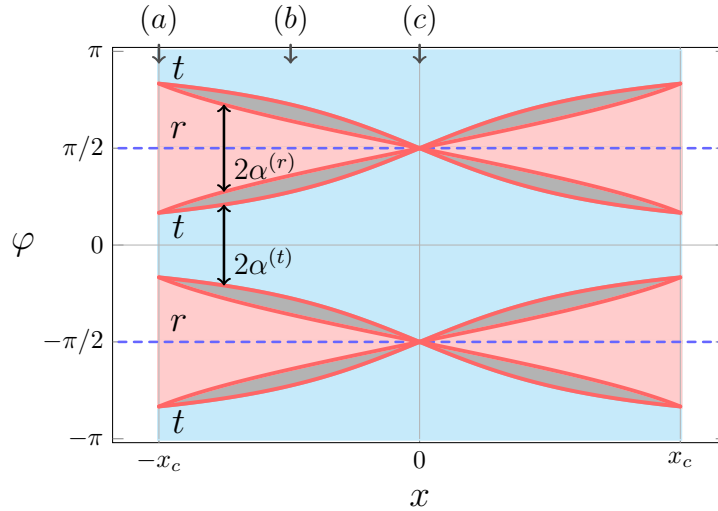
Miközben a rotor az $|x| \leq x_c$ tartományban van, azaz halad át az apertúrán, a számára elérhető szögtartomány beszűkül. Erre a tartományra a későbbiekben *Kölcsönhatási régió* néven fogunk hivatkozni. Egyszerű geometriai okoskodással látható, hogy a transzmisszió során elérhető forgási szög

$$|\varphi| \leq \alpha^{(t)}(x), \quad \text{ahol} \quad \alpha^{(t)}(x) := \arctan \frac{b}{|x|}. \quad (4.6)$$

Szintén egyszerűen adódik a visszaverődő részecskék számára egy adott x helyen megengedett szögtartomány

$$\left| \varphi - \frac{\pi}{2} \right| \leq \alpha^{(r)}(x), \quad \text{ahol} \quad \alpha^{(r)}(x) := \arcsin \frac{|x|}{a}. \quad (4.7)$$

$\alpha^{(t)}(x)$ és $\pi/2 - \alpha^{(r)}(x)$ között nincs megengedett szög, ahogyan azt a 4.3. ábra is mutatja.



4.3. ábra. Geometriaileg megengedett (piros és kék), illetve tiltott (sötét szürke) forgási szögtartományok az $|x| < x_c$ kölcsönhatási régióban, $c = 0.5$ és $\kappa = 1$ paraméter értékek esetén. A piros rész a visszaverődő (r), míg a kék rész az áthaladó (t) részecskékre vonatozik. Klasszikusan az $x < -x_c$ oldalról érkező rotor áthalad, vagy visszaverődik attól függően, hogy az x tengellyel vett hajlásszöge az $x = -x_c$ kritikus távolságban a kék (t), vagy a piros (r) tartományba esik. Egy adott x helyen a megengedett szögtartományok szélessége az áthaladó és visszavert részecskékre rendre $2\alpha^{(t)}(x)$ (4.6) alapján és $2\alpha^{(r)}(x)$ (4.7) alapján. A 4.2. ábra (a), (b) és (c) speciális helyzeteihez tartozó helykoordinátákat a keret tetején jelöltük.

4.2.3. Klasszikus átmeneti valószínűség

Ahhoz hogy össze tudjuk hasonlítani a klasszikus és kvantummechanikai szórás közti különbségeket E kezdeti energiájú és eltűnő impulzusnyomatékú ($p_\varphi = 0$), azaz nem forgó

rotorok sokaságát képzeljük el. Mivel a forgást semmi sem korlátozza ha a rotor messze van az ernyőtől, a $p_\varphi = 0$ kezdeti föltételből következik, hogy az E kezdeti energia csak a translációs mozgás kinetikus energiáját tartalmazza. Tehát olyan rotor sokaságot képzelünk el, amelyben a részecskék tömegközéppontja az E kezdeti energia által megadott sebességgel mozog az x tengely mentén, miközben tetszőleges szögben hajlik az x tengelyhez képest. A lehetséges hajlásszögek pedig egyenletesen oszlanak el a megengedett $[-\pi/2, \pi/2]$ intervallumban.

A klasszikus megfontolásokat azzal zárjuk, hogy a fönt vázolt esetben meghatározzuk a transzmisszió valószínűségét. Az egyenletes szögeloszlással az ernyőhöz érkező nem forgó részecskesokaságból pontosan azok jutnak át az apertúrán, amelyek φ hajlásszöge a $[-\alpha_c, \alpha_c]$ intervallumba esik. Az összes többi rotor szükségképpen visszaverődik. A klasszikus transzmissziós valószínűséget az áthaladó rotorok és a beeső rotorok számának aránya határozza meg, amely az egyenletes eloszlás miatt az alábbi módon számolható

$$T^{\text{cl}} = \frac{\text{transzmissziót megengedő rotor hajlásszögek}}{\text{összes lehetséges rotor hajlásszög}}. \quad (4.8)$$

Az általunk elképzelt szimmetrikus rotor esetén, a fizikai rendszer nem változik meg, ha a részecskét π szögel elforgatjuk. Így (4.8) nevezőjében π szerepel. A (4.5)-ből pedig azt találjuk, hogy a számláló, azaz a klasszikus transzmissziót biztosító szögtartomány hossza $2\alpha_c$. Tehát a keresett valószínűség

$$T^{\text{cl}} = \frac{2\alpha_c}{\pi} = \frac{2}{\pi} \arctan \frac{c}{\sqrt{1-c^2}} = \frac{2}{\pi} \arcsin(c). \quad (4.9)$$

Határesetben, ha az apertúra b mérete megközelíti a rotor a hosszát, azaz $c \rightarrow 1$, akkor $\alpha_c \rightarrow \pi/2$ és így $T^{\text{cl}} \rightarrow 1$, vagyis minden rotor átmegy, ahogyan azt el is várjuk.

Figyeljük meg, hogy ez a *klasszikus* átmeneti valószínűség csak a rotor és az apertúra relatív méretétől függ és független az érkező rotorok E energiájától. A továbbiakban azt fogjuk vizsgálni, hogy ez a valószínűség hogyan módosul a kvantumos leírás során.

4.3. Belső struktúrával rendelkező kvantumos részecskék

Az előbbi klasszikus megfontolások a rotor szóródásáról a vékony ernyőn lévő résen csak geometriai jellemzőket tartalmaztak. A folyamat egyedül a rotor a hosszától és az apertúra b méretétől, pontosabban a $c := b/a$ apertúra méret per rotorhossz aránytól függ és a geometriai megfontolásokban a κ tömegeloszlás paraméter (4.1) nem játszott szerepet. Ennek az az oka, hogy olyan beérkező rotorokat föltételeztünk, amelyek az ernyőtől távol nem forognak. Tehát a klasszikus p_φ impulzusnyomaték eltűnik, így a Hamilton-függvény forgásra vonatkozó része – amely az $1/\mathcal{M}$ tényezőn keresztül tartalmazza a κ -t – sem játszik szerepet a mozgás alakításában.

Ezzel ellentétben a kvantummechanikai leírás során a κ paraméter is befolyásolja a szórási folyamatot még abban az esetben is, ha föltételezzük, hogy az akadályhoz érkező részecskék nem forognak. Az a hosszúság ugyan mond valamit a részecske méretéről, de nem írja le teljesen a réssel kölcsönható részecske kiterjedését. Gondoljunk például

egy kétatomos molekulára, melynek tömege a két atommagban összpontosul, miközben a molekula valódi méretét az elektronok eloszlása írja le.

4.3.1. A kvantum rotor

Kvantummechanikai modellünk egy szimmetrikus merev rotor. Tehát megengedjük a rendszer forgását, de eltekintünk az alkotóelemek rezgésétől, ami növelné a probléma dimenzióját. Ez a közelítés mindaddig jó, amíg a kezdeti mozgási energia jóval alacsonyabb az első gerjesztett rezgési állapot energiájánál. Figyelembe véve, hogy a rezgési állapotok gerjesztéséhez lényegesen nagyobb energia kell, mint a forgási állapotok gerjesztéséhez, az alacsony energiájú tartományban a merev rotor modell értelmes.

A klasszikus átmeneti valószínűséggel való összehasonlítás során majd föltételezzük, hogy az akadályhoz érkező részecskék a forgás szempontjából alapállapotban vannak.

A Hamilton-operátor

Kvantummechanikában a klasszikus Hamilton-függvényből származtatható Hamilton-operátor írja le a mozgást. A rendszer $|\Psi_E\rangle$ energia-sajátállapotait a

$$\hat{H}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle \quad (4.10)$$

időfüggetlen Schrödinger-egyenlet határozza meg. Koordináta-reprezentációban ez az egyenlet az x és φ koordinátákkal jellemzett rotor $\langle x, \varphi | \Psi_E \rangle := \Psi_E(x, \varphi)$ hullámfüggvényére vonatkozó differenciálegyenletté alakul. A \hat{H} Hamilton-operátor a klasszikus Hamilton-függvény (4.2) kifejezéséből származtatható úgy, hogy a klasszikus p_x és p_φ impulzusokat rendre helyettesítjük az $-i\hbar\partial/\partial x$ és $-i\hbar\partial/\partial\varphi$ differenciáloperátorokkal.

Ennek eredményeként egy adott energiájú rotor mozgását az alábbi parciális differenciálegyenlet írja le

$$\left[\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + E \right] \Psi_E(x, \varphi) = 0. \quad (4.11)$$

Ez az x és φ változóktól függő $\Psi_E(x, \varphi)$ függvényre vonatkozó kétdimenziós Helmholtz egyenlet, amit ki kell még egészítenünk a modellproblémához illeszkedő peremföltételekkel. A klasszikus mechanikai kényszerek éppen ezekben a peremföltételekben fognak megjelenni a kvantumos leírás során.

Dimenziótlanított és átskálázott változók

Egyszerűbben kezelhető dimenziótlanított sajátérték-egyenlethez jutunk és a releváns paraméterek beazonosításában is segít, ha elvégezzük az alábbi változó cseréket és átskálázásokat. Mérjük a bejövő rotor E energiáját

$$E_0 := \frac{\hbar^2}{2M(\kappa a)^2} \quad (4.12)$$

egységeken, és ennek megfelelően legyen a dimenziótlan energia

$$\varepsilon := E/E_0. \quad (4.13)$$

Vezessük be továbbá az s dimenziótlanított tömegközépponti koordinátát az

$$s := x/(\kappa a) \quad (4.14)$$

definícióval. Ezekben az egységekben a (4.11) energiasajátérték-egyenlet alakja leegyszerűsödik,

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \varepsilon \right] \Psi_\varepsilon(s, \varphi) = 0. \quad (4.15)$$

Az s koordináta bevezetése nyomán a kritikus távolság

$$s_c = \frac{1}{\kappa} \sqrt{1 - c^2} \quad (4.16)$$

kifejezésében megjelenik a $c := b/a$ apertúra méret per rotorhossz arány és a κ tömegeloszlás paraméter. A geometriai kényszert leíró kifejezések pedig ekkor a következők lesznek: a transzmisszió során elérhető (4.6) szögtartomány

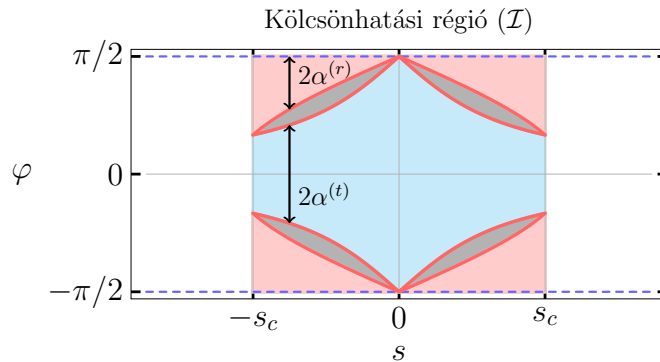
$$|\varphi| \leq \alpha^{(t)}(s), \quad \text{ahol} \quad \alpha^{(t)}(s) := \arctan \frac{c}{\kappa|s|}, \quad (4.17)$$

míg a reflexió során elérhető (4.7) szögtartomány

$$\left| \varphi - \frac{\pi}{2} \right| \leq \alpha^{(r)}(s), \quad \text{ahol} \quad \alpha^{(r)}(s) := \arcsin(\kappa|s|). \quad (4.18)$$

A geometriai helyzet szempontjából tehát c és κ a releváns paraméterek.

Forgási kényszerek mint kvantumos peremföltételek



4.4. ábra. Geometriailag megengedett (piros és kék), illetve tiltott (sötét szürke) forgási szögtartományok az $|s| < s_c$ kölcsönhatási régióban, $c = 0.5$ és $\kappa = 1$ paraméter értékek esetén. A piros rész a visszaverődő (r), míg a kék rész az áthaladó (t) részecskékre vonatozik. Egy adott s helyen a megengedett szögtartományok szélessége az áthaladó és visszavert részecskékre rendre $2\alpha^{(t)}(s)$ (4.17) alapján és $2\alpha^{(r)}(s)$ (4.18) alapján.

A 4.4 ábrán vázoltuk az adott tömegközépponti koordinátánál elérhető φ szögtartományt, amit a már dimenziótlanított esetben a (4.17) és (4.18) formulák határoznak meg.

A $-s_c \leq s \leq s_c$ tartományt a továbbiakban *kölcsönhatási régió*nak nevezzük, és röviden \mathcal{I} -vel jelöljük. Ebben a tartományban a kényszeres mozgást és az s és φ változók ebből adódó összefonódását a hullámfüggvényre kirótt peremföltételek segítségével foglaljuk bele a kvantummechanikai leírásba. Azzal a természetes kikötéssel élünk, hogy a hullámfüggvénynek el kell tűnnie a geometriailag megengedett régió határán – amit a 4.4 ábrán piros vonal jelez – és nullának kell lennie azon kívül.

$$\Psi_\varepsilon(s, \varphi) = \begin{cases} \Psi_\varepsilon^{(r)}(s, \varphi) & \text{ha } \left| \varphi - \frac{\pi}{2} \right| \leq \alpha^{(r)}(s) \\ \Psi_\varepsilon^{(t)}(s, \varphi) & \text{ha } |\varphi| \leq \alpha^{(t)}(s) \\ 0 & \text{különben} \end{cases}, \quad \text{ahol } -s_c \leq s \leq s_c. \quad (4.19)$$

Az apertúrán áthaladni képes részecskékre vonatkozó (t) régió határán tehát

$$\Psi_\varepsilon^{(t)}(s, \varphi = \pm \alpha^{(t)}(s)) = 0, \quad \text{miközben } -s_c \leq s \leq s_c. \quad (4.20)$$

Ha a szöget az y tengelytől mérjük, azaz elvégezzük az alábbi változó eltolást

$$\varphi \rightsquigarrow \tilde{\varphi} := \varphi - \frac{\pi}{2}, \quad (4.21)$$

akkor a fenti (4.20) föltétellel formailag megegyezik az ernyő felületéről visszaverődő részecskékre (r) vonatkozó föltétel

$$\Psi_\varepsilon^{(r)}(s, \tilde{\varphi} = \pm \alpha^{(r)}(s)) = 0, \quad \text{miközben } -s_c \leq s \leq s_c. \quad (4.22)$$

Tehát egy ilyen eltolást alkalmazva, a későbbi számítások során együtt tudjuk kezelni a két esetet.

A forgási szimmetria hatása

Föltételezésünk szerint a rotor szimmetrikus, így egy π szögű forgatás nincs hatással a fizikai rendszerre. Ez a Ψ_ε energia-sajátfüggvényekre vonatkozóan az alábbi szimmetriamegkötést jelenti

$$\hat{\mathcal{F}}(\pi)\Psi_\varepsilon(s, \varphi) := \Psi_\varepsilon(s, \varphi + \pi) = \pm \Psi_\varepsilon(s, \varphi) \quad \text{ahol } -\infty < s < \infty. \quad (4.23)$$

Tehát az energia-sajátfüggvények Hilbert tere szétesik egy szimmetrikus (+) és egy antiszimmetrikus (−) altér direkt összegére. A 4.4 ábrán ezt a π szerinti periodicitást szaggatott kék vonalakkal jelöljük.

A szabadon forgó rotor

Az \mathcal{I} kölcsönhatási régió kívül a rotort nem befolyásolja az apertúra korlátozó hatása, így a (4.15) sajátérték-egyenlet megoldását kereshetjük $\Psi_\varepsilon(s, \varphi) = \psi_{k_m}^{(\pm)}(s) \phi_m(\varphi)$ szorzat alakban. A kétdimenziós Schrödinger-egyenlet ekkor két darab egydimenziós egyenletté szeparálódik

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial s^2} + k_m^2 \right] \psi_{k_m}^{(\pm)}(s) = 0 \quad \text{és} \quad \left[\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \varepsilon_m^{(\text{rot})} \right] \phi_m(\varphi) = 0, \quad (4.24)$$

miközben az ε energiasajátérték a transzláció és a forgási energia összege:

$$\varepsilon = k_m^2 + \varepsilon_m^{(\text{rot})}. \quad (4.25)$$

A forgást leíró $\phi_m(\varphi)$ hullámfüggvény (4.23) alapján vagy π periodikus, vagy egy „–” előjelet kap, ha a rendszert π -vel elforgatjuk. További vizsgálataink során a szimmetrikus altéren dolgozunk, azaz

$$\phi_m(\varphi + \pi) = \phi_m(\varphi). \quad (4.26)$$

Ebből adódóan az exponenciális függvényként adódó megoldásokban páros kitevő szerepel:

$$\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{i2m\varphi}, \quad \varepsilon_m^{(\text{rot})} = 4m^2, \quad \text{ahol } m \in \mathbb{Z}. \quad (4.27)$$

Ezek a függvények teljes ortonormált rendszert alkotnak a $[-\pi/2, \pi/2]$ intervallumon periodikus határföltétel mellett értelmezett függvények terén. (Az $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$ faktor biztosítja a normáltságot.)

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \phi_n^*(\varphi) \phi_m(\varphi) = \delta_{nm} \quad (4.28)$$

Az \mathcal{I} kölcsönhatási régiótól távol a transzlációt

$$\psi_{k_m}^{(\pm)}(s) = e^{\pm i k_m s} \quad (4.29)$$

síkhullám megoldások írják le, ahol egy adott ε bejövő energián adott m -mel jellemzett forgási állapot esetén a

$$k_m = \sqrt{\varepsilon - 4m^2} \quad (4.30)$$

hullámszámnak valósnak kell lennie. Tehát adott ε bejövő energia esetén korlátozott számú haladó módus létezik. A (4.30) szerint a lehetséges módusok indexei a következők:

$$m = -m_0, \dots, 0, \dots, qm_0, \quad \text{ahol } m_0 := \lfloor \sqrt{\varepsilon}/2 \rfloor. \quad (4.31)$$

Így összesen $2m_0 + 1$ haladó módus lehetséges. A $\lfloor \cdot \rfloor$ talpas zárójel az egészrész képzést jelöli.

A síkhullám megoldások mellett azonban vannak *exponenciálisan lecsengő megoldások* is, amelyeket a \mathcal{I} kölcsönhatási régió közelében már nem hanyagolhatunk el. Ezt formálisan úgy vesszük figyelembe, hogy a (4.29) függvényben az m_0 -nál nagyobb indexekre a képzetes

$$k_m = i\sqrt{4m^2 - \varepsilon} \quad (4.32)$$

hullámszámokat is megengedjük megfelelő előjellel. Tehát ebben az esetben a megoldásokat indexelő m tetszőleges egész értéket fölvehet. A valószínűségi amplitúdókat pedig úgy kell megválasztanunk, hogy a régió adott oldalán csak lecsengő exponenciálisok szerepeljenek.

Egy tetszőleges energia-sajátfüggvény és a megfelelő folytonos energia-sajátérték így

$$\Psi_\varepsilon^{(f)}(s, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(c_m^+ e^{i k_m s} + c_m^- e^{-i k_m s} \right) \phi_m(\varphi); \quad \varepsilon = k_m^2 + 4m^2, \quad (4.33)$$

alakú, figyelembe véve, hogy az $m > m_0$ és $m < -m_0$ indexekre

$$\begin{cases} \text{ha } s < -s_c \text{ (bal oldal),} & \text{akkor } c_m^+ \equiv 0 \\ \text{ha } s > s_c \text{ (jobb oldal),} & \text{akkor } c_m^- \equiv 0. \end{cases} \quad (4.34)$$

4.3.2. A kvantummechanikai szórási probléma

A rotor apertúrával való kölcsönhatását egy *kvázi-egydimenziós stacionárius szórási problémaként* [75] tárgyaljuk. A rotor (4.2) Hamilton-függvénye két kinetikus energia tag összege, melyek közül az első a translációt írja le, míg a második a forgást jellemzi. Az ernyőtől távol a részecske szabad, azaz a két szabadsági fok nem csatolódik össze, így a Ψ_ε energia-sajátfüggvény síkhullámként haladó szabad forgási módusok kombinációjának tekinthető.

A balról fix ε energiával érkező részecske a 4.4 ábrán látható akadállyal találja szembe magát és azon szóródik. A síkhullám módusok által képviselt valószínűségi áram egy része átjut az akadályon, míg egy másik része visszavert hullámként jelentkezik a bal oldalon. Ezt a viselkedést a matematikai leírásban két további – Ψ_ε -re az aszimptotikusan távoli régióban érvényes – peremföltétellel biztosítjuk.

Az aszimptotikusan szabad tartományok

A balról bejövő hullám az adott energián lehetséges energia-sajátfüggvények lineáris kombinációjaként írható föl

$$\Psi_\varepsilon^{\text{in}}(s, \varphi) = \sum_{m=-m_0}^{m_0} c_m e^{ik_m s} \phi_m(\varphi). \quad (4.35)$$

Itt a c_m komplex értékű valószínűségi amplitúdók fejezik ki a translációs és a forgási szabadsági fokok összefonódását.

A \mathcal{I} kölcsönhatási régiótól távol, a bal oldalon a stacionárius megoldás a (4.35) módon adott bejövő hullám és a visszavert (reflektált) hullám összegeként írható föl

$$\Psi_\varepsilon^L(s, \varphi) = \sum_{m=-m_0}^{m_0} \left(c_m e^{ik_m s} + r_m e^{-ik_m s} \right) \phi_m(\varphi). \quad (4.36)$$

A kölcsönhatási régiótól távol, a jobb oldalon jelenik meg az átengedett (transzmittált) hullám

$$\Psi_\varepsilon^R(s, \varphi) = \sum_{m=-m_0}^{m_0} t_m e^{ik_m s} \phi_m(\varphi). \quad (4.37)$$

Az aszimptotikus hullámfüggvény alak, vagyis az r_m és t_m együtthatók ismeretében kiszámítható a szórást jellemző *transzmisszió* és *reflexió*:

$$T(\varepsilon) = \frac{\sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |t_m|^2}{\sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |c_m|^2} \quad \text{és} \quad R(\varepsilon) = \frac{\sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |r_m|^2}{\sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |c_m|^2}. \quad (4.38)$$

Ezek a mennyiségek az adott keresztmetszeten átengedett, illetve visszavert valószínűségi áramot adják meg az összes bemenő áramhoz viszonyítva, és függenek az ε energiától egyrészt az r_m és t_m valószínűségi amplitúdókon, másrészt a k_m hullámszámokon keresztül. A $T(\varepsilon)$ transzmisszió a (4.9) klasszikus T^{cl} átmeneti valószínűség kvantumos megfelelőjeként értelmezhető.

Kapcsolat a szabad régiók között: az S-mátrix

A bejövő c_m amplitúdók és a kimenő r_m és t_m amplitúdók közötti lineáris kapcsolatot az S-mátrixszal szokás megadni:

$$r_m = \sum_n S_{mn}^{LL} c_n, \quad \text{és} \quad t_m = \sum_n S_{mn}^{RL} c_n, \quad (4.39)$$

ahol az L és R jelölés a \mathcal{I} -től távoli, jobb és bal oldali régiókra utal. Tehát ahhoz, hogy kiszámítsuk a (4.38) transzmissziót tetszőleges c_m -ek, azaz tetszőleges bejövő hullám esetén, szükségünk van az S-mátrix \mathbf{S}^{LL} és \mathbf{S}^{RL} blokkjára.

Az előző (4.39) definíciót kompaktabb, blokk-mátrixos alakban is fölírhatjuk

$$\left[\begin{array}{c|c} \mathbf{S}^{LL} & \mathbf{S}^{LR} \\ \hline \mathbf{S}^{RL} & \mathbf{S}^{RR} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \mathbf{c} \\ \mathbf{0} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \mathbf{r} \\ \mathbf{t} \end{array} \right], \quad (4.40)$$

ahol $\mathbf{S}^{RR} = \mathbf{S}^{LL}$ és $\mathbf{S}^{LR} = \mathbf{S}^{RL}$ a jobb és bal oldal fölcserélhetősége miatt.

Az irodalomban gyakran előfordul az itt használt (4.39) S-mátrix egy módosított definíciója is, amely a bejövő és a kimenő *fluxusok* (valószínűségi áram amplitúdók) közötti lineáris összefüggést írja le. Ez utóbbit \mathbf{S}' -vel jelölve a két mátrix elemei között a hullámszámokkal való átskálázás teremt kapcsolatot:

$$S_{nm}'^{pq} = S_{nm}^{pq} \sqrt{\frac{k_n}{k_m}}. \quad (4.41)$$

Tehát egy egydimenziós (így egymódusú) szórási problémánál a két definíció egybeesik. A főntebb vázolt több módusfüggvényt is megkívánó kétdimenziós esetben azonban már módusonként más és más a hullámszám, így a két mátrix valóban különbözik.

Megjegyezzük továbbá, hogy a valószínűségi áram megmaradása miatt ez a módosított szórási mátrix *unitér*, azaz

$$\mathbf{S}' \cdot (\mathbf{S}')^\dagger = \mathbb{1}. \quad (4.42)$$

4.4. Összefoglalás

Leegyszerűsített kétdimenziós forgó molekula modellünkéből kiindulva a klasszikus kényszereket a hullámfüggvényre kirótt kvantumos peremföltételekké fogalmaztuk át, így egy *kvázi egydimenziós* szórási problémához jutottunk. A szabad részekben a forgás szempontjából periodikus peremföltételek következtében a forgásra vonatkozó megoldásfüggvények spektruma diszkrét. Egy-egy ilyen diszkrét módusra az aszimptotikus függvényalak olyan mint az egydimenziós szórásproblémáknál, de természetesen a különböző módusok síkhullamai szóródhatnak egymásba. A szabad részeknek tehát úgynevezett „*drótok*” felelnek meg, amelyek el- illetve odavezetik a valószínűségi áramokat a kölcsönhatási régióhoz. A kölcsönhatás következtében azután az ezen drótok különböző módusaiban lévő síkhullámok szóródnak egymásba, és feladatunk éppen az, hogy a létrejövő „egymásbaszóródást” az S-mátrixon keresztül meghatározzuk.

A jelzett feladatot két módszerrel is megoldjuk. Az 5. fejezetben egy közelítő analitikus eljárást alkalmazunk, míg a 6. fejezetben egy Green-függvényes technikán alapuló numerikus módszert használunk.

5. fejezet

Forgó molekula problémájának megoldása analitikus közelítéssel

Ebben a fejezetben az előző fejezetben leírt apertúrán áthaladó forgó molekula modell kvantummechanikai szórási problémájának (lásd a 4.3.2. alszakaszban) egy lehetséges analitikus megoldását mutatjuk be. A kölcsönhatási régióra úgy tekintünk mint egy változó méretű dobozra, így a hullámfüggvényt a doboz méretét követő szinuszfüggvények segítségével írjuk föl. Ezt a megoldásokat fölhasználva kiírjuk az energiasajátérték egyenletből a transzlációt leíró kifejtési együtthatókra következő csatolt differenciálegyenlet-rendszert. Ebben az egyenletrendszerben azután alacsony energiát föltételezve a forgási és a transzlációs szabadsági fokot összezsugoroló tagok közül csak a diagonálisakat hagyjuk meg (adiabatikus közelítés).

Ez a közelítés szétcsatolja az egyes szinuszos módusok valószínűségi amplitúdóira vonatkozó egyenletrendszert, a peremföltétel hatása pedig egy effektív potenciálként jelentkezik a szétcsatolt egyenletekben. A fejezet további részében az effektív potenciálokat részletesen elemezzük, majd nem forgó bejövő részecskék sokaságát föltételezve elvégezzük a kapott hullámfüggvények illesztését, így megkapjuk a keresett transzmissziót az energia függvényében. A fejezet hátralévő részében a geometriai szituációt leíró paraméterek függvényében vizsgáljuk az alacsony energián a transzmisszióban lehetséges rezonanciákat. Ezen rezonanciák energiájára az effektív potenciálokhoz illesztett fiktív oszcillátor potenciál segítségével egy a geometriai paraméterektől függő közelítő formulát is adunk.

5.1. Egy analitikus közelítés

Amikor a rotor eléri a 4.4 ábrán bemutatott $-s_c \leq s \leq s_c$ kölcsönhatási régiót, a teljes körbefordulás már nem lehetséges, működésbe lépnek a 4.3.1. alszakaszban részletezett kényszerek. Ezeket a kényszereket a hullámfüggvényre kirótt peremföltételekkel vesszük figyelembe, amelyek az s és φ változók összefonódásához vezetnek. A matematikai leírás a φ változó megfelelő eltolásával teljesen analóg a (t) (4.20) és (r) (4.22) tartományon, ahol a klasszikusan megengedett szögtartományokat az $\alpha^{(t)}(s)$ (4.17) és $\alpha^{(r)}(s)$ (4.18) függvények határozzák meg.

Vizsgáljuk meg először a problémát a peremföltételt meghatározó tetszőleges $\alpha(s)$ függvény esetén. Itt az $\alpha(s)$ -ről föltesszük, hogy a $[-s_c, s_c]$ tartományon folytonosan differen-

ciálható függvénye s -nek. Tehát a (4.15) energia-sajátérték egyenlet megoldásait keresve a $\Psi_\varepsilon(s, \varphi)$ sajátfüggvényekre előírjuk, hogy a klasszikusan megengedett régió határán tűnjenek el, azaz

$$\Psi_\varepsilon(s, \varphi = \pm\alpha(s)) = 0, \quad (5.1)$$

míg a $|\varphi| \leq \alpha(s)$ tartományon kívül definíció szerint nullának vesszük őket.

A következőkben az (5.1) peremföltételt alapján a tömegközépponti koordinátára vonatkozó csatolt differenciálegyenlet-rendszert vezetünk le. A csatolás a tömegközépponti koordinátától függő, a peremföltételt meghatározó $\alpha(s)$ függvényen keresztül valósul meg.

5.1.1. Általános egyenlet a módusokra

A kölcsönhatási régióra úgy tekintünk tehát mint egy változó méretű dobozra, amely minden egyes s -re éppen $|\varphi| \leq \alpha(s)$ méretű. Ennek a nézőpontnak megfelelően a hullámfüggvényt a doboz méretét követő (5.3) szinuszfüggvények segítségével írjuk föl, és a megoldást az alábbi alakban keressük:

$$\Psi_\varepsilon(s, \varphi) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(s) \chi_n[\varphi, \alpha(s)], \quad (5.2)$$

ahol

$$\chi_n[\varphi, \alpha(s)] := \frac{1}{\sqrt{\alpha(s)}} \sin \left[\frac{n\pi(\varphi + \alpha(s))}{2\alpha(s)} \right]. \quad (5.3)$$

Az (5.3) összegben szereplő egyes tagokra mint a problémában szereplő módusokra foguk hivatkozni. Látható, hogy a forgást leíró $\chi_n[\varphi, \alpha(s)]$ dobozba zárt részecske hullámfüggvények követik a doboz méretének $\alpha(s)$ -el jellemzett változását, továbbá ezek a függvények kielégítik a

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \varepsilon_m^{(\text{rot})} \right] \chi_m[\varphi, \alpha(s)] = 0 \quad (5.4)$$

egydimenziós egyenletet az alábbi s -től függő energiával

$$\varepsilon_m^{(\text{rot})} := \varepsilon_m^{(\text{rot})}(s) = \left(\frac{n\pi}{2\alpha(s)} \right)^2. \quad (5.5)$$

Ezek minden egyes s esetén ortonormáltak, azaz

$$\int_{-\alpha(s)}^{\alpha(s)} d\varphi \chi_m^*[\varphi, \alpha(s)] \chi_n[\varphi, \alpha(s)] = \delta_{mn}. \quad (5.6)$$

Az eredeti (4.15) kétdimenziós problémában azonban, az $\alpha(s)$ -en keresztül megjelenő tömegközépponti koordináta függés miatt, a transláció és a forgás már nem csatolható szét. Éppen arra vagyunk kíváncsiak, hogy az (5.2) kikötést alkalmazva, milyen összefüggés adódik az ismeretlen $\psi_n(s)$ függvényekre.

A $\psi_n(s)$ -ekre vonatkozó egyenlet levezetéséhez behelyettesítjük az (5.2) kikötést a (4.15) Schrödinger-egyenletbe. A szükséges deriváltak kiszámítása után levetítjük az eredményül

kapott egyenletet a $\chi_n[\varphi, \alpha(s)]$ függvényekre. Ily módon a φ függést kiküszöbölve, az alábbi differenciálegyenlet-rendszert kapjuk a translációt leíró $\psi_m(s)$ függvényekre:

$$\sum_{m=1}^{\infty} \left[\delta_{nm} \left(\frac{d^2}{ds^2} - \left(\frac{n\pi}{2\alpha(s)} \right)^2 + \varepsilon \right) + \right. \\ \left. + 2A_{nm} \left(\frac{\alpha'(s)}{\alpha(s)} \right) \frac{d}{ds} - B_{nm} \left(\frac{\alpha'(s)}{\alpha(s)} \right)^2 + A_{nm} \left(\frac{\alpha''(s)}{\alpha(s)} \right) \right] \psi_m(s) = 0. \quad (5.7)$$

Ahol $\alpha'(s)$ és $\alpha''(s)$ a peremföltételt hordozó $\alpha(s)$ függvény deriváltjait jelöli. Az (5.7) formula levezetést az [A4]-ben adjuk meg. Megjegyezzük, hogy a fenti (5.7) egyenletrendszerben szereplő \mathbf{A} és \mathbf{B} mátrixok elemei függetlenek az s -től, konkrét alakjukat szintén az [A4]-ben részletezzük.

Ezen a ponton kiemeljük az (5.7) egyenlet három tulajdonságát:

- A δ_{nm} Kronecker-deltát szorzó zárójeles kifejezés egymástól független Schrödinger-egyenletek összességét határozza meg. Ezen egyenletekben rendre megjelenik az

$$n^2 v(s) := \left(\frac{n\pi}{2\alpha(s)} \right)^2 = n^2 \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 [\alpha(s)]^{-2} \quad (5.8)$$

effektív potenciáltér, amelynek s függését a peremföltételt leíró $\alpha(s)$ függvény határozza meg.

- A további három tagban látjuk, hogy a peremföltétel s koordinátától való függése, amely az (5.2) kikötésben a $\chi_n[\varphi, \alpha(s)]$ függvényeken keresztül fejt ki hatását, valóban összecsatolja a különböző n -ekkel indexelt módusokat. Ez a helyfüggő csatolás az (α'/α) és (α''/α) tényezőkben jelenik meg.
- Ez az utóbbi három tag eltűnik, ha $\alpha(s) \equiv \text{const}$, és az elvárásoknak megfelelően megkapjuk a konstans korlátozással vett rotor esetét, amelyben az egyes módusok függetlenül terjednek.

5.1.2. A módusokat szétcsatoló közelítés

Nem túl gyorsan változó $\alpha(s)$ függvényre elhanyagolhatjuk az $\alpha(s)$ deriváltjait tartalmazó tagokat az (5.7) egyenletrendszerben. Ezzel megszüntetjük a csatolást, és függetlenül terjedő $\psi_m(s)$ translációs módusokat kapunk.

Megjegyezzük, hogy a (4.17) $\alpha^{(t)}(s)$ és a (4.18) $\alpha^{(r)}(s)$ függvények – a bennük szereplő abszolút érték miatt – nem folytonosan differenciálhatóak. Az $s = 0$ pontban törést szenvednek, ennek megfelelően ott nem deriválhatóak. Az elsőrendű deriváltaknál ugrást kapunk $s = 0$ -ban, a másodrendű derivált pedig már egy Dirac-delta függvényt eredményez.

Alacsony energián azonban még mindig kiindulhatunk abból az intuitív képből, hogy egy „lassan mozgó részecske nem érzékeli ezt a gyors változást”. Elhanyagolva az $\alpha(s)$ függvény hirtelen változását $s = 0$ -ban, és elhanyagolva az α'/α és α''/α hányadosokat, elhagyjuk az (5.7) egyenletrendszerben az egyes translációs módusokat összekapcsoló tagokat, és független egyenletek sokaságához jussunk. Ebben a közelítésben a szétcsatolt

$\psi_n^{(j)}(s)$ transzlációs módusfüggvényeket az

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \varepsilon - n^2 v^{(j)}(s) \right] \psi_n^{(j)}(s) = 0, \quad j = t, r \quad (5.9)$$

egyenlet határozza meg. A (4.18) definíció szerint az (5.8) effektív potenciál a visszaverődő részecskékre

$$v^{(r)}(s) := \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 [\alpha^{(r)}(s)]^{-2} = \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 [\arcsin |\kappa s|]^{-2}, \quad (5.10)$$

míg a (4.17) formula alapján az effektív potenciál az áthaladó részecskékre

$$v^{(t)}(s) := \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 [\alpha^{(t)}(s)]^{-2} = \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \left[\arctan \left(\frac{c}{\kappa |s|} \right) \right]^{-2}. \quad (5.11)$$

Ne feledjük azonban el, hogy az (5.2) kifejtés csak a $[-s_c, s_c]$ intervallumon érvényes. Ennek megfelelően az (5.9) effektív egydimenziós egyenlet is csak ebben a régióban használható. Így nem tekinthetünk ezekre a $v^{(j)}$ potenciálokra úgy mintha az egész $[-\infty, \infty]$ intervallumon meghatároznák a mozgást. Tehát ezek a közelítésből kapott potenciálok csak az $|s| < s_c$ régióban használhatóak a hullámfüggvény meghatározására, a határokon viszont már a teljes kétdimenziós hullámfüggvényeket kell illeszteniünk (lásd részletesen az 5.1.4. szakaszban).

5.1.3. Az effektív potenciálok tulajdonságai

A következőkben áttekintjük az előző szakaszban nyert $v^{(r)}(s)$ és $v^{(t)}(s)$ effektív potenciálok tulajdonságait (5.9). A határeseteket megvizsgálva megbizonyosodunk, hogy nem kaptunk a fizikai intuíciónknak teljesen ellentmondó egyszerűsítést.

A visszaverődő részecskére vonatkozó potenciál

Elsőként figyeljük meg, hogy a visszaverődő részecskékre ható $v^{(r)}(s)$ effektív potenciál (5.10) nem függ explicite módon a c apertúra méret per rotorhossz aránytól. Ez a paraméter csak implicit módon jelenik meg: megváltoztatja a perem $\pm s_c$ helyét, ami (4.16) alapján függ a c -től és a κ -tól is. Ennek a következményét jól mutatja az 5.1. ábra, ahol a $v^{(r)}(s)$ -et ábrázoltuk $c = 0.5$ és $c = 0.9$ esetén.

Az $|s| \leq s_c$ kölcsönhatási régió szélén, a visszavert részecskékre vonatkozó potenciálgát magassága független a κ tömegeloszlás paramétertől:

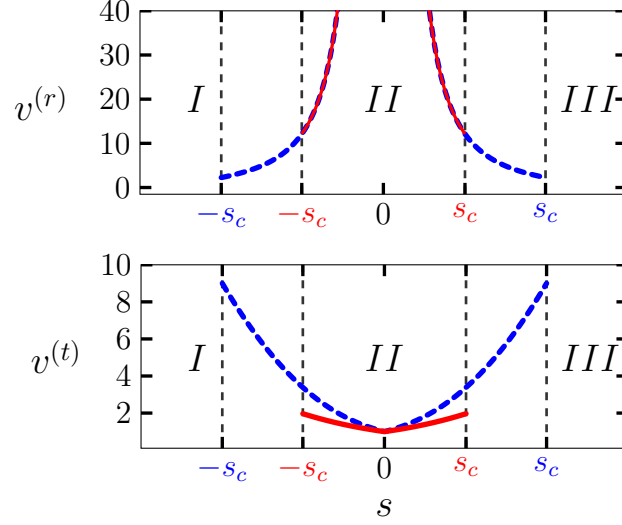
$$v^{(r)}(\pm s_c) = \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 [\arcsin \sqrt{1 - c^2}]^{-2} = \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 [\arccos c]^{-2}. \quad (5.12)$$

Ha az apertúra jóval kisebb mint a rotor mérete, akkor a fönti érték 1-hez tart

$$v^{(r)}(\pm s_c) \rightarrow 1, \quad \text{ha } c \ll 1. \quad (5.13)$$

A másik határesetben – amikor az apertúra éppen csak kisebb a rotor méreténél – azt találjuk, hogy a potenciálgát kezdeténél

$$v^{(r)}(\pm s_c) \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \frac{1}{1 - c}, \quad \text{ha } c \lesssim 1. \quad (5.14)$$



5.1. ábra. A $v^{(r)}$ effektív potenciál (felső ábra) az (5.10) összefüggés alapján, és a $v^{(t)}$ effektív potenciál (alsó ábra) az (5.11) alapján. A potenciálokat az átskálázott s tömegközépponti koordináta függvényében ábrázoltuk. A tömegeloszlás paraméter értéke: $\kappa = 1$. A szaggatott kék vonal a $c := b/a = 0.5$ esetet mutatja, míg a piros vonal $c = 0.9$ -re vonatkozik. A $v^{(r)}(s)$ potenciál, amely az ernyőre érkező és onnan visszaverődő részecskékre vonatkozik végtelenül magas akadályt képez $s = 0$ -ban, míg a $v^{(t)}$ potenciál, amely a résen áthaladó részecskékre vonatkozik, minimummal rendelkezik ugyanitt. Ne feledjük azonban, hogy ezek a potenciálok csak az $|s| \leq s_c$ (II) tartományban értelmesek, ahogyan azt érzékeltettük is az ábrákon szaggatott függőleges vonalakkal. A tartományt határoló s_c pedig függ a c paramétertől.

Ez az érték minden határon túl növekszik, amint c tart az 1-hez. Közben ebben a határesetben az s_c , és vele együtt a potenciál tartója is nullába konvergál, hiszen $s_c \approx (\sqrt{2}/\kappa)\sqrt{1-c}$. Ez a viselkedés összhangban van azzal, hogy az apertúra közepén, $s = 0$ -ban a visszaverődő részecskékre ható effektív potenciál korlátlanul növekszik,

$$v^{(r)}(s) \rightarrow \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{1}{(\kappa|s|)^2}, \quad \text{ha } |s| \ll s_c. \quad (5.15)$$

Az áthaladó részecskére vonatkozó potenciál

Vizsgáljuk most meg az áthaladó részecskékre vonatkozó $v^{(t)}(s)$ effektív potenciált (5.11). Ellentétben a visszaverésre vonatkozó $v^{(r)}(s)$ -el a transzmissziós potenciál expliciten függ a c paramétertől. Azonban a kölcsönhatási régió határán – a visszavert esetben tapasztaltakhoz hasonlóan (5.12) – $v^{(t)}(\pm s_c)$ értéke független κ -tól,

$$v_c := v^{(t)}(\pm s_c) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left[\arctan \left(\frac{c}{\sqrt{1-c^2}} \right) \right]^{-2}. \quad (5.16)$$

Ez a kis apertúrákhoz tartozó határesetben

$$v_c \rightarrow \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left(\frac{1}{c}\right)^2, \quad \text{ha } c \ll 1. \quad (5.17)$$

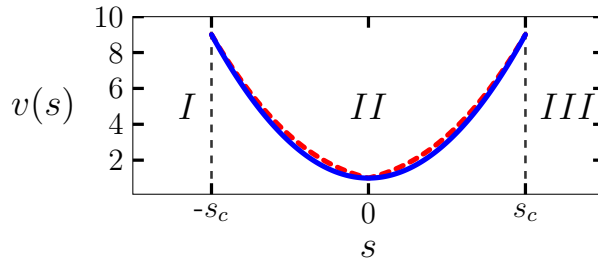
Ahogy a részecske egyre közelebb kerül a rés közepéhez $v^{(t)}(s)$ csökken. Az apertúra közepénél, (5.11)-be behelyettesítve az $\arctan(z) \approx \pi/2 - 1/z$ aszimptotikus formát, amely $z \rightarrow \infty$ esetén érvényes azt kapjuk, hogy a potenciál lineárisan változik:

$$v^{(t)}(s) \approx 1 + \frac{4}{\pi c} \kappa |s|. \quad (5.18)$$

A $v^{(t)}$ függvény értéke az apertúra $s = 0$ közepén

$$v^{(t)}(0) := v_0 = 1. \quad (5.19)$$

A lineáris viselkedésű részen (5.18) a közelítő egyenes meredeksége c -vel fordítva, míg κ -val egyenesen arányos. Vegyük észre, hogy a $v^{(t)}(s)$ potenciál az $s = 0$ -ban nem differenciálható. A $v^{(t)}(s)$ függvény grafikonja nem sima, az apertúra közepén törést (sarkot) mutat [70, 71].



5.2. ábra. A $v^{(t)}(s)$ effektív potenciál (szaggatott piros) és az őt közelítő $v_{\text{osc}}(s)$ oszcillátor potenciál (folytonos kék) az s tömegközépponti koordináta függvényében, $c = 0.5$ és $\kappa = 1$ paraméterértékek esetén.

Az apertúra közepétől távolabb lineárisan közelítjük az \arctan függvényt, így (5.11)-ből egy másodfokú kifejezés adódik a transzmissziós potenciálra

$$v^{(t)}(s) \approx \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left(\frac{\kappa}{c}\right)^2 s^2. \quad (5.20)$$

Tehát a transzmissziós potenciál közelíthető egy harmonikus oszcillátor potenciáljával. Megjegyezzük továbbá, hogy ha $c \ll 1$, akkor $s_c \approx 1/\kappa$, így $s = s_c$ esetén az (5.20) kifejezés helyesen adja vissza a potenciál (5.17) alapján számolható v_c határoló értékét. Illesszünk tehát egy

$$v_{\text{osc}}(s) = v_0 + (v_c - v_0)(s/s_c)^2 \quad (5.21)$$

kvadratikus függvényt a $v^{(t)}(s)$ potenciálhoz. Ahogyan ezt az 5.2 ábrán is látjuk, $v^{(t)}(s)$ a kvadratikus közelítő potenciáltól csak $s = 0$ környezetében tér el, ahol az eredeti függvénynek törése is van. Ez azt jelenti, hogy a valódi potenciált egy

$$v_{\text{osc}}(s) = v_0 + \frac{1}{2} \omega_{\text{osc}}^2 s^2 \quad \text{ahol} \quad \omega_{\text{osc}} := \frac{\sqrt{2}}{s_c} \sqrt{v_c - v_0} \quad (5.22)$$

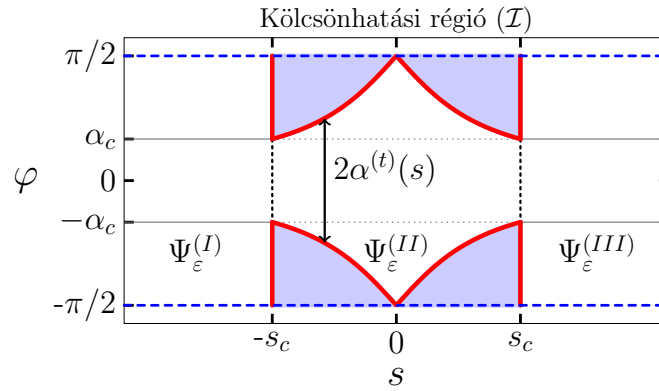
harmonikus oszcillátor potenciállal helyettesítjük, és a következőkben ennek a szórási feladatát oldjuk meg.

5.1.4. A szórási probléma megoldása

Ebben a szakaszban a 4.3.2. alszakaszban vázolt stacionárius szórási problémát a leg-egyszerűbb esetben fogjuk vizsgálni, amikor a balról beérkező részecskék nem forognak. A szórási problémát ekkor az egyes régiókban előírt energia-sajátfüggvények illesztésével oldjuk meg.

A balról beérkező részecskék nem forognak, vagyis a (4.35) formulában a bejövő hullámfüggvény

$$\Psi_{\varepsilon}^{\text{in}}(s, \varphi) = e^{ik_0 s} \phi_0(\varphi) = e^{ik_0 s} \frac{1}{\sqrt{\pi}}. \quad (5.23)$$



5.3. ábra. Az (I) -es és a (III) -as régiókban a rotor forgása szabad, míg a (II) -es régióban korlátozott. A (II) -es régió peremét a (4.17)-ben definiált $\alpha^{(t)}(s)$ függvény határozza meg. A szabad részen az (5.24) $\Psi_{\varepsilon}^{(I)}$ és az (5.25) $\Psi_{\varepsilon}^{(III)}$ megoldásokat tételezzük föl, amelyek bejövő és reflektált, illetve transzmitált sík hullámokból épülnek föl. Az (5.27) $\Psi_{\varepsilon}^{(II)}$ függvény írja le a megoldást a kölcsönhatási régióban, ahol a megengedett forgási szög korlátozott. A függvényeket az $s = \pm s_c$ határokon kell illeszteniünk (s_c definícióját lásd (4.16)-ban). Az ábrán a piros vonal mentén a hullámfüggvénynek el kell tűnnie, míg a szaggatott kék vonal emlékeztet a π szerinti periodicitásra.

További egyszerűsítésként a kölcsönhatási régióban csak az áthaladó rotorokkal foglalkozunk. A peremföltételek megfelelő módosításával elérjük, hogy a hullámfüggvény (4.19) fölbontásából csak a $\Psi_{\varepsilon}^{(t)}(s, \varphi)$ függvény játsszon szerepet. Ehhez megköveteljük, hogy $s = \pm s_c$ esetén a hullámfüggvény tűnjön el, ha $-\pi/2 < \varphi < -\alpha_c$ vagy $\alpha_c < \varphi < \pi/2$. Az 5.3 ábrán függőleges piros vonal jelöli ezt a módosítást. A peremföltételek ezen átszabása érdemben nem befolyásolja a transzmissziót, hiszen a visszavert részecskék valószínűségi árama nem jelenhet meg a jobb oldalon, ahogyan ezt a rájuk vonatkozó effektív potenciálok végtelen magassága is visszatükrözi.

Az I és III régiókban a szabad rotor megoldások olyan lineáris kombinációját kell vennünk, amely az (5.23) bejövő hullám stacionárius szórási problémáját írja le. Tehát az I -es régióban a hullámfüggvény egy egységnyi amplitúdójú balról érkező nem forgó módus és r_m valószínűségi amplitúdókkal jellemzett reflektált forgási módusok szuperpozíciójából

épül föl:

$$\Psi_\varepsilon^{(I)}(s, \varphi) := \sum_{m=-\infty}^{\infty} [\delta_{0m} e^{ik_m s} + r_m e^{-ik_m s}] \phi_m(\varphi). \quad (5.24)$$

A *III*-as régióban a transzmittált forgási módusok jelennek meg t_m relatív amplitúdókkal:

$$\Psi_\varepsilon^{(III)}(s, \varphi) := \sum_{m=-\infty}^{\infty} [t_m e^{ik_m s}] \phi_m(\varphi). \quad (5.25)$$

A szabad rotor különböző (4.27) forgási módusait indexelő m $-\infty$ -tól ∞ -ig fut, annak megfelelően, hogy a $2m_0 + 1$ darab haladó módus mellett, a kölcsönhatási régiótól távol exponenciálisan lecsengő megoldásokat is figyelembe vettük. Tehát a hullámfüggvény (5.24) és (5.25) alakja rendre teljesíti a (4.36) és a (4.37) aszimptotikus viselkedést, azaz

$$\Psi_\varepsilon^{(I)}(s, \varphi) \simeq \Psi_\varepsilon^L(s, \varphi) \quad \text{ha } s \ll -s_c \quad \text{és} \quad \Psi_\varepsilon^{(III)}(s, \varphi) \simeq \Psi_\varepsilon^R(s, \varphi) \quad \text{ha } s \gg s_c. \quad (5.26)$$

A megoldások illesztése szempontjából elengedhetetlen ezen nem oszcilláló megoldásfüggvények figyelembe vétele is, hiszen ezek teszik lehetővé, hogy a bejövő (5.23) síkhullám megoldást illesszük a csupán $-\alpha_c$ -tól α_c -ig elnyúló szinusz függvényekkel a *II*-es régió bal és jobb szélén.

Visszatérve az (5.2) kikötéshez – az analitikus közelítésének megfelelően – a keresett $\psi_n(s)$ függvényeket helyettesítjük az (5.9) független Schrödinger-egyenletek megoldásaival. Az egyes n -ekhez tartozó két lineárisan független megoldást jelölje a továbbiakban $f_n(s)$ és $g_n(s)$, így a hullámfüggvény a *II*-es régióban:

$$\Psi_\varepsilon^{(II)}(s, \varphi) = \sum_{n=1}^{\infty} [a_n f_n(s) + b_n g_n(s)] \chi_n[\varphi, \alpha(s)], \quad (5.27)$$

ahol a_n és b_n az illesztés során meghatározandó komplex együtthatók. Az (5.9)-ben szereplő effektív potenciál az s koordináta páros függvénye így választhatjuk a két lineárisan független megoldás közül az egyiket (f_n) párosnak, míg a másikat (g_n) páratlannak. Megjegyezzük továbbá, hogy az (5.9) Schrödinger-egyenletben – és így a hullámfüggvény (5.27) kifejezésében is – az ε értékét az (5.23) bejövő hullám energiája rögzíti.

Az $f_n(s)$ és $g_n(s)$ megoldásfüggvényeket elvben meghatározhatjuk az eredeti (5.11) effektív potenciál segítségével numerikusan. Az 5.1.3. alszakasz alapján azonban tudjuk, hogy a $v^{(t)}(s)$ függvény jól közelíthető harmonikus oszcillátor potenciállal. Az (5.9) Schrödinger-egyenlet a közelítő (5.20) oszcillátor potenciál esetén már analitikusan is megoldható. A végtelen sorként adódó megoldások például [76] alapján az alábbi módon adódnak.

Az eredeti (5.9) egyenletbe beírjuk az (5.22) közelítő oszcillátor potenciált

$$\left[\frac{d^2}{ds^2} + \varepsilon - n^2 \left(v_0 + \frac{1}{2} \omega^2 s^2 \right) \right] \psi_n(s) = 0, \quad (5.28)$$

majd az s helyett bevezetjük a ξ_n változót és definiálunk egy $K_n(\varepsilon)$ energiafüggő konstanst minden egyes n -re:

$$\xi_n := \frac{1}{\sqrt{2}} \omega n s; \quad K_n(\varepsilon) := \frac{\sqrt{2}(\varepsilon - n^2 v_0)}{\omega n}. \quad (5.29)$$

Így az egyenletet a [76]-ban megadott

$$\frac{d^2 \psi_n}{d\xi_n^2} = [\xi_n^2 - K_n(\varepsilon)] \psi_n(\xi_n), \quad (5.30)$$

alakra hozzuk, aminek alapján a páros és páratlan megoldásfüggvények:

$$f_n(s) = \left(\sum_{i=0}^{\infty} a_{2i}(\varepsilon, n) \xi_n^{2i} \right) e^{-\xi_n^2/2}, \quad g_n(s) = \left(\sum_{i=0}^{\infty} a_{2i+1}(\varepsilon, n) \xi_n^{2i+1} \right) e^{-\xi_n^2/2}. \quad (5.31)$$

Az (5.31) megoldásokban szereplő $a_j(\varepsilon, n)$ együtthatókat pedig az

$$a_{j+2}(\varepsilon, n) = \frac{(2j+1 - K_n(\varepsilon))}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (5.32)$$

rekurzív összefüggés határozza meg, amely alapján az egyes együtthatók explicite előállíthatók szorzatként:

$$a_{2i}(\varepsilon, n) = \frac{1}{(2i)!} \prod_{j=0}^{i-1} (4i-3 - K_n(\varepsilon) - 4j), \quad (5.33)$$

$$a_{2i+1}(\varepsilon, n) = \frac{1}{(2i+1)!} \prod_{j=0}^{i-1} (4i-1 - K_n(\varepsilon) - 4j). \quad (5.34)$$

Az $s = \pm s_c$ határon elvárjuk, hogy mind a hullámfüggvény mind pedig annak deriváltja folytonos legyen. Ez a megoldásillesztési föltétel az ismeretlen r_m , a_n , b_n , t_m mennyiségekre vonatkozó lineáris egyenletrendszerre vezet. Az egyenletrendszer részletes levezetését az 5.1.4. alszakaszban tárgyaljuk.

Az r_m és t_m együtthatók ismeretében a (4.38) transzmisszió és reflexió kiszámítható, amely nem forgó bejövő részecske esetén az alábbi módon egyszerűsödik

$$T(\varepsilon) = \frac{1}{k_0} \sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |t_m|^2 \quad \text{és} \quad R(\varepsilon) = \frac{1}{k_0} \sum_{m=-m_0}^{m_0} k_m |r_m|^2. \quad (5.35)$$

Itt csak a $2m_0 + 1$ haladó módot (4.31) kell figyelembe vennünk, hiszen csak ezek hoznak valószínűségi áramot.

A függvények illesztéséből kapott algebrai egyenletek

Ebben az alszakaszban részletesen levezetjük a megoldások illesztése során kapott r_m , a_n , b_n , t_m mennyiségekre vonatkozó lineáris egyenletrendszert. Ehhez a hullámfüggvény 5.1.4. alszakaszban vázolt alakját az (I) és (III) régiókban $e^{\pm i k_m s_c}$ relatív fázisfaktorokkal módosítjuk, ami annak felel meg, hogy (I)-ben és (III)-ben rendre s_c -vel balra, illetve jobbra eltolt koordináta-rendszert alkalmazunk:

$$\Psi_\varepsilon^{(I)}(s, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\delta_{0,m} e^{i k_m (s+s_c)} + r_m e^{-i k_m (s+s_c)} \right] \phi_m(\varphi), \quad (5.36)$$

$$\Psi_\varepsilon^{(II)}(s, \varphi) = \sum_{n=1}^{\infty} [a_n f_n(s) + b_n g_n(s)] \chi_n[\varphi, \alpha(s)], \quad (5.37)$$

$$\Psi_\varepsilon^{(III)}(s, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [t_m e^{i k_m (s-s_c)}] \phi_m(\varphi). \quad (5.38)$$

A (II)-es régió $s = \pm s_c$ határán folytonos mind a hullámfüggvény:

$$\begin{aligned} \Psi_\varepsilon^{(I)}(-s_c, \varphi) &= \Psi_\varepsilon^{(II)}(-s_c, \varphi) \\ \Psi_\varepsilon^{(II)}(s_c, \varphi) &= \Psi_\varepsilon^{(III)}(s_c, \varphi) \end{aligned} \quad -\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}, \quad (5.39)$$

mind pedig a hullámfüggvény s szerinti deriváltja

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial s} \Psi_\varepsilon^{(I)}(s, \varphi) \right|_{-s_c} &= \left. \frac{\partial}{\partial s} \Psi_\varepsilon^{(II)}(s, \varphi) \right|_{-s_c} \\ \left. \frac{\partial}{\partial s} \Psi_\varepsilon^{(II)}(s, \varphi) \right|_{s_c} &= \left. \frac{\partial}{\partial s} \Psi_\varepsilon^{(III)}(s, \varphi) \right|_{s_c} \end{aligned} \quad -\alpha_c \leq \varphi \leq \alpha_c. \quad (5.40)$$

Az (5.36) - (5.40) egyenletekből úgy kapunk algebrai kifejezéseket, hogy levetítjük őket a forgást leíró módusfüggvények terére. A hullámfüggvény folytonosságára vonatkozó (5.39) egyenletet a szabad forgás ϕ_m bázisfüggvényeire vetítve

$$\delta_{0m} + r_m = \sum_{n=1}^{\infty} c_{mn} [a_n f_n(s_c) - b_n g_n(s_c)], \quad (5.41)$$

$$t_m = \sum_{n=1}^{\infty} c_{mn} [a_n f_n(s_c) + b_n g_n(s_c)], \quad (5.42)$$

ahol kihasználtuk a $\phi_m(\varphi)$ függvények (4.28) ortonormáltságát. Továbbá bevezettük a szabad, és a határokon éppen $[-\alpha(\pm s_c), \alpha_c(\pm s_c)] = [-\alpha_c, \alpha_c]$ korlátok közé szorított rotor forgási állapotainak átfedését leíró

$$c_{mn} := \int_{-\alpha_c}^{\alpha_c} d\varphi \phi_m^*(\varphi) \chi_n[\varphi, \alpha_c] \quad (5.43)$$

mátrixelemeket, illetve kihasználtuk az f_n és g_n függvények paritási tulajdonságait

$$f_n(-s_c) = f_n(s_c), \quad g_n(-s_c) = -g_n(s_c). \quad (5.44)$$

A deriváltfüggvény folytonosságára vonatkozó (5.40) egyenletet esetén viszont a korlátozott forgású rotor χ_n bázisfüggvényeire vetítünk, hiszen a deriváltakat már csak a $[-\alpha_c, \alpha_c]$ szögablakban kell illeszteniük, így

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} d_{nm} [ik_0 \delta_{0m} - ik_m r_m] = -a_n f'_n(s_c) + b_n g'_n(s_c), \quad (5.45)$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} d_{nm} [ik_m t_m] = a_n f'_n(s_c) + b_n g'_n(s_c), \quad (5.46)$$

ahol a vessző az s szerinti deriválást jelöli. Az egyenletek fölírásakor kihasználtuk továbbá a $\chi_m[\varphi, \alpha(s)]$ függvények (5.6) ortonormáltságát és bevezettük a

$$d_{nm} := \int_{-\alpha_c}^{\alpha_c} d\varphi \chi_n^*[\varphi, \alpha_c] \phi_m(\varphi) \quad (5.47)$$

jelölést, illetve alkalmaztuk az f_n és g_n függvények paritási tulajdonságait a deriváltak esetére is:

$$f'_n(-s_c) = -f'_n(s_c), \quad g'_n(-s_c) = g'_n(s_c). \quad (5.48)$$

A d_{nm} és c_{mn} mátrixelemek kapcsolatba hozhatóak egymással, ehhez vegyük észre, hogy a $\phi_m(\varphi)$ függvények (4.27) definíciója alapján a komplex konjugált függvény átírható

$$\phi_m^*(\varphi) = \phi_{-m}(\varphi) \quad (5.49)$$

módon. A χ_m függvény pedig valós, ahonnan adódik a (5.43) és (5.47) integrálok alábbi kapcsolata:

$$d_{nm} = c_{-mn}. \quad (5.50)$$

Végül ϕ_n (4.27) és χ_m (5.3) definícióját behelyettesítve a c_{mn} integrál kiszámítható:

$$c_{mn} = 2\sqrt{\pi\alpha_c} e^{-2im\alpha_c} \frac{n[1 - (-1)^n e^{4im\alpha_c}]}{(4m\alpha_c)^2 - (n\pi)^2}. \quad (5.51)$$

Az illesztésből a megfelelő vetítések után maradt (5.41), (5.42), (5.45) és (5.46) egyenletekben az r_m , a_n , b_n és t_m ismeretleneken kívül minden adott. Hiszen a c_{mn} konstansok az (5.51) alapján, míg az f_n és g_n függvények, illetve deriváltjaik az s_c pontban az (5.31) alapján számolhatóak. Tehát az egyenleteinket rendezve az alábbi lineáris egyenletrendszer kapjuk az ismeretlen r_m , a_n , b_n és t_m mennyiségekre:

$$\delta_{0m} = -r_m + \sum_{n=1}^{\infty} c_{mn} f_n(s_c) a_n - \sum_{n=1}^{\infty} c_{mn} g_n(s_c) b_n, \quad (5.52)$$

$$0 = -t_m + \sum_{n=1}^{\infty} c_{mn} f_n(s_c) a_n + \sum_{n=1}^{\infty} c_{mn} g_n(s_c) b_n, \quad (5.53)$$

$$ik_0 c_{0n} = -f'_n(s_c) a_n + g'_n(s_c) b_n + \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_{-mn} ik_m r_m, \quad (5.54)$$

$$0 = f'_n(s_c) a_n + g'_n(s_c) b_n - \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_{-mn} ik_m t_m, \quad (5.55)$$

ahol $m = 0, \pm 1, \dots, \infty$ és $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$. A végtelen sok egyenletet a végtelen sok ismeretlenre egy alkalmasan választott ponton elvágjuk. Konkrétan az (I) és (III) régiókban meghagyunk $2m_0 + 1$ forgási módust miközben a (II)-es régióban is $n_0 = 2m_0 + 1$ módust használunk. Az így kapott $4 \times (2m_0 + 1)$ egyenlet, amely az egyenként $2m_0 + 1$ számú r_m , a_n , b_n és t_m ismeretlenekre vonatkozik, már numerikusan kezelhető. A folyamat során az egyenletrendszer méretét befolyásoló m_0 -át addig növeljük, amíg önkonzisztens nem lesz a kapott megoldás.

5.2. Az analitikus közelítés eredményei: alagutazás, csapdázódás és rezonanciák

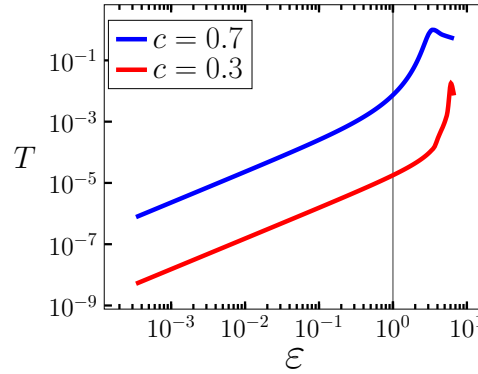
Ebben a szakaszban bemutatjuk a (4.15) energia-sajátérték egyenlet megoldását felhasználva az 5.1.2. alszakaszban levezetett közelítéseket. A kölcsönhatási régióban a transzlációs mozgást az (5.9) egydimenziós egyenletekkel közelítjük. A föllépő effektív potenciálhoz az (5.20) harmonikus oszcillátor potenciált illesztve, közelítő analitikus megoldást kapunk az energia-sajátfüggvényre a kölcsönhatási régióban is.

Annak ellenére, hogy számításaink erős közelítéseket tartalmaznak, alacsony energián megbízhatónak bizonyulnak. Erről a következő 6. fejezetben tárgyalandó numerikusan egzakt megoldással való összehasonlítás tanúskodik. Az alábbiakban az analitikus számítások eredményeit bemutató ábrákon összehasonlítóképpen ezen később részletezendő numerikusan kapott eredményeket is megjelentjük.

A kvantummechanika valószínűségi amplitúdóinak terjedése két olyan jellegzetességet mutat, amelyek a klasszikus részecske viselkedés szempontjából szokatlanok. Ez a két jellegzetesség az interferencia és az alagutazás. Mindkét jelenség megfigyelhető az itt bemutatott szórási probléma esetén. Az alábbiakban az effektív potenciálok segítségével az egyes jelenségeket megfigyelve három energia-tartományt különítünk el.

5.2.1. Az effektív potenciál minimuma alatti energiák: alagutazás

Nagyon alacsony energián, amikor $\varepsilon < v_0 = 1$, a részecske nem rendelkezik pozitív kinetikus energiával, azaz $\varepsilon - v^{(t)}(s) < 0$ bárhol az $|s| < s_c$ kölcsönhatási régióban. Így egy klasszikus részecske nem is fordulhatna elő ebben az energia-tartományban. A kvantummechanika azonban megengedi, hogy a részecskék átalagutazzanak a klasszikusan tiltott tartományokon. $\varepsilon < v_0 = 1$ energián az effektív potenciál egy $2s_c$ széles akadályt jelent, amely az energiát csökkentve sem változik. Ennek megfelelően exponenciálisan csökkenő alagutazási valószínűséget várhatunk az energia csökkenésével. Az 5.4. ábra mutatja, hogy $\kappa = 1$ és két kiválasztott $c = b/a$ (apertúra méret / rotorhossz) paraméterérték esetén valóban így viselkedik a transzmisszió az $\varepsilon \ll 1$ nagyon alacsony energián.

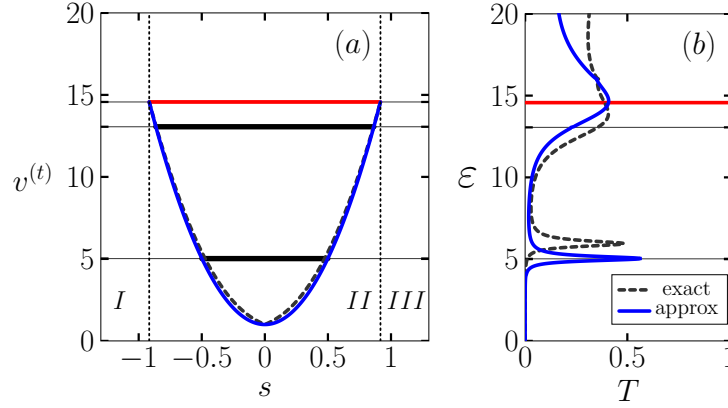


5.4. ábra. A T transzmisszió a bejövő nem forgó részecskék ε energiájának függvényében logaritmikus skálán ábrázolva. A grafikon igazolja az exponenciális energia függést, amelyet képletesen a $v^{(t)}(s)$ effektív potenciálon való átalagutazással értelmezhetünk. A paraméterek értéke $\kappa = 1$, $c = 0.7$ (fölső, kék görbe) és $c = 0.3$ (alsó, piros görbe).

5.2.2. Az effektív potenciálgáttal összemérhető energiák: csapdázódás és rezonanciák

Az effektív potenciál minimumánál nagyobb: $\varepsilon > v_0$ energiákon már klasszikusan is megengedett a mozgás, legalábbis a kölcsönhatási régió egy részén. Egy klasszikus részecske azonban visszaverődne az $s = \pm s_c$ határok irányában magasodó akadályokról.

A két akadályozó potenciálgát jelenléte olyan megoldásokat is megenged, amelyeknél a Fabry-Perot interferométerrel analóg módon a hullámfüggvény majdnem teljesen a gátak között koncentrálódik. A $v^{(t)}(s)$ transzmissziós potenciál megfelelő paraméterválasztás esetén eredményezheti a hullámfüggvény ilyen „bezáródását”. Elemi példaként gondolhatunk szabad részecskére, amelyet két különösen vékony potenciálgát közé zárunk: ekkor a hullámfüggvény gátak közötti lokalizációjának föltétele, hogy a félhullámok egész számú többszöröse éppen „beférjen” a falak közé.



5.5. ábra. (a) A $v^{(t)}$ effektív potenciál (szaggatott szürke vonal) és a közelítő v_{osc} potenciál (folytonos kék vonal) az s tömegközépponti koordináta függvényében. A vízszintes fekete vonalak (a gödör belsejében vastagabban húzva) mutatják az első két oszcillátor sajátállapot energiáját. A vízszintes piros vonal jelöli a potenciálgát v_c magasságát. (b) A T transzmisszió az érkező nem forgó részecskék bejövő ε energiájának függvényében. A vastag folytonos görbe az effektív oszcillátor potenciálok fölhasználásával készült, míg a szaggatott görbe a később részletezendő egzakt számítások eredménye. (Lásd a 6.1. szakaszban.) Az első két transzmissziós csúcs kapcsolatba hozható a fiktív oszcillátor első két sajátenergiájával. A paraméterek értéke $\kappa = 1$ és $c = 0.4$.

Ahhoz, hogy az energiák ezen „kvantálását” beazonosítsuk, idézzük föl az áthaladást leíró effektív potenciálhoz illesztett fiktív harmonikus oszcillátor (5.22) formuláját. Ezen modell-oszcillátor sajátenergiái a kvantummechanika szerint

$$\varepsilon_n = v_0 + \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_{\text{osc}}, \quad \text{ahol } n = 0, 1, 2, \dots, n_{\text{max}}. \quad (5.56)$$

Az n_{max} egész szám mutatja meg, hogy hány darab állapot fér a maximum v_c magasságú harmonikus potenciálba

$$n_{\text{max}} := \left\lfloor \sqrt{\frac{v_c - v_0}{2}} s_c - \frac{1}{2} \right\rfloor. \quad (5.57)$$

A $v^{(t)}(s)$ potenciál csak az $|s| < s_c$ régióban értelmezett, csak itt különbözik nullától, így a harmonikus közelítés csak ebben az intervallumban érvényes. A potenciál tehát csak a s_c -ben fölvevett $v_c := v^{(t)}(s_c)$ értékig nő. Ennél nagyobb energiákon egy klasszikus részecske már simán áthaladna az effektív potenciál képezte akadályon. Arra számítunk, hogy a

potenciálgát méretét jellemző v_c energiák alatt az oszcillátor sajátenergiái jó közelítést adnak a bejövő hullám azon energiáira, ahol a hullámfüggvény erős lokalizációt mutat a kölcsönhatási régióban (kvázi-kötött állapot), amit rezonancia kísér a transzmisszióban.

Az 5.5. ábra az $\varepsilon < v_c$ alacsony energiás esetet mutatja be $c = 0.4$ és $\kappa = 1$ paraméterválasztás esetén. Az (a) ábrán a $v^{(t)}(s)$ effektív potenciált és az azt közelítő oszcillátor potenciált ábrázoltuk, amelyek a határokon a $v_c = 14.57$ energiaértékig nyúlnak föl. A vízszintes fekete vonalak az illesztett harmonikus oszcillátor sajátenergiáit jelölik, amelyből jelen esetben kettő esik a v_c határoló érték alá. A (b) ábrán az effektív oszcillátor potenciállal számolt T transzmisszió látható nem forgó részecskék esetén. Az egzakt numerikus számítások eredményét szaggatott szürke vonallal ábrázoltuk [A5].

A (b) ábrán a két függvénygörbe jól egyezik, ami megerősíti a közelítő számítások helyességét, hiszen a közelítésből számolt és a numerikusan módszerrel kapott rezonáns energiák is közel esnek a fiktív oszcillátorpotenciál sajátenergiáihoz. Az egzakt számítások alapján az oszcillátor modellből adódóhoz képest kissé magasabb energiánál jelenik meg a transzmissziós csúcs. Ez a különbség abból adódhat, hogy a közelítésekben elkenjük a peremföltétel $s = 0$ ban bekövetkező törését és elhanyagoltuk az egyes módusok csatlódását. Besthle, Schleich és Wheeler interpretációjában [71] az ilyen sarkok másodlagos hullámokat keltenek, amelyek az eredeti hullámmal szuperpozíciót alkotva egy fázistolásként jelentkeznek a teljes hullámfüggvényen, aminek következtében az energia is eltolódik.

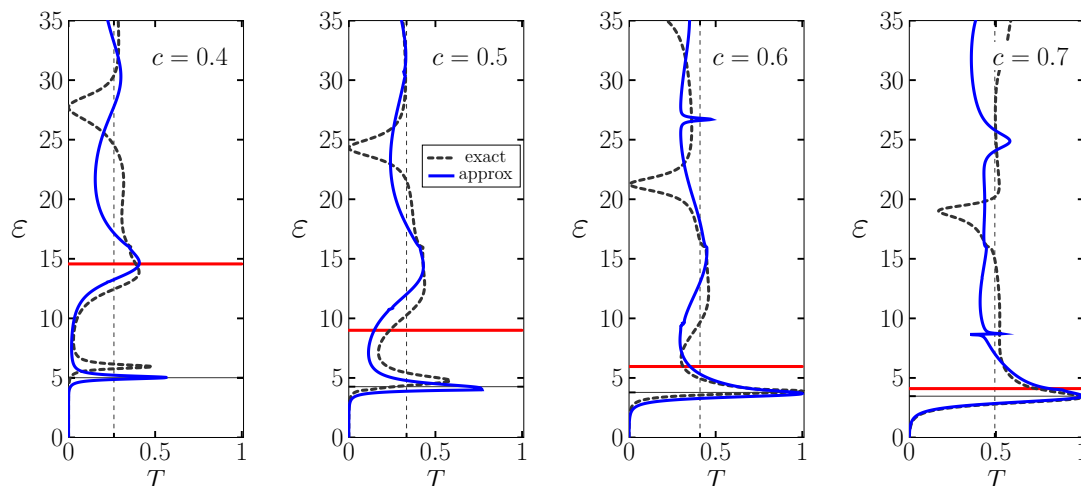
A hullámfüggvény explicite numerikus meghatározására is kiterjedő vizsgálataink (lásd 6. fejezet) igazolják, hogy a transzmisszióban mutatkozó csúcsoknál a hullámfüggvény a II -es régióba lokalizálódik: a részecske mintegy „csapdázódik” az apertúra mentén. Minél élesebb a transzmisszióban mutatkozó rezonáns csúcs, annál erősebben lokalizálódik a hullámfüggvény a kölcsönhatási régióra, azaz az apertúrán belülre.

5.2.3. Az effektív potenciálgát fölötti energiák: a rotor méret hatása

A $c := b/a$ apertúra méret per rotorhossz arány növekedésével az effektív potenciál magassága csökken, így kevesebb oszcillátor sajátállapot fér el az akadály v_c magassága alatt. Ennek következtében a rezonanciák kiszélesednek és elvesztik élességüket. Az 5.6. ábra ezt a folyamatot mutatja olyan c paraméterértékekre, amikor a potenciál már csak az oszcillátor alapállapotát képes megkötni.

Az 5.6 ábrán jól látszik, hogy az oszcillátor alapállapotának energiája, amit vékony vízszintes vonallal jeleztünk, illeszkedik a transzmissziós görbe maximumához. A közelítő számítás a c paraméter csökkenésekor föllépő tendenciákat is jól megragadja. Ekkor az effektív potenciál szélesedik és magasabbra szökik, ennek megfelelően a $T(\varepsilon)$ görbén mutatkozó maximumok élesednek. És az egzakt numerikus számításokból nyert eredménnyel összevetve, amelyet szürke szaggatott vonal mutat a háttérben, azt látjuk, hogy a c arány csökkenésével a valódi maximum helye kissé nagyobb energián mutatkozik.

A v_c energiaérték fölött, amelyet piros vízszintes vonallal jelöltünk az ábrákon, egy klasszikus részecske már szabadon mozoghatna, ennek megfelelően a modell oszcillátor alapján számolt (folytonos) görbe kevés struktúrát mutat. Az egzakt számítások (szaggatott görbék) azonban ezeken a magasabb energiákon jellegzetes transzmissziós minimumot mutatnak, amely c csökkenésével egyre magasabb energiákra tolódik.



5.6. ábra. A T transzmisszió a bejövő hullám ε energiájának függvényében $\kappa = 1$ és négy konkrét apertúra méret per rotorhossz arány esetén: $c = 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$. A kék görbe mutatja az analitikus közelítés eredményét, míg a szaggatott szürke görbe az egzakt numerikus számolását. A vékony vízszintes vonal az effektív oszcillátor potenciál alapállapot energiáját jelzi. A vastagabb vízszintes piros vonal a potenciálgát v_c tetejét jelöli, ami fölött az effektív potenciálnak már nincsenek kötött állapotai (lásd 5.5. ábra). A szaggatott függőleges vonal pedig a T^{cl} klasszikus átmeneti valószínűséget adja meg.

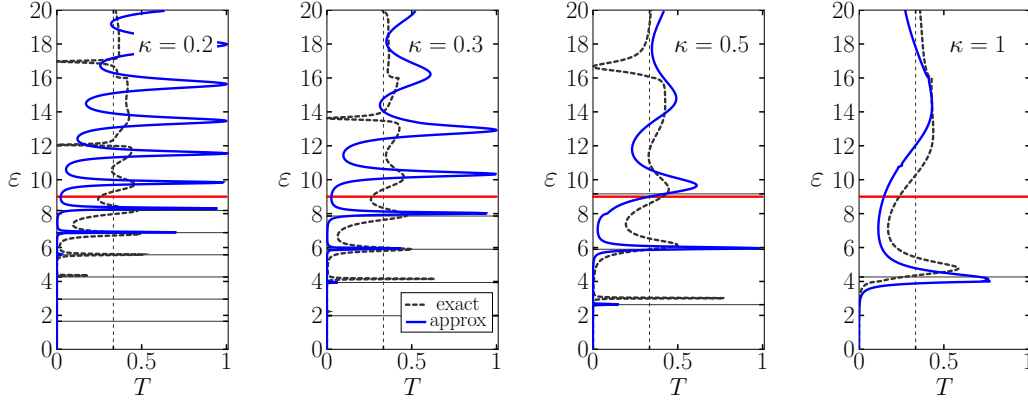
5.2.4. Az effektív potenciálgát fölötti energiák: a tömegeloszlás paraméter hatása

A kvantummechanikai szórásprobléma dinamikája egy második paramétert is behoz a szigorúan geometriai eredetű c apertúra méret per rotorhossz arány mellé. A κ paraméter (amely a kinetikus energia forgásra vonatkozó részében jelenik meg) a rotor össztömegének eloszlását jellemzi az objektum hossza mentén. (Az 5.16) formula alapján az áthaladást jellemző potenciálgát v_c magassága közvetlenül nem függ a κ -tól. Azonban a potenciálgát szélességét κ befolyásolja. Fix apertúra és rotor méret, azaz c esetén a κ csökkenése szélesíti a potenciált, ennek megfelelően több sajátenergia fér el az $\varepsilon \leq v_c$ tartományban. Így az ezekhez tartozó transzmissziós csúcsok szorosabban helyezkednek el és élesebbek a κ csökkenésével.

Az 5.7. ábra a transzmisszió energiafüggését mutatja a κ tömegeloszlás paraméter négy értékénél. A bal oldali grafikonokon föltűnő, hogy sok rezonancia csúcs szerepel messze a v_c magasságú potenciálgát energiája fölött, amelyet a piros vonal jelöltünk. Az egzakt számolások nem mutatnak ilyen éles transzmissziós csúcsokat, inkább simul a görbe és egy-egy jellegzetes minimumot mutat, amelyek κ csökkenésével egyre élesebbek. Ezt az eltérést azaz $\alpha'(s)$ és $\alpha''(s)$ deriváltak (5.7)-beli elhanyagolása okozza, aminek következtében az egyes módusokat szétcsatoltuk.

5.2.5. Az analitikus közelítés megbízhatósága

Az 5.6. ábra alapján a numerikusan egzakt eredményekkel összehasonlítva látjuk, hogy az effektív oszcillátor potenciál jó közelítéssel leírja az alacsony energiás viselkedést, és jól



5.7. ábra. A T transzmisszió a bejövő hullám ε energiájának függvényében. $c = b/a = 0.5$ apertúra méret per rotorhossz arány és $\kappa = 0.2, 0.3, 0.5, 1.0$ tömegeloszlás paraméterek esetén. A vastagabb vízszintes piros vonal a potenciálgát v_c tetejét jelöli, ami fölött az effektív potenciálnak már nincsenek kötött állapotai. κ csökkenésével, fix c mellett, a potenciál szélessége növekszik, ami a rezonancia csúcsok szorosabbá válását eredményezi. A potenciálgát szélesedésével növekszik az alatta elterülő terület, ennek megfelelően a csúcsok magassága csökken. A szaggatott függőleges vonal pedig a T^{cl} (4.9) klasszikus átmeneti valószínűséget adja meg, amely κ -tól független.

megjósolja a lehetséges rezonáns energiákat. Nagyobb energiákon azonban nyilvánvalóvá válnak a közelítés hiányosságai. Az egzakt eredményekben jellegzetesen megjelenő teljes visszaverődést már nem látjuk a közelítésből kapott görbéken.

Az 5.7 ábrán az analitikus közelítésből kapott görbe alacsony energiákon jól behatárolja a transzmisszióban jelentkező csúcsok helyét, de a κ érték csökkenésével elveszíti az információt azok erősségéről, és a transzmisszió pontos értékét már nem adja vissza. Ez a különbség a csatolások elhanyagolásából adódik. Magasabb energián pedig olyan éles rezonanciák is megjelennek, amelyek az egzakt megoldásban nem mutatkoznak.

5.3. Összefoglalás

Ebben a fejezetben egy apertúrán áthaladó forgó molekula modell (rotor) szóródását vizsgáltuk analitikus módszerekkel. Arra az érdekes esetre koncentráltunk, amikor a rotor karakterisztikus hossza meghaladja a rés méretét. A kölcsönhatási régióban a merev forgásként föltételezett belső struktúra és az apertúra kölcsönhatását a hullámfüggvényre kirótt – a klasszikus kényszerekből eredeztetett – peremföltételekkel vettük figyelembe. A peremföltételeket kielégítő kikötésből kiindulva a tömegközéppont mozgását leíró módusfüggvényekre bonyolult csatolt differenciálegyenlet-rendszert kaptunk. Alacsony energián a peremföltétel változását „elsimítva”, ezeket egydimenziós egyenletek (5.9) független rendszerére redukáltuk. A teljes hullámfüggvényre kirótt peremföltételek pedig átalakultak a haladó módusokra vonatkozó effektív potenciálokká. Az áthaladó rotor módusokra vonatkozó effektív potenciál a kölcsönhatási régió két szélén maximális, miközben az apertúra közepének megfelelő koordinátánál minimuma van. A potenciál ilyen kettős gát szerű alakja lehetővé teszi, hogy a bejövő energia függvényében a transzmisszióban rezonanci-

ák jelenjenek meg. Ezeknél a rezonanciáknál a hullámfüggvény a kölcsönhatási régióban koncentrálódik, azaz a rotor csapdázódik az apertúrában.

A további fizikai konklúziókat a következő fejezet végén foglaljuk össze (lásd 6.5. szakasz).

6. fejezet

Apertúrán áthaladó forgó molekula modellje: Numerikusan egzakt megoldás

Ebben a fejezetben ugyanazt a feladatot vizsgáljuk mint az előző 5. fejezetben, azaz az apertúrán áthaladó forgó objektum (rotor) kvantummechanikai problémáját, abban az érdekes esetben, amikor a rotor mérete összemérhető az apertúra nagyságával. Az előző fejezettel szemben a szórásprobléma megoldását itt az S-mátrixszal és a bonyolult peremföltételnek megfelelő Green-függvénnyel fogalmazzuk meg. Ezt a módszert magfizikai szórásproblémáknál, illetve a szilárdtestfizikában újabban a kvantumos transzportjelenségeknél szokás alkalmazni [77, 78, 79, 80]. A mi vizsgálataink úttörők abban a tekintetben, hogy ezt a módszert az általunk vizsgált atom, illetve molekulafizikai problémánál is sikerrel alkalmaztuk [A5]. A jelzett bonyolult peremföltétel miatt eljárásunk során a feladathoz tartozó Green-függvény és így az abból megkapható minden lényeges fizikai mennyiség és információ is csak numerikus módszerrel határozható meg. Ehhez a feladatot egy diszkrét rácsra fogalmazzuk át, így az elvben egzakt megoldást csak a diszkrétizálásból fakadó numerikus pontatlanság korlátozza. Ebben az értelemben szokás ezt a módszert numerikusan egzaktnak nevezni, ami egyben arra is utal, hogy a numerikus eljárásból származó hiba a rács finomításával csökkenthető.

A következőkben először bevezetjük a problémához tartozó Green-függvényt, majd a feladat térbeli particionálásával az eredetileg végtelen távolban megadott határföltételek miatt végtelen méretű problémát a szórási tartomány véges méretére redukáljuk. A Green-függvény segítségével ezután megadjuk a szórásprobléma megoldását nyújtó S-mátrixot. Ezen túlmenően azonban a Green-függvény alkalmas a spektrálproblémához tartozó állapotssűrűség, továbbá a lokális állapotssűrűség és a föllépő rezonanciák élettartamának meghatározására is, ezt is ismertetjük röviden. A teljesség kedvéért a fejezet végén található Függelékben mellékeljük a szükséges részletszámításokat.

A numerikus módszer néhány sajátosságának megvilágítása után rátérünk az eredmények részletes elemzésére. Ennek során megmutatjuk, hogy az itt alkalmazott numerikusan egzakt eljárás alacsony energián kvantitatíve is visszaadja az előző fejezetben analitikus módszerrel megkapott transzmissziós valószínűségeket és a föllépő rezonanciákat. A numerikus számítások eredményei ezen túlmenően kiterjesztik az analitikus módszerrel vizs-

gálható energiatartományt és egyúttal rámutatnak annak korlátaira is.

6.1. A probléma térbeli particionálása, peremföltételek, a Green-függvény és az S-mátrix

Feladatunk lényege ismét a (4.15) sajátértékprobléma vizsgálata a (4.19) peremföltételek kikötésével. A 6.1 ábrán a peremföltételeket újra fölrajzoltuk, de az előző fejezetben az 5.3 ábrán elkülönített I, II, III régiók helyett, itt egy más fölosztást fogunk használni. A nehézséget – ahogyan azt már az előző 5. fejezetben láttuk – az \mathcal{I} kölcsönhatási régió belül található bonyolult alakú peremföltétel okozza (lásd 4.3.1. alszakasz). Ezen föltétel hatására az s tömegközépponti koordináta és a φ forgási szög megengedett értékei egymástól függenek. Ez a „nem szeparálhatóság” akadályozza meg a pontos analitikus számításokat, jóllehet nem forgó bejövő hullám esetén, alacsony energián, analitikusan közelíthető a probléma (lásd előző 5.1. szakasz).

A numerikus eljárás alkalmazásához az \mathcal{I} kölcsönhatási régiót most egy annál nagyobb méretű \mathcal{B} „dobozba” zárjuk, a rotor ettől a \mathcal{B} -től balra lévő L tartományból érkezik, és oda verődik vissza, míg a transzmisszió során a tőle jobbra található R tartományba szóródik. Tehát a \mathcal{B} Doboz méretét úgy választjuk meg, hogy a bal és jobb peremén már csak a haladó hullám megoldások jelenjenek meg. A haladó módusoknak ezen a peremen szabadon kell ki- és belépniük, ez az ún. *nyílt vég* peremföltétel, amely analitikusan figyelembe vehető és a számunkra érdekes véges tartomány ilyen módon leválasztható.

Ez a leválaszthatóság két dolgon múlik. Egyrészt a \mathcal{B} tartományon – a bejövő hullám ismeretében – a hullámfüggvényt a tartományra megszorított Green-függvény szolgáltatja. Ebből adódóan a be- és kiszóródó módusok kapcsolatát (S-mátrix) is a \mathcal{B} -re megszorított Green-függvény adja meg. Másrészt az eredeti Hamilton-operátorhoz ún. sajátenergiás korrekciót hozzá véve a leválasztott részekkel való kölcsönhatást egzaktul figyelembe lehet venni. Így a véges tartományra megszorított Green-függvény diszkrét rács reprezentációban numerikusan kiszámítható.

Ez a gondolat, hogy a Hilbert-teret „belső” és „külső” részekre bontjuk, majd levezetjük, hogy a „külső részek” milyen hatását gyakorolnak a „belső részekre” nagy múltra tekint vissza a kvantumfizika több területén is [77, 78, 79, 80].

6.1.1. A Green-függvény definíciója

Mint arra már a fejezet bevezetőjében is utaltunk, a szórásprobléma hatékonyan megoldható a kapcsolódó Green-függvény kiszámításának segítségével [81]. Így először tekintsük át röviden a Green-függvény definícióját. Koordináta-reprezentációban – definíció szerint – az alábbi differenciálegyenlet megoldása a keresett Green-függvény:

$$\left[\varepsilon + i\eta + \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] G_\varepsilon(s, \varphi; s', \varphi') = \delta(s - s')\delta(\varphi - \varphi'). \quad (6.1)$$

Az infinitezimális η ($\eta \rightarrow 0^+$) biztosítja, hogy megoldásként a *retardált* Green-függvényt kapjuk, amely a \mathcal{I} kölcsönhatási régiótól távol már csak kimenő hullámokat tartalmaz.

Azaz η biztosítja, hogy a fizikailag elfogadható (4.36) és (4.37) peremföltételek öröklődjenek a Green-függvényre. A G_ε Green-függvény természetesen függ az ε dimenziótlanított energiától, amely függést az alsó indexszel külön is hangsúlyozzuk. A fönti formula alapján a G_ε mennyiséget fizikailag egy általánosított S-mátrixként is értelmezhetjük [82], hiszen éppen azt adja meg, hogy a rendszerünk miként reagál valamely \mathbf{r} pontban egy \mathbf{r}' pontbeli „gerjesztés” hatására.

A kvantummechanika absztrakt Hilbert teres leírásában a Green-függvényt definiáló (6.1) egyenlet egy operátor egyenletté alakul

$$[(\varepsilon + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}] \mathbf{G}(\varepsilon) = \mathbb{1}, \quad (6.2)$$

ahol \mathbf{H} a probléma Hamilton-operátora. Ez az alak azt fejezi ki, hogy $\mathbf{G}(\varepsilon)$ az energia mínusz a Hamilton-operátor inverze. Persze ez az operátor inverz körültekintően kezelendő, hiszen az $[\varepsilon\mathbb{1} - \mathbf{H}]$ operátor szinguláris a \mathbf{H} sajátértékeinél.

Ezen a ponton érdemes még megjegyeznünk, hogy ha \mathbf{H} sajátfüggvényeit ismerjük, akkor $\mathbf{G}(\varepsilon)$ formálisan kifejezhető a sajátfüggvények segítségével. Tehát ha

$$\mathbf{H} |\Psi_\mu\rangle = \varepsilon_\mu |\Psi_\mu\rangle, \quad \text{akkor} \quad \mathbf{G}(\varepsilon) = \sum_\mu \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_\mu + i\eta} |\Psi_\mu\rangle\langle\Psi_\mu|, \quad (6.3)$$

ahol az μ index akár folytonos is lehet, ekkor a szumma értelemszerűen integrálként értelendő.

6.1.2. A rendszer particionálása és a probléma végeessé tétele

Jelen problémában a nehézséget az \mathcal{I} kölcsönhatási régió belül található bonyolult alakú peremföltétel okozza (lásd 4.3.1. alszakasz). A peremföltételt definiáló függvényt a (4.17) formula adja meg, a konkrét peremföltételeket a 6.1 ábrán ismét fölvezeltük.

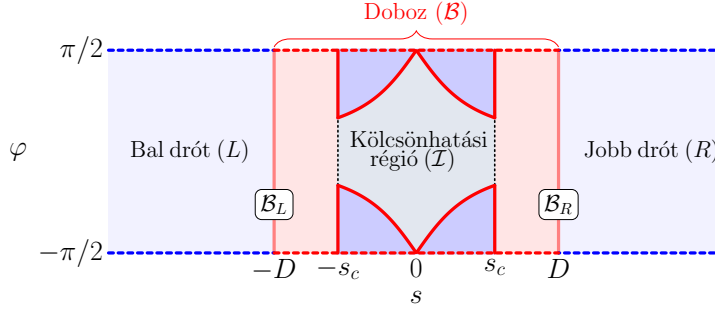
Az analitikus számolást lehetővé tévő egyszerűsítések helyett írjuk föl a Hamilton-operátort diszkrét rács reprezentációban. Ekkor a bonyolult peremföltételeket természetes módon figyelembe tudjuk venni: csak oda veszünk föl rácpontokat, ahol a hullámfüggvény nem tűnik el. Diszkrét reprezentációban a (6.2) definiáló egyenlet egy mátrixokra vonatkozó lineáris összefüggéssé alakul, így az ismeretlen $\mathbf{G}(\varepsilon)$ elvben mátrixinvertálással megkapható.

A vizsgált probléma a φ változóban periodikus, de s -ben végtelen intervallumot fed le, így a teljes szórási probléma diszkrét reprezentációja végtelen dimenziós. Önmagában tehát a diszkrét reprezentáció nem orvosolja a nehézségeket, bár a peremföltételt természetes módon kezeli.

A feladatot úgy tesszük végeessé, hogy a reprezentáló koordináta teret – azaz a probléma geometriáját – és így a neki megfelelő Hilbert-teret is körültekintően particionáljuk. Ezt a „Bal drót + Doboz + Jobb drót” fölbontást szemlélteti a 6.1 ábra. Tehát a hullámfüggvények Hilbert terének olyan altereit vizsgáljuk, amelyeknek a geometriai fölosztásnak megfelelő tartományokon van a tartója. Ez formálisan az egységoperátor projektor fölbontását jelenti:

$$\mathbb{1} = |L\rangle\langle L| + |B\rangle\langle B| + |R\rangle\langle R|, \quad (6.4)$$

ahol az $|L\rangle\langle L|$, $|B\rangle\langle B|$ és $|R\rangle\langle R|$ projektorok rendre a Bal drót, Doboz és Jobb drót tartójú függvények alterére vetítenek. Mint a 4.4. szakaszban már kifejtettük a bal és jobb oldali



6.1. ábra. Az \mathcal{I} kölcsönhatási régiót egy \mathcal{B} téglalap alakú dobozzal vesszük körbe. A Doboz méretét úgy választjuk meg, hogy rajta kívül a $\Psi_\varepsilon(s, \varphi)$ hullámfüggvény már a szabad rotorra vonatkozó $\phi_m(\varphi)$ forgási módusok és a hozzájuk tartozó $e^{\pm i k_m s}$ síkhullámok szorzata legyen, és megfeleljen a (4.36) és (4.37) formulákkal megadott aszimptotikus peremföltételeknek. Célunk diszkrét rácsot használva numerikusan egzakt megoldást adni az egész szórási problémára, a Dobozra megszorított Green-függvényen keresztül.

szabad régiókra drótokként hivatkozunk, mert az egyik irányban a periodikus peremföltételek által jól meghatározott diszkrét megoldásfüggvényeink vannak.

A \mathcal{B} téglalap alakú dobozt, amely az \mathcal{I} kölcsönhatási régiót magába foglalja, úgy választjuk meg hogy a (\mathcal{B}_L) baloldali és (\mathcal{B}_R) jobboldali határok mentén még teljesüljenek a (4.36) és (4.37) föltételek, azaz a Doboz két oldalán *nyílt vég peremföltételt* veszünk. Ezután a Dobozra megszorított Green-függvényt számoljuk ki, a félvégtelen drótok Dobozra gyakorolt hatását teljes körűen figyelembe véve [82].

A dobozra megszorított Green-függvény

A (6.2) egyenletet levetítve a három tartományra (Bal drót, Doboz, Jobb drót) és formálisan kifejezve a $\mathbf{G}(\varepsilon)$ Green-függvény Dobozra megszorított $-\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon)$ -vel jelölt – partícióját (a következő 6.1.3. alszakaszban részletezett számítások alapján) az alábbi összefüggést kapjuk:

$$\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon) = [\varepsilon \mathbf{1} - \mathbf{H}^{BB} - \Sigma(\varepsilon)]^{-1}. \quad (6.5)$$

A félvégtelen L és R tartományok hatását a \mathbf{H}^{BB} Hamilton-operátorhoz hozzáveendő $\Sigma(\varepsilon)$ korrekció tartalmazza, amelyet angolul *self-energy*-nek szokás nevezni. Feshbach [77, 78] és mások munkáiban ez a korrekció mint egy nem hermitikus effektív potenciál jelenik meg.

Diszkrét rács reprezentációban a $\Sigma := \Sigma^L + \Sigma^R$ *nem hermitikus* járulék egzaktul kiszámítható:

$$\Sigma^{\mathcal{D}} := \tau^{\mathcal{D}} \mathbf{g}^{\mathcal{D}} (\tau^{\mathcal{D}})^{\dagger}, \quad \mathcal{D} \in \{L, R\}, \quad (6.6)$$

ahol $\tau^{\mathcal{D}}$ tartalmazza a drótok és a Doboz csatolását (6.39), $\mathbf{g}^{\mathcal{D}}$ pedig a félvégtelen drótok analitikusan kiszámítható (6.85) Green-függvénye.

6.1.3. A Green-függvény megszorítása véges régióra: Sajátenergiás korrekciók

Ebben a szakaszban részletesen levezetjük a Dobozra megszorított Green-függvény (6.5) alakját és elmagyarázzuk a $\Sigma(\varepsilon)$ sajátenergiás korrekció eredetét. A (6.4) projektor fölbontást beillesztve a Green-függvény (6.2) absztrakt definíciójába és az egyenletet $|B\rangle$ -vel balról szorozva, kapjuk, hogy

$$[(\varepsilon + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}] \{ |L\rangle\langle L| + |B\rangle\langle B| + |R\rangle\langle R| \} \mathbf{G}(\varepsilon) |B\rangle = \mathbb{1} |B\rangle. \quad (6.7)$$

A fönti operátor egyenletet rendre levetítve a három tartományra az alábbi egyenletrendszert kapjuk:

$$[(\varepsilon + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}^{LL}] \mathbf{G}^{LB} + (\boldsymbol{\tau}^L)^\dagger \mathbf{G}^{BB} = \mathbf{0}, \quad (6.8)$$

$$\boldsymbol{\tau}^L \mathbf{G}^{LB} + [(\varepsilon + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}^{BB}] \mathbf{G}^{BB} + \boldsymbol{\tau}^R \mathbf{G}^{RB} = \mathbb{1}, \quad (6.9)$$

$$(\boldsymbol{\tau}^R)^\dagger \mathbf{G}^{BB} + [(\varepsilon + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}^{RR}] \mathbf{G}^{RB} = \mathbf{0}, \quad (6.10)$$

Itt bevezettük a

$$\boldsymbol{\tau}^L := -\mathbf{H}^{BL} = -(\mathbf{H}^{LB})^\dagger, \quad \boldsymbol{\tau}^R := -\mathbf{H}^{BR} = -(\mathbf{H}^{RB})^\dagger, \quad (6.11)$$

jelölést a belső \mathcal{B} régió és a külső félvégtelen drótok közötti csatolásra és kihasználtuk \mathbf{H} önadjungáltságát. A diszkretizálás során ezeket a csatolásokat az *első szomszéd* kapcsolat határozza meg (Lásd a (6.39) formulát.) [83]. Kihasználtuk továbbá, hogy a Bal és Jobb drótok csak a Dobozon keresztül vannak összeköttetésben, és nem kapcsolódnak közvetlenül egymáshoz, így

$$\mathbf{H}^{LR} = \mathbf{H}^{RL} = \mathbf{0}. \quad (6.12)$$

A (6.8) és (6.10) egyenletek segítségével kifejezzük az \mathbf{G}^{LB} és \mathbf{G}^{RB} operátorokat:

$$\mathbf{G}^{LB} = -[(\varepsilon + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}^{LL}]^{-1} (\boldsymbol{\tau}^L)^\dagger \mathbf{G}^{BB} = -\mathbf{g}^L (\boldsymbol{\tau}^L)^\dagger \mathbf{G}^{BB}, \quad (6.13)$$

$$\mathbf{G}^{RB} = -[(\varepsilon + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}^{RR}]^{-1} (\boldsymbol{\tau}^R)^\dagger \mathbf{G}^{BB} = -\mathbf{g}^R (\boldsymbol{\tau}^R)^\dagger \mathbf{G}^{BB}. \quad (6.14)$$

A második egyenlőségjel után beazonosítottuk az *izolált félvégtelen drótok* Green-függvényét:

$$\mathbf{g}^{\mathcal{D}}(\varepsilon) := [(\varepsilon + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}^{\mathcal{D}\mathcal{D}}]^{-1}, \quad \text{ahol} \quad \mathcal{D} \in \{L, R\}. \quad (6.15)$$

Behelyettesítve a föntebbi (6.13) és (6.14) kifejezéseket a (6.9) egyenletbe, majd \mathbf{G}^{BB} -t kiemelve kapjuk, hogy

$$[(\varepsilon + i\eta)\mathbb{1} - \mathbf{H}^{BB} - \boldsymbol{\tau}^L \mathbf{g}^L (\boldsymbol{\tau}^L)^\dagger - \boldsymbol{\tau}^R \mathbf{g}^R (\boldsymbol{\tau}^R)^\dagger] \mathbf{G}^{BB} = \mathbb{1}. \quad (6.16)$$

Tehát a Dobozra megszorított Green-függvény:

$$\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon) = [\varepsilon\mathbb{1} - \mathbf{H}^{BB} - \Sigma(\varepsilon)]^{-1}, \quad (6.17)$$

ahol a $\Sigma := \Sigma^L + \Sigma^R$ tagot sajátenergiás (self-energy) korrekciónak szokás nevezni [82, 83]. Ezen $\Sigma^{\mathcal{D}}$ tagok definíciója tehát a (6.16) alapján

$$\Sigma^{\mathcal{D}} := \boldsymbol{\tau}^{\mathcal{D}} \mathbf{g}^{\mathcal{D}} (\boldsymbol{\tau}^{\mathcal{D}})^\dagger. \quad (6.18)$$

Ez az eredmény egy a mi problémánknál általánosabb feladatoknál is használható: ha csak valamely „belső” régióra megszorított mennyiségekre vagyunk kíváncsiak, és ismerjük a „külső” régióhoz való csatolódást (τ^D), akkor az utóbbi hatását egzaktul figyelembe tudjuk venni Σ^D típusú sajátenergiás tagok segítségével [82, 84].

A hátralévő feladat tehát $\Sigma^D(\varepsilon)$ kiszámítása ebben a konkrét esetben. Ehhez szükségünk van a (6.15)-ben definiált izolált félvégtelen drót $\mathbf{g}^D(\varepsilon)$ Green-függvényére. A teljesség kedvéért a [82] könyvben feladatként megfogalmazott és főbb pontjaiban ismertetett levezetést a következő 6.6.3. alszakaszban részletesen is leírjuk. Ez a levezetés a (6.3) energia-sajátfüggvények szerinti kifejtésen alapul és az abban föllépő integrált kontúrintegrálos technikával értékeli ki.

Itt csak a korrekciók kiszámításához nélkülözhetetlen végeredményt közöljük dimenziótlantított mennyiségeket használva:

$$g_\varepsilon^D(s, \varphi; s, \varphi') = - \sum_{m=-m_0}^{m_0} \frac{2 \sin(k_m s)}{v_m} \phi_m(\varphi) \phi_m^*(\varphi') e^{ik_m s}. \quad (6.19)$$

ahol a diszperziós reláció alapján a dimenziótlantított sebesség $v_m = \partial\varepsilon/\partial k_m = 2k_m$. Megjegyezzük, hogy a Függelékben levezetett (6.85) formulához képest megjelenő a 2-es faktor a választott (4.12) energiaegység következménye, amit a diszperziós reláción keresztül bevezetett v_m sebesség jól lekövet.

6.1.4. A Green-függvény és a szórási probléma kapcsolata

Ebben a szakaszban megvizsgáljuk, hogy a probléma Green-függvényének ismeretében, hogyan tudjuk kiszámítani a bejövő hullám hatására kialakuló hullámfüggvényt a \mathcal{B} Dobozban. Ez arra is választ ad, hogy miképpen lehet összekapcsolni a bal és jobb oldali szabad régiókat az S-mátrixon keresztül. A levezetett formulák alapján látjuk, hogy valóban elegendő a Dobozra megszorított Green-függvény ismerete.

A Dobozra megszorított energia-sajátfüggvény

Ezen a ponton a hullámfüggvény explicite meghatározását átugorva közvetlenül továbbléphetnénk az S-mátrix kiszámítására, ahogyan azt ezen módszer leírása során általában tenni szokták. Minket azonban a \mathcal{B} Dobozra megszorított energia-sajátfüggvények konkrét alakja is érdekel, amit majd a Green-függvény és az általánosított Green-féle azonosság segítségével határozhatunk meg. Az azonosságból adódó (6.56) integrál kiszámításához figyelembe vesszük a (4.35) bejövő hullámot és a szórási probléma $\mathbf{G}(\varepsilon)$ Green-függvényét, továbbá kihasználjuk, hogy Ψ_ε a \mathcal{B}_L és \mathcal{B}_R határokon a *nyílt vég peremföltételének* engedelmeskedik, ami $\mathbf{G}(\varepsilon)$ -re is öröklődik [85]. A 6.6.2. alszakaszban részletezett számolás alapján a dobozra megszorított hullámfüggvény koordináta-reprezentációban

$$\Psi_\varepsilon^B(s, \varphi) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi' G_\varepsilon(s, \varphi; -D, \varphi') \left[\sum_{m=-m_0}^{m_0} 2ik_m c_m \phi_m(\varphi') \right], \quad \text{ahol } s \in \mathcal{B}. \quad (6.20)$$

Az előző kifejezés tömörebben is fölírható, ha kihasználjuk, hogy a (4.27) formulával meghatározott $\phi_m(\varphi)$ transzverzális módusfüggvények teljes ortonormált rendszert alkotnak a

$[-\pi/2, \pi/2]$ intervallumon periodikus határföltétel mellett értelmezett függvények terén. Segítségükkel a hullámfüggvényt az $|s, \phi_n\rangle$ bázison is reprezentálhatjuk, így

$$\langle s, \phi_n | \Psi_\varepsilon \rangle = \sum_{m=-m_0}^{m_0} \langle s, \phi_n | \mathbf{G}(\varepsilon) | \mathcal{B}_L, \phi_m \rangle 2ik_m c_m, \quad \text{ahol } s \in \mathcal{B}. \quad (6.21)$$

Ezen a ponton szeretnénk hangsúlyozni, hogy a (6.20) egzakt, mentes mindenféle végtelen összegzéstől vagy közelítéstől, és tényleges kiértékeléséhez $\mathbf{G}(\varepsilon)$ -t csak a véges \mathcal{B} tartományon kell ismernünk, azaz a Dobozra megszorított $\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon)$ Green-függvény ismerete is elegendő. Megjegyezzük, hogy Ψ_ε kifejezhető formálisan Lippmann-Schwinger [86] típusú egyenletekkel is az egész kétdimenziós síkon [83].

Szórási mátrix a Green-függvény segítségével

Olyan gerjesztéseket véve amikor a bejövő hullám balról érkezik az S-mátrix elemeit közvetlen módon kapcsolatba hozhatjuk a \mathcal{B} Doboz bal (\mathcal{B}_L) és jobb (\mathcal{B}_R) határain kiértékelt Green-függvénnyel. Ehhez először bevezetjük a

$$G_\varepsilon^{qp}(\varphi; \varphi') := \langle \mathcal{B}_q, \varphi | \mathbf{G}(\varepsilon) | \mathcal{B}_p, \varphi' \rangle, \quad (6.22)$$

jelölést, ahol a G_ε -n szereplő q és p index az egyes oldalaknak megfelelően L és R lehet. A keresett összefüggés az \mathbf{S} mátrix blokkjai és az azoknak megfelelő határokon vett $\mathbf{G}(\varepsilon)$ között koordináta-reprezentációban:

$$S_{nm}^{qp} = -\delta_{qp}\delta_{nm} + i2k_m \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi' \phi_n^*(\varphi') G_\varepsilon^{qp}(\varphi'; \varphi) \phi_m(\varphi). \quad (6.23)$$

Ami az $|s, \phi_n\rangle$ bázist használva ismét tömörebben írható

$$S_{nm}^{qp} = -\delta_{qp}\delta_{nm} + i2k_m \langle \mathcal{B}_q, \phi_n | \mathbf{G}(\varepsilon) | \mathcal{B}_p, \phi_m \rangle, \quad p, q \in \{L, R\}. \quad (6.24)$$

Ezt az összefüggést az irodalomban *Fisher-Lee reláció*nak is szokás hívni [87, 82]. A teljesség kedvéért a 6.6.2. alszakaszban bemutatunk egy alternatív levezetést a (6.23) összefüggésre, amely a Dobozra megszorított hullámfüggvényen keresztül adja meg az S-mátrixot.

6.2. A releváns fizikai tulajdonságok származtatása a Green-függvény segítségével

A $\Sigma(\varepsilon)$ sajátenergiás korrekció az izolált Doboz diszkrét energiaspektrumát folytonossá teszi miközben a sajátállapotok rezonáns állapotokká válnak [83]. Egy ilyen *folytonos energiaspektrum* jellemzőit, például a hosszú élettartamú rezonáns állapotokat, a spektrális függvény és az abból kinyerhető állapotsűrűség (DOS), illetve helyi állapotsűrűség (LDOS) tartalmazza. Az alábbiakban röviden bemutatjuk, hogy a hullámfüggvény ismerete nélkül ezeket a mennyiségeket közvetlenül a Green-függvényből is megkaphatjuk.

6.2.1. Élettartam

Ha szeretnénk jól megérteni a szórásprobléma Green-függvényen alapuló kezelésének fizikai tartalmát, érdemes visszatérnünk egy pillanatra a Dobozra megszorított energia-sajátérték problémához, amelyben a (6.5) formula effektív Hamilton-operátora határozza meg a sajátfüggvényeket:

$$\left[\mathbf{H}^{BB} + \mathbf{\Sigma}(\varepsilon) \right] \left| \Psi_\mu^B \right\rangle = \varepsilon_\mu \left| \Psi_\mu^B \right\rangle. \quad (6.25)$$

Ez az egyenlet az izolált problémához képest tartalmazza a $\mathbf{\Sigma}(\varepsilon)$ *sajátenergiás korrekciónak* nevezett tagot, amely maga is függ a keresett energiától. A sajátérték problémát így megoldani nem tudjuk, de értelmezhetjük – az izolált problémával összehasonlítva – a $\mathbf{\Sigma}(\varepsilon)$ *nem-hermitikus* korrekció kettős hatását. Egyrészt $\mathbf{\Sigma}(\varepsilon)$ hermitikus része egyszerűen eltolja az izolált probléma $\varepsilon_{\mu,0}$ sajátenergiáit, az anti-hermitikus rész viszont behoz egy képzetes járulékot az energiához, melynek eredményeként ε_μ -re komplex értékeket kapunk:

$$\varepsilon_\mu = \varepsilon_{\mu,0} - \Delta_\mu - i(\gamma_\mu/2). \quad (6.26)$$

Az $i(\gamma_\mu/2)$ képzetes rész felelős azért, hogy az $e^{-i\varepsilon_\mu t}$ -vel adott időfejlődés során a hullám-függvény abszolút értékének négyzete „elszivárog” a Dobozból. Ebben az értelemben az $1/\gamma_\mu$ mennyiség a $\left| \Psi_\mu^B \right\rangle$ állapot *élettartamát* adja meg.

6.2.2. Spektrális függvény

A (6.25) formális sajátérték probléma megoldásaira vonatkozó releváns fizikai tulajdonságokat a Doboz úgynevezett *spektrális függvényének* operátora tartalmazza, amelyet az alábbi módon definiálunk [88]

$$\mathbf{A}^{BB}(\varepsilon) := i \left[\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon) - (\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon))^\dagger \right] = -2 \operatorname{Im} \left[\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon) \right]. \quad (6.27)$$

A definíció tartalmának jobb megértéséhez – (6.25) jelöléseit fölhasználva – fejtsük ki formálisan a (6.3) formula szerint a Dobozra megszorított Green-függvényt:

$$\mathbf{G}^{BB}(\varepsilon) = \sum_\mu \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_\mu} \left| \Psi_\mu^B \right\rangle \left\langle \tilde{\Psi}_\mu^B \right|. \quad (6.28)$$

Ezt a kifejtést az (6.27) definícióba beírva és az ε_μ energiákat a (6.26) egyenlettel kirésztelve az alábbi – az absztrakt Hilbert-térben érvényes – összefüggést nyerjük:

$$\mathbf{A}^{BB}(\varepsilon) = \sum_\mu \left| \Psi_\mu^B \right\rangle \left\langle \tilde{\Psi}_\mu^B \right| \frac{\gamma_\mu}{(\varepsilon - \varepsilon_{\mu,0} + \Delta_\mu)^2 + (\gamma_\mu/2)^2}. \quad (6.29)$$

Felhívjuk azonban a figyelmet, hogy (6.3)-hoz képest a Dobozra megszorított esetben az effektív Hamilton-operátor nem hermitikus. Ennek megfelelően a $\left| \Psi_\mu^B \right\rangle$ sajátfüggvények nem alkotnak teljes ortonormált rendszert. Ezért kell az $\mathbf{A}^{BB}(\varepsilon)$ kifejtésében az adjungált $\left[\mathbf{H}^{BB} + \mathbf{\Sigma}^\dagger(\varepsilon) \right]$ Hamilton-operátor $\left\langle \tilde{\Psi}_\mu^B \right|$ -vel jelölt sajátfüggvényeit vennünk, amelyek a $\left| \Psi_\mu^B \right\rangle$ -vel ún. *bi-ortonormális rendszert* alkotnak ([82] 153 oldal), azaz

$$\left\langle \tilde{\Psi}_\mu^B \right| \left| \Psi_\nu^B \right\rangle = \delta_{\mu\nu}. \quad (6.30)$$

6.2.3. Állapotsűrűség (DOS)

A rendszer folytonos energia spektrumát az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ állapotosűrűség (density-of-states) jellemzi, amit az $\mathbf{A}^{BB}(\varepsilon)$ spektrális függvény átlós összege ad meg:

$$\mathcal{N}(\varepsilon) := \frac{1}{2\pi} \text{Tr} [\mathbf{A}^{BB}(\varepsilon)] = \frac{1}{2\pi} \int_B d\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | \mathbf{A}^{BB}(\varepsilon) | \mathbf{r} \rangle. \quad (6.31)$$

Az $\mathbf{A}^{BB}(\varepsilon)$ (6.29)-ben megadott alakja segít értelmezni a (6.31) definíciót, hiszen a (6.30) bi-ortogonalitási összefüggés segítségével az átlós összeg kiértékelhető és

$$\mathcal{N}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \sum_{\mu} \frac{\gamma_{\mu}/2}{(\varepsilon - \varepsilon_{\mu,0} + \Delta_{\mu})^2 + (\gamma_{\mu}/2)^2}. \quad (6.32)$$

Az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ függvény csúcsok egymásutánját mutatja az ε dimenziótlan energia függvényében, amelyek γ_{μ} kis értékeihez, azaz nagy élettartamú $|\Psi_{\mu}^B\rangle$ állapotokhoz tartoznak. Ezen csúcsok helyei adják meg azokat az energiákat, ahol rezonanciára számítunk a transzmisszió energiafüggésében. A végtelen nagy élettartamok határesetében az állapotosűrűség Dirac-delta függvények egymásutánjába megy át:

$$\lim_{\gamma_{\mu} \rightarrow 0} \mathcal{N}(\varepsilon) = \sum_{\mu} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mu,0} + \Delta_{\mu}), \quad (6.33)$$

ami megfelel az izolált probléma diszkrét „fésű szerű” energiaspektrumának.

6.2.4. Helyi állapotosűrűség (LDOS)

A *helyi* állapotosűrűség nagyobb betekintést ad az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ állapotosűrűség függvényben megjelenő csúcsok természetébe. Ezt az állapotfüggő függvényt úgy kapjuk, hogy a (6.27) spektrális függvényt koordináta-reprezentációban kiértékeljük a \mathcal{B} Dobozban választott diagonális \mathbf{r} pontokban

$$\rho_{\varepsilon}(\mathbf{r}) := \frac{1}{2\pi} \langle \mathbf{r} | \mathbf{A}^{BB}(\varepsilon) | \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{\mu} \Psi_{\mu}^B(\mathbf{r}) (\tilde{\Psi}_{\mu}^B(\mathbf{r}))^* \frac{\gamma_{\mu}}{(\varepsilon - \varepsilon_{\mu,0} + \Delta_{\mu})^2 + (\gamma_{\mu}/2)^2}. \quad (6.34)$$

A fenti kifejezés határértéke a végtelen élettartam határesetben

$$\lim_{\gamma_{\mu} \rightarrow 0} \rho_{\varepsilon}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} |\Psi_{\mu}^B(\mathbf{r})|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mu,0} + \Delta_{\mu}). \quad (6.35)$$

Ebben a határesetben a $\rho_{\varepsilon}(\mathbf{r})$ helyi állapotosűrűség megadja a rezonáns állapotok valószínűségi sűrűségének térbeli eloszlását.

6.3. Diszkrét rács reprezentáció

Diszkrét rács reprezentációt használva a szokatlan alakú peremföltételt – mint például ami az 5.3 ábrán szerepel – természetes módon figyelembe tudjuk venni. Egyszerűen nem teszünk rácpontot oda, ahol a peremföltételek miatt a hullámfüggvénynek el kell tűnnie. Az L és R félvégtelen drótok és a \mathcal{B} Doboz közötti τ^D csatolást is könnyen ki tudjuk fejezni,

ha a Hamilton-operátor diszkretizálása során a második deriváltakat az *első szomszédok* segítségével számítjuk ki. A folytonos koordináta-reprezentációban a csatolás helyes leírása már egy jóval összetettebb kérdés [89].

Bevezetünk tehát egy kétdimenziós rácsot, melynek lépésköze az s és φ irányokban rendre Δs és $\Delta\varphi$. A hullámfüggvényt a sorszámozott pontok $|i\rangle$ bázisán az alábbi módon reprezentáljuk:

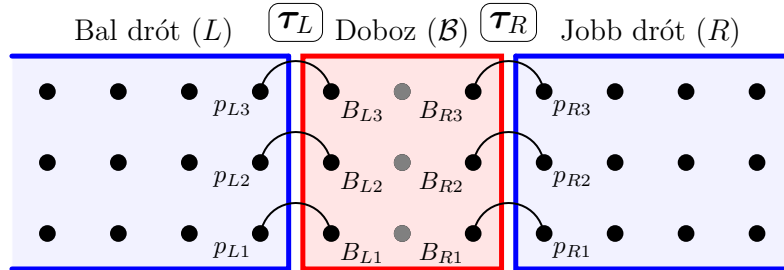
$$|\Psi\rangle = \sum_i \Psi[i] |i\rangle \quad \text{és} \quad \Psi[i] := \sqrt{\Delta s \Delta\varphi} \Psi(s_i, \varphi_i), \quad (6.36)$$

ahol az i -vel sorszámozott rácspont koordinátáit (s_i, φ_i) jelöli. A (4.15)-ben szereplő Hamilton-operátort az alábbi mátrixelemek adják meg, ha a második deriváltakat az első szomszédok segítségével számoljuk

$$H[i, j] = \begin{cases} 2(1/\Delta s^2 + 1/\Delta\varphi^2) & \text{ha } i = j, \\ -1/\Delta s^2 \text{ vagy } -1/\Delta\varphi^2 & \text{ha } i \text{ és } j \text{ első szomszédok,} \\ 0 & \text{különben.} \end{cases} \quad (6.37)$$

A Green-függvényt szintén mátrix reprezentálja

$$\mathbf{G}(\varepsilon) = \sum_{i,j} G_\varepsilon[i, j] |i\rangle\langle j|, \quad \text{ahol} \quad G_\varepsilon[i, j] = G_\varepsilon(s_i, \varphi_i; s_j, \varphi_j) \Delta s \Delta\varphi. \quad (6.38)$$



6.2. ábra. A particionálás megjelenítése diszkrét rács esetén. Jelölést vezetünk be az egyes részek határáraán fekvő szomszédos pontokra, illetve az L és R félvégtelen drótok és a \mathcal{B} Doboz közötti csatolást szimbolikusan is megjelenítjük.

A (6.37) alapján – a 6.2. ábra jelöléseit fölhasználva – a (6.11) csatolások a \mathcal{B} doboz és a félvégtelen drótok között a következők:

$$\tau^L = \frac{1}{\Delta s^2} \sum_{i \in L} |B_{Li}\rangle\langle p_{Li}|, \quad \tau^R = \frac{1}{\Delta s^2} \sum_{i \in R} |B_{Ri}\rangle\langle p_{Ri}|. \quad (6.39)$$

A (6.39) kifejezéseket fölhasználva a Σ korrekció (egzaktul) kiszámítható a rácson. Konkrétan a Σ^R esetén látjuk, hogy a (6.15) definíció alapján a τ^R -rel történő transzformálás következtében pontosan a Doboz végpontjaihoz tartozó mátrixelemek nem tűnnek el. Ezek a mátrixelemek megegyeznek a félvégtelen drót \mathbf{g}^R Green-függvényének a szomszédos

(p_{Ri}, p_{Rj}) végpontokban vett értékeivel. (A jelöléseket lásd a 6.2 ábrán.) Tehát a Σ^R mátrix nem eltűnő elemei:

$$\Sigma_\varepsilon^R[B_{Ri}, B_{Rj}] = \frac{1}{\Delta s^4} g_\varepsilon^R[p_{Ri}, p_{Rj}] = -\frac{1}{\Delta s^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \phi_m[p_{Ri}] e^{ik_m \Delta s} \phi_m^*[p_{Rj}]. \quad (6.40)$$

Megjegyezzük, hogy diszkrét rácson a diszperziós reláció módosul, ennek megfelelően a (6.40) formula fölírásakor (6.19)-ben a v_m -eket lecseréltük $v_m = 2 \sin(k_m \Delta s) / \Delta s$ -re.

Diszkrét rács reprezentációban tehát a \mathbf{G}^{BB} Dobozra megszorított Green-függvény kiszámításához szükséges (6.5) formulában minden jóldefiniált, így a (6.40) formula alapján már könnyen fölírható véges mátrixot kell invertálnunk.

6.4. Numerikus eredmények

Ebben a szakaszban bemutatjuk a vázolt szórási probléma megoldásának eredményeit a 6.1. szakaszban leírt, a Green-függvény meghatározásán alapuló módszer segítségével. A (4.38) transzmisszió kiszámítása mellett a 6.2. szakaszban bevezetett mennyiségek segítségével elemezzük a szórási problémát különböző apertúra méret per rotorhossz paraméterértékek és bejövő hullám szimmetriák esetén.

A használt intervallum méretét és a beosztás finomságát addig alakítottuk, amíg a kapott eredmények konvergáltak. Számításainkat a dimenziótlanított s és φ koordinátákban $[-\pi/2, \pi/2] \times [-\pi/2, \pi/2]$ méretű Dobozt választva 49×49 -es diszkrét rácson végeztük. A 0 és $50E_0$ közötti energiatartományt vizsgáltuk, ahol az energiát a korábban már bevezetett $E_0 := \hbar^2 / 2M(\kappa a)^2$ egységekben mérjük. Ez az energia-tartomány „hideg” molekulákat jelent, ahol kvantumos effektusok megjelenésére számítunk.

6.4.1. A numerikus számítások technikai részleteiről

Az első számításokat a Wolfram Mathematica komputeralgebrai rendszerben végeztük. Majd a programfutást meggyorsítandó, Földi Péter segítségével, C programot készítettünk, miközben a nyers adatok kiértékelésére továbbra is a Mathematica-t használtuk. Az ábrák a kinyert adatfájlokat fölhasználva L^AT_EX-ben, TikZ és pgfplot csomagok segítségével készültek.

A program szolgáltatta adatokkal, elsődlegesen az S mátrix elemeivel kapcsolatban, több elvárásunk is van, amely segíti az elkészült kód tesztelését.

- A két drót nem különbözik egymástól, így a (4.40) S -mátrixnak csak két blokkja különbözhet, azaz $\mathbf{S}^{LL} = \mathbf{S}^{RR}$ és $\mathbf{S}^{LR} = \mathbf{S}^{RL}$.
- Az akadály az s tengely mentén szimmetrikus, így az S -mátrix egyes blokkjai is szimmetrikusak, azaz az egész S -mátrix egy szimmetrikus mátrix.
- A (4.41) módosított S -mátrix unitér (4.42).
- A Doboz méretét és helyzetét mesterségesen választottuk, pusztán annyit kikötve, hogy a keletkező Drótokban már csak haladó módusok jelentkezzenek. A Doboz kissé jobbra vagy balra mozdításával az S -mátrixnak nem szabad változnia. Természetesen az állapotsűrűség ekkor megváltozik, amit a további vizsgálatok során a 6.4.2. szakaszban ki is használunk.

- Nagyobb energiákon már azt várjuk, hogy a transzmisszió a geometriai megfontolásokkal kiszámítható (6.41) valószínűség körül ingadozik.

Továbbá teszteltük a programot az alábbi két egyszerű esetben:

- Ha nincs akadály a Dobozban, akkor a teljes transzmissziónak megfelelő $T = 1$ és $R = 0$ eredményt kell visszakapnunk. Az egyes módusok ekkor szabadon terjednek, így az S -mátrixban nem szerepelhetnek a különböző módusokat összekötő kereszt tagok.
- A forgásában konstans korlátozást érző rotor problémája – amikor is $\alpha(s) = konst$ – analitikusan végigszámolható, a megoldás illesztése az 5.1.4. alszakaszban vázolt-hoz hasonlóan végrehajtható. Ez egy újabb tesztelésre adott lehetőséget, hiszen az analitikusan kapott eredményeket összehasonlíthatjuk a program szolgáltatta eredményekkel. Mivel az egyes módusok itt is függetlenek, ezt a kapott S -mátrixnak tükröznie kell.

6.4.2. A valódi rezonanciák azonosítása

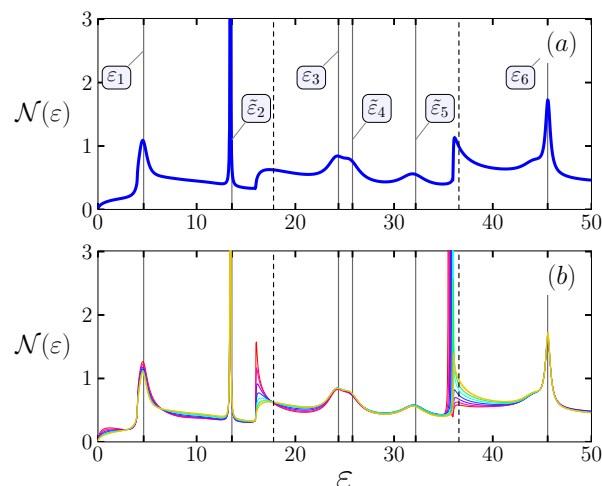
(6.32) alapján az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ állapotsűrűségben csúcsok mutatkoznak az energia függvényében, amelyek nagy élettartamú rezonáns állapotokra utalnak. Ezen „rezonanciagyanús” energiák között van olyan, amelynél a valószínűségi sűrűségfüggvény valóban a \mathcal{I} kölcsönhatási régióra koncentrálódik (kvázi kötött rezonáns állapotok). Mások viszont a \mathcal{B} Doboz aktuális méretének a következményei és \mathcal{I} -n kívül koncentrálódva csak a mesterségesen választott Dobozt jellemzik.

Az utóbbi –számunkra érdektelen és zavaró – energiákat egy egyszerű trükkel könnyedén kiszűrhetjük. A \mathcal{B} Dobozt az s tengely mentén az \mathcal{I} kölcsönhatási régióhoz képest kissé eltoljuk, ekkor a $\mathcal{N}(\varepsilon)$ függvényben a \mathcal{I} -re jellemző csúcsok lényegében változatlanok, miközben a Doboz következtében megjelenőek jelentősen átalakulnak.

A 6.3 ábrán az (a) panel az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ állapotsűrűség energiafüggését mutatja egy konkrét paraméterértéknél. A függvény görbe a (6.32) egyenletnek megfelelően csúcsok egymásutánját mutatja a Doboz lehetséges rezonáns energiáinál. Az \mathcal{I} Kölcsönhatási régióra jellemző rezonanciák kiszűréséhez a körülölelő \mathcal{B} Dobozt $[-\pi/2, \pi/2] + n \cdot [\Delta s, \Delta s]$ módon eltoltuk az s tengely mentén, ahol $n = 0, 1, \dots, 6$. Az állapotsűrűség változását a 6.3. ábra (b) panelje mutatja. Ezen eltolás során a csúcsok közül csak a folytonos vonallal jelöltek őrizték meg helyüket és magasságukat lényegében változatlanul, miközben a szaggatott vonallal jellettek jelentősen átalakultak.

Az (a) ábrán bemutatott nyolc csúcsból hat bizonyult az \mathcal{I} kölcsönhatási régióra vonatkozóknak. Ezeket ε_i és $\tilde{\varepsilon}_i$ jelöli sorban, növekvő energia szerint indexelve. Mint azt később részletesen illusztráljuk (6.4.4. alszakasz) az ε_i energiákon a φ szempontjából *páros*, míg az $\tilde{\varepsilon}_i$ -k esetén *páratlan* bejövő hullámfüggvénnyel lehet a legnagyobb transzmissziót elérni.

Még egyszer kiemeljük, hogy a transzmissziós tulajdonságok, így az azt kódoló S -mátrix, nem változhatnak meg a „dobozeltolás” során, ahogyan azt a 6.4.1. alszakaszban már leírtuk. Így az elkészült programot ebből a szempontból is leellenőriztük.

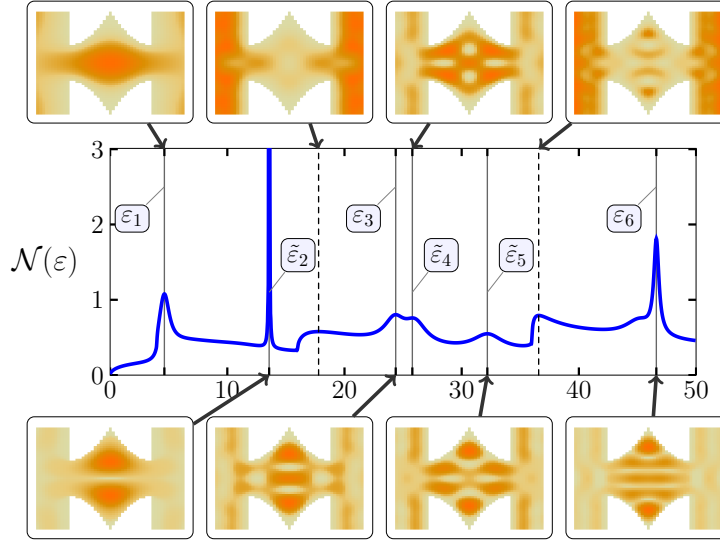


6.3. ábra. A valódi rezonanciák azonosítása. (a) Az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ állapotssűrűség az ε dimenziótlan energia függvényében $c = 0.5$ apertúra méret per rotorhossz arány és $\kappa = 1$ tömegeloszlás paraméter esetében. A csúcsok rezonáns állapotokra utalnak, melyek élettartama hosszabb az átlagnál. (b) Az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ változása a \mathcal{B} Doboz s tengely menti $[-\pi/2, \pi/2] + n \cdot [\Delta s, \Delta s]$ eltolása esetén, ahol $n = 0, 1, \dots, 6$. Függőleges szaggatott vonallal jelöltük a jelentős változáson átmenő csúcsok helyét. Ezzel ellentétben a kölcsönhatási régióra jellemző „valódi” rezonanciák helyét, amelyek alig változtak, folytonos vonallal jeleztük.

6.4.3. Állapotsűrűség és helyi állapotssűrűség

Rezonáns energiákon a $\rho_\varepsilon(\mathbf{r})$ helyi állapotssűrűség információt hordoz a hullámfüggvényről. A (6.34) és (6.35) formulák alapján hosszú élettartamú állapotok esetén a helyi állapotssűrűség arányos a hullámfüggvény $|\Psi_\mu^B(\mathbf{r})|^2$ abszolút értékének négyzetével, ami jellemzi az állapot térbeli eloszlását. Így arra számítunk, hogy a nagy élettartamú állapotok közül azok, amelyek érzéketlenek a \mathcal{B} Doboz helyére és méretére teljesen az \mathcal{I} régióba lokalizálódnak. A 6.4. ábra igazolja ezt az elvárásunkat. Az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ függvény segítségével beazonosított két legalacsonyabb (valódi) rezonáns energiánál például $\rho_\varepsilon(\mathbf{r})$ valóban a \mathcal{I} régióra koncentrálódik. Ezzel ellentétben a szaggatott vonallal jelzett (hamis) rezonanciák esetén $\rho_\varepsilon(\mathbf{r})$ nagyrészt a \mathcal{B} Doboz \mathcal{I} régió kívüli részében helyezkedik el. Ez egy újabb igazolása annak, hogy ez utóbbi rezonáns energiák csak a mesterségesen fölvetett Doboz termékei, és nem \mathcal{I} -re vonatkoznak, így a transzmisszió energiafüggésében nem fognak mutatkozni.

A c paraméterértékek változtatásával mutakozó tendenciákat a 6.5 ábrán érzékeltetjük, amely az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ állapotssűrűség szintvonalas ábrázolása az ε energia és a c apertúra méret per rotorhossz arány függvényében. Tehát a 6.3. ábra (a) paneljén az egyetlen $c = 0.5$ esetén ábrázolt függvényt most egy szélesebb c paraméter-tartományban ábrázoltuk. Az ábra jobb alsó sarkában alacsony c értékek esetén megjelenő fehér pontok arra utalnak, hogy kisebb apertúraméret esetén új hosszú élettartamú állapotok jelennek meg immár magasabb energiákon is.



6.4. ábra. Az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ állapotssűrűség az ε dimenziótlan energia függvényében $c = 0.5$ és $\kappa = 1$. Az alsó és felső paneleken a $\rho_\varepsilon(\mathbf{r})$ helyi állapotssűrűség densityplot-ját látjuk a lehetséges rezonáns energiáknál. A felső sor második és negyedik paneljén, amely a harmisként azonosított energiákhoz tartozik, a lokális állapotssűrűség nagyrészt a \mathcal{B} Doboz \mathcal{I} régió kívüli részében koncentrálódik.

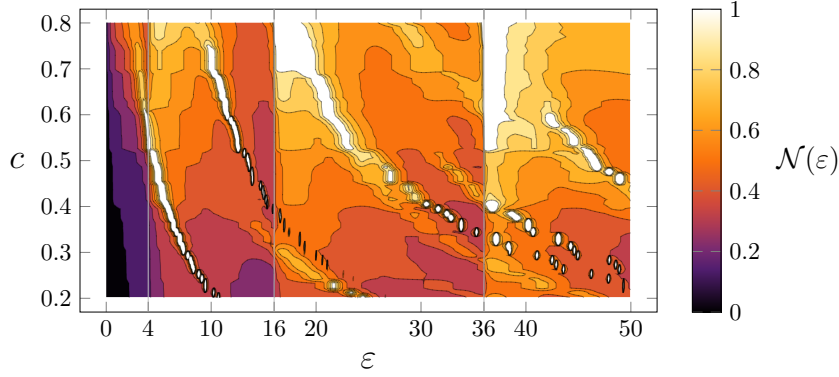
6.4.4. Transzmisszió különböző forgási szimmetriák esetén

Ebben a szakaszban föltérképezzük, hogy miként függ a rotor áthaladásának (4.38) valószínűsége a (4.35) bejövő hullám megválasztásától. A 6.4.2. alszakaszban azonosítottuk az állapotssűrűség segítségével, hogy mely energiákon számíthatunk rezonanciára. A bejövő hullám forgásszimmetriája szempontjából két alapvetően különböző transzmissziós viselkedést különíthetünk el. A φ szempontjából *páros* vagy *páratlan szimmetriájú* függvényt választva más és más rezonáns energiák gerjesztődnek.

Ahhoz hogy jobban kidomborítsuk a kvantumos effektusokat a szórási folyamatban kissé általánosítjuk a (4.9) által nem forgó részecskékre definiált T^{cl} klasszikus átmeneti valószínűséget. A (4.35) bejövő hullámfüggvény φ függő részének abszolút érték négyzetét úgy tekintjük, mintha beérkező rotorok sokaságának hajlásszög eloszlását mutatná. Ennek segítségével bevezetünk egy *félklasszikus átmeneti valószínűséget*, amelyet ezen eloszlás és a kölcsönhatási régió nyílásának átfedési integráljával definiálunk

$$T^{\text{pc}} := \int_{-\alpha_c}^{\alpha_c} d\varphi \left| \sum_{m=-m_0}^{m_0} c_m \phi_m(\varphi) \right|^2. \quad (6.41)$$

A 6.6 és 6.8 ábrákon vízszintes vonal jelöli az adott paraméterek esetén érvényes félklasszikus átmeneti valószínűség értéket. Ahogyan erre már 6.4.1. alszakaszban is utaltunk, ha a programunk jól működik a (4.38) kvantumos transzmisszióknak is ehhez az értékhez kell közelítenie nagy energiákon.



6.5. ábra. Az $\mathcal{N}(\varepsilon)$ állapotsűrűség szintvonalas ábrázolása az ε dimenziótlan energia és az c apertúra méret per rotorhossz arány függvényében, $\kappa = 1$ tömegeloszlás paraméter esetén. A világosabb színek jelölik a nagy függvényértékeket, amelyek a hosszabb élettartammal vannak kapcsolatban. Függőleges fehér vonallal jelöltük azokat az energiákat, ahol a lehetséges haladó módusok $2m_0 + 1$ száma ugrik (4.31). Végigkövethetjük a 6.3 és 6.4 ábrán $c = 0.5$ esetben talált első két rezonáns csúcsot (ε_1 és $\tilde{\varepsilon}_2$), amint a c csökkentésével egyre élesebbé válnak. Látjuk továbbá, hogy $c \leq 0.4$ esetén újabb lehetséges hosszú élettartamú állapotok mutatkoznak. (Lásd az ábra jobb alsó sarkában).

Páros bejövő hullám

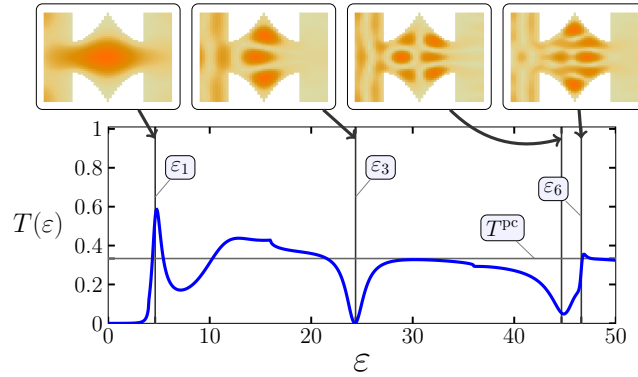
Ebben az alszakaszban a φ orientációs szög szempontjából *páros* bejövő hullámok szóródását vizsgáljuk. Ez a bejövő hullámot leíró (4.35) formulában a $c_m = c_{-m}$ relációt jelenti. Az alacsony energia-tartományban lehetséges legalapvetőbb példák az alábbiak:

$$\Psi_0^{\text{even}}(s, \varphi) = e^{ik_0 s} \phi_0(\varphi) = e^{ik_0 s} \frac{1}{\sqrt{\pi}}, \quad (6.42)$$

$$\Psi_1^{\text{even}}(s, \varphi) = e^{ik_1 s} \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\varphi) + \phi_{-1}(\varphi)] = e^{ik_1 s} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos(2\varphi). \quad (6.43)$$

A (6.42) példában csak az $m = 0$ -hoz tartozó tag nem tűnik el, ami éppen az analitikus számítások során is kezelt *nem forgó bemenetnek* felel meg. Ebben az esetben természetesen a (6.41) féklklasszikus átmeneti valószínűség megegyezik a nem forgó esetben geometriai megfontolásokkal kapott (4.9) valószínűséggel. A nem forgó esetben kapott transzmissziós görbét a 6.6. ábra mutatja. Ez a számítás támasztja alá az 5.1. szakaszban bemutatott analitikus közelítés helyességét alacsony energiákra, és mutatja annak érvényességi körét.

Pontosan a legalacsonyabb energiájú ε_1 lehetséges rezonáns energiánál, amelyet az állapotsűrűség segítségével azonosítottunk éles csúcsot mutat a transzmisszió nem forgó bemenet esetén. Az analitikus közelítés ezen csúcs helyéről és jellegéről képes jól számot adni. Ennek okát könnyen megérthetjük a felső panelek közül az elsőn ábrázolt hullámfüggvény abszolút értékének négyzetét tanulmányozva. Látható, hogy itt a hullámfüggvény nem hatol be az éles törést mutató csúcsos alsó és felső régióba. Így amikor a peremet leíró $\alpha(s)$ függvényt önkényesen lassan változónak és simának tételeztük föl, nem követtünk el olyan jelentős hibát.

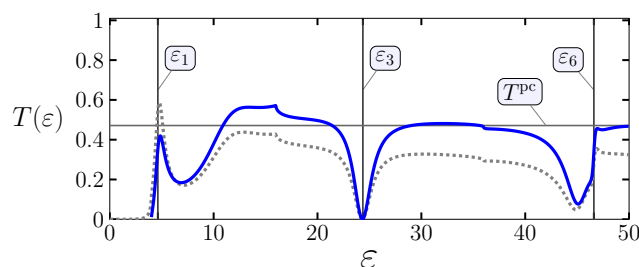


6.6. ábra. A $T(\varepsilon)$ transzmisszió energia függése a (6.42) „nem forgó” bejövő állapot esetén. A függőleges vonalak mutatják az állapotsűrűség alapján várt és ebben az esetben megtalált rezonanciákat. A vízszintes vonal az energia független (6.41) klasszikus átmeneti valószínűséget adja meg. Ahogyan azt várjuk magasabb energián $T(\varepsilon)$ ezen érték körül változik (Lásd 6.4.1. alszakasz). A négy sűrűség ábrázolás az érdekes energiáknál mutatja a Dobozra megszorított hullámfüggvény $|\Psi^B|^2$ abszolút értékének négyzetét, amit (6.20) alapján kiszámíthatunk. A paraméterek értéke: $c = 0.5$ és $\kappa = 1$.

Az ε_3 -mal jelölt rezonáns energiánál már olyan jelenséget látunk, amely kívül esik a függetlenül terjedő módusokkal operáló közelítés hatókörén. Ennél az energiánál és paraméter választásnál a nem forgó rotor teljesen visszaverődik. A felső panelek közül a második, amely a 6.6 ábrán az ε_3 energiához tartozik, szemlélteti ennek okát. A hullámfüggvény itt mélyen behatol az éles törést mutató alsó és felső régióba, így nem is várható, hogy az 5. fejezet közelítése számot adjon erről a jelenségről.

Az állapot háromosztatú szimmetriát mutat, azaz a φ -ben szimmetrikusan két csomóvonal mentén a hullámfüggvény eltűnik. Ezen rezonáns állapot önmagában az s változóban is szimmetrikus lenne, de amikor az állapot a bejövő hullámhoz csatolódik ez a szimmetria megbomlik. Az említett paneleken már ezt a megbomlott szimmetriát látjuk, aminek következtében a két csomóvonal „eltorlaszolja” a kijáratot. A kölcsönhatási régió jobb oldalán így a hullámfüggvény alig tér el a nullától és nehezen csatolódik a drótokhoz.

A 6.7 ábrán összehasonlítjuk a két páros szimmetriájú (6.42) és (6.43) bejövő hullám alapján számolt transzmissziós görbét, és láthatjuk, hogy a két görbe hasonló karakterű. Természetesen a (6.43) csak a három haladó módust lehetővé tévő $\varepsilon \leq 4$ tartományban értelmes. Ez a hasonló karakter a magasabb energián lehetséges további φ -ben páros szimmetriájú bejövő hullám esetén is igaz, a transzmissziós görbék alapvetően azonos jellegűek. A transzmissziós csúcsok és völgyek jellege tehát a φ -beli szimmetria következményei.



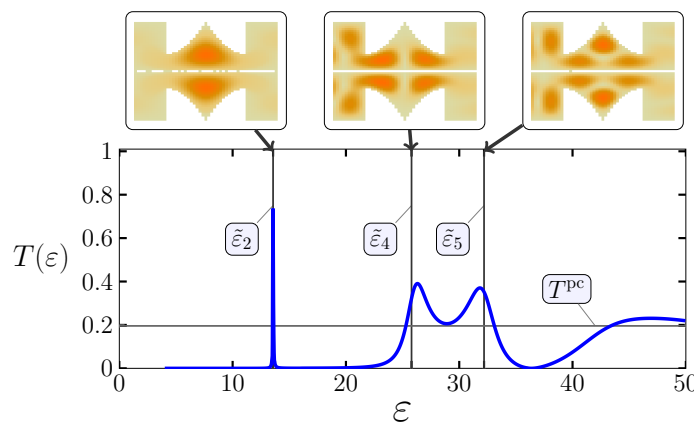
6.7. ábra. A $T(\varepsilon)$ transzmisszió energia függése a (6.43) „páros” bejövő állapot esetén. Összehasonlításképpen az előző 6.6 ábrán bemutatott „nem forgó” rotorra vonatkozó transzmissziós görbét is fölváztuk szaggatott vonallal. A két görbe nyilvánvalóan hasonló karakterű. A paraméterek értéke: $c = 0.5$ és $\kappa = 1$.

Páratlan bejövő hullám

Következőként olyan bejövő hullámok szórását vizsgáljuk, amelyek a φ változó szempontjából *páratlanok*. Ekkor a $c_m = -c_{-m}$ szimmetria reláció teljesül a bemenetet megadó (4.35) egyenletben. Az alacsony energiák tartományában a legegyszerűbb ilyen állapot:

$$\Psi_1^{\text{odd}}(s, \varphi) = e^{ik_1 s} \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\varphi) - \phi_{-1}(\varphi)] = ie^{ik_1 s} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(2\varphi). \quad (6.44)$$

Megjegyezzük, hogy ilyen bejövő hullám csak $\varepsilon > 4$ energiákon lehetséges és az $4 < \varepsilon \leq 16$ energia-tartományban nincs is más lehetőség páratlan szimmetriát létrehozni.



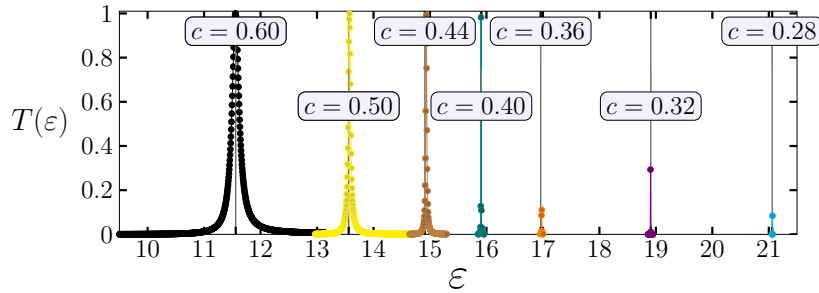
6.8. ábra. A $T(\varepsilon)$ transzmisszió energiafüggése a (6.44) „páratlan” bejövő állapot esetén. A függőleges vonalak mutatják az állapotsűrűség alapján várt és ebben az esetben megtalált rezonanciákat. A vízszintes vonal az energia független (6.41) klasszikus átmeneti valószínűséget adja meg. Ahogyan azt várjuk magasabb energián $T(\varepsilon)$ ezen értékhez közelít (Lásd 6.4.1. alszakasz). A három sűrűség ábrázolás az érdekes energiáknál mutatja a Dobozra megszorított hullámfüggvény $|\Psi^B|^2$ abszolút értékének négyzetét. A paraméterek értéke: $c = 0.5$ és $\kappa = 1$.

A 6.4. ábra $\tilde{\varepsilon}_2$ energiához tartozó bal alsó panelje – az állapotsűrűségben mutatkozó éles maximum miatt (lásd a (6.35) formulát) – a kölcsönhatási régió rezonáns állapotának abszolút érték négyzetét mutatja. Maga a hullámfüggvény ekkor páratlan. Így a páratlan bejövő hullámmal sikerül ezt az állapotot gerjesztenünk és a különösen nagy élettartam miatt éles és magas transzmissziós csúcs mutatkozik a 6.8 ábrán pontosan $\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_2$ -nél. Ezt a csúcsot leszámítva alig van transzmisszió a $4 < \varepsilon < 20$ tartományban. A 6.8. ábra paneljein ábrázolt $|\Psi^B|^2$ sűrűségeket tanulmányozva az $\tilde{\varepsilon}_2$ energián látjuk, hogy a bejövő módusok (6.44) páratlan szimmetriájú szuperpozíciója képes gerjeszteni a 6.3 és 6.4 ábrán beazonosított rezonáns állapotot. Ezt az állapotot lehet gerjeszteni a $\phi_{-1}(\varphi)$ vagy $\phi_1(\varphi)$ forgási módusokkal külön-külön is azonban a (6.44) páratlan szuperpozíció csökkenti az átlagos transzmissziós valószínűséget, így $\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_2$ -nél hangsúlyozottabban jelenik meg az éles rezonancia.

A transzmisszió hirtelen növekedését tapasztaljuk továbbá az $\tilde{\varepsilon}_4$ és $\tilde{\varepsilon}_5$ energiáknál is, és a 6.8 ábrán követhetjük a kölcsönhatási régióban kialakuló hullámfüggvényt.

6.4.5. A rendszer valódi kötött állapota

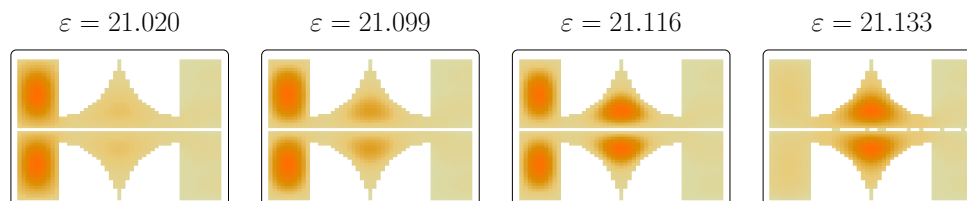
Ebben a szakaszban tovább tanulmányozzuk a 6.4.2 és 6.4.3. alszakaszban már beazonosított hosszú élettartamú rezonáns állapotot. A 6.4 ábrán, mely az állapotsűrűséget mutatja $c = 0.5$ esetén, ez $\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_2 = 13.57$ energiánál mutatkozik. A 6.4.4. alszakaszban bemutattuk, hogy ez a rezonancia éles maximumként jelentkezik a transzmisszióban páratlan bemenet esetén (lásd a 6.8 ábrát). A továbbiakban a c apertúra méret per rotorhossz arány hatását vizsgáljuk meg erre a rezonanciára, nyomon követve a transzmissziós maximum és a gerjesztett állapot élettartamának változását.



6.9. ábra. A (6.44) formulával megadott páratlan bejövő hullám esetén kapott első transzmissziós maximum változása a c apertúra méret per rotorhossz arány függvényében. A függőleges vonalak az egyes c értékek esetén az állapotsűrűség csúcsaiból beazonosítható rezonáns energiákat jelölik.

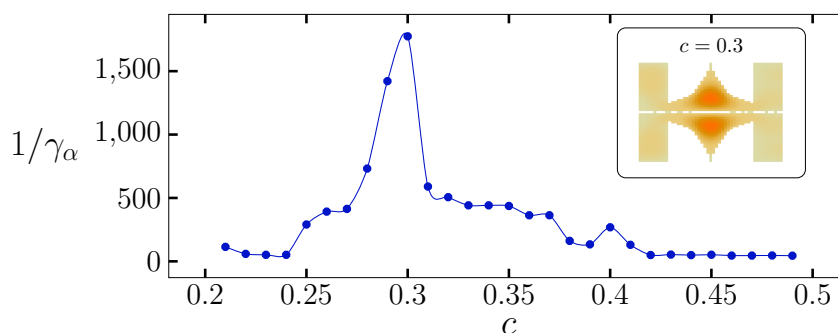
Természetesen a rezonáns állapot energiája, mely az állapotsűrűség csúcsaiból nyerhető ki függ a c paraméter értékétől, ahogyan a 6.6 ábránál már tárgyaltuk. A 6.9 ábrán nyomon követhetjük, hogy a transzmissziós csúcs pontosan ezeknél az energiáknál jelenik meg, s ez igazolja, hogy a bejövő hullám valóban a kölcsönhatási régió rezonáns állapotát gerjeszti. Továbbá látszik, hogy az apertúra méretének, azaz c -nek a csökkenésével a transzmissziós csúcs először egyre élesedik, majd drasztikusan csökken a magassága miközben tovább

élesedik, végül $c = 0.27$ -től kezdve teljesen eltűnik. Az „eltűnést” természetesen adott energia-fölbontás esetén kell érteni, amiben $\Delta\varepsilon = 0.001$ -ig mentünk el.



6.10. ábra. A páratlan szimmetriájú bejövő hullám hatására a hosszú élettartamú rezonáns állapot fölépül a \mathcal{I} kölcsönhatási régióban akkor is, amikor jelenléte a transzmisszióban már nem mutatkozik. Az ábrasoron a Dobozra megszorított hullámfüggvény abszolút értékének négyzetét mutatjuk a rezonáns energia közvetlen közelében $c = 0.27$ esetén. Pontosan az $\varepsilon = 21.133$ rezonáns energiánál, amit az állapotsűrűség alapján azonosítunk, a hullámfüggvény teljes egészében az \mathcal{I} kölcsönhatási régióba lokalizálódik, de nem biztosítja már a jobb oldalra a transzmissziót.

A transzmisszióból eltűnő csúcs azonban nem jelenti azt, hogy a rezonáns állapotot sem gerjesztjük tovább. A 6.10 ábrán éppen azt demonstráljuk, hogyan épül föl a rezonáns állapot a kölcsönhatási régióban a rezonáns energia közvetlen közelében, miközben $c = 0.27$ esetén a transzmissziós maximum végleg eltűnik. Látjuk, hogy pontosan az állapotsűrűség alapján várt energiánál a rezonáns állapot fölépül, jóllehet jelenléte már nem mutatkozik a transzmissziós görbén, azaz már nem tud csatolódni a jobb oldali Dróthoz.



6.11. ábra. A hosszú élettartamú rezonáns állapot $1/\gamma$ élettartama a c apertúra méret per rotorhossz arány függvényében. A közelítő értékeket a különböző c esetén fölvett $\mathcal{N}(\varepsilon)$ állapotsűrűségből nyertük. Az paraméterértékekhez tartozó maximumok helye (amelyet $\tilde{\varepsilon}_2$ jelölt $c = 0.5$ esetén) az állapotsűrűségben nyomon követhető a 6.5. ábra szintvonalas grafikoján. A maximum értékből pedig a (6.32) alapján következtethetünk az élettartamra. Az időt a 4.3.1. alszakaszban bevezetett dimenziótlanított változók és mennyiségek alapján $\frac{2Ma^2}{\hbar}$ egységekben mérjük.

A 6.11. ábra ezen rezonáns állapot közelítő élettartamát mutatja a c apertúra méret per rotorhossz arány függvényében. Azt már a 6.3 ábrán is láttuk, $c = 0.5$ esetén, hogy

az ε_2 -vel jelölt energiánál a kölcsönhatási régiónak olyan állapota valósulhat meg amely a többi állapothoz képest jelentősen nagyobb élettartammal bír.

A nagyon éles és végül eltűnő transzmissziós csúcs, illetve a többi lehetséges állapothoz képest extrém hosszú élettartam arra utal, hogy $c = 0.3$ apertúra méret per rotorhossz arány esetén a \mathcal{I} kölcsönhatási régió valódi *kötött állapotát* találtuk meg.

6.5. Összegzés

Munkánk második részében belső struktúrával rendelkező részecske egyszerű kvantummechanikai modelljét vizsgáltuk. Konkrétan a merev rúdként forgó kétatomos modell molekula vékony falú részhez közelít. A réssel való kölcsönhatást a hullámfüggvényre kirott peremföltételek segítségével vettük figyelembe, amelyek a translációs és a forgási szabadsági fokok bonyolult összecsatolódásához vezetnek.

A rotor transzmissziója a klasszikus geometriai valószínűségtől jelentős eltéréseket mutat, melynek oka a kvantummechanikai terjedés során föllépő rezonanciák megjelenése. A probléma tárgyalása céljából az ötödik fejezetben analitikus közelítéseket tettünk. Az alkalmazott elhanyagolások sora azonban csak alacsony energián (nem forgó bejövő molekulák esetén) lehet érvényes. Ezért az analitikus eljárás elvégzése után ebben a hatodik fejezetben leírt módon a megoldást numerikus módszerrel is ellenőriztük. Ez lehetőséget biztosított a közelítések ellenőrzésére és a teljes szórási feladat – tetszőleges bejövő állapot esetén érvényes – megoldására.

A numerikus megoldáshoz diszkrét rács reprezentációt használtunk. A nehézséget ezen a ponton a mátrixokká alakuló operátoraink végtelen mérete jelentette, melynek kiküszöbölésére egy Green-függvényeken alapuló módszert alkalmaztunk. A probléma megfelelő particionálásával elérhető, hogy a Green-függvény ismerete csak a kölcsönhatás szempontjából releváns véges tartományon szükséges, amelynek kiszámítását a tartomány eredeti Hamilton-operátorához hozzávett ún. sajátenergiás korrekciók segítségével végeztük el. A korrekciók – ebben a diszkrét rács reprezentációban – egzaktul figyelembe veszik a leválasztott szabad részekkel való kölcsönhatást [82]. A folytonos energiaspektrum jellemzőit, például a hosszú élettartamú rezonáns állapotokat, a spektrális függvény és az abból kinyerhető állapotsűrűség (DOS), illetve helyi állapotsűrűség (LDOS) segítségével tanulmányoztuk, amelyek szintén a véges tartományra megszorított Green-függvényből számolhatók.

A nagy élettartamú rezonáns állapotok közül a legalacsonyabb energiájú a paraméterek alapján azonosnak bizonyult az előzőleg analitikus módszerrel a transzmisszió energiafüggése alapján meghatározott csúccsal. (Lásd 5.6. ábra összehasonlító grafikonjait.) Az állapotsűrűség energiafüggését elemezve megállapítottuk, hogy a rezonanciák oszthatóak a bejövő hullám forgásszimmetriájának szempontjából. Az elvégzett numerikus számítások eredményeivel igazoltuk az alacsony energiás analitikus közelítés helyességét, és rámutattunk az analitikus módszer korlátaira is.

Az alábbiakban áttekintjük a modell alkalmazhatóságának határait és a kísérleti lehetőségek kérdését.

Először is nem szabad figyelmen kívül hagynunk, hogy egyszerű, csupán két szabadsági fokot tartalmazó kvantummechanikai modellünk korlátozottan alkalmazható valós fizikai

szituációk leírására. Fő hiányossága az egyetlen translációs szabadsági fok, azaz annak föltételezése, hogy a tömegközéppont végig az apertúra szimmetriatengelye mentén halad.

Most pedig megvizsgáljuk az alkalmazhatóság szempontjából is fontos jellemző méretek és az érdekes energiatartomány kapcsolatát.

6.5.1. Megfontolások az energiáról

Számításaink szerint a kvantumos transzmisszió akkor tér el leginkább a T^{cl} (4.9) klasszikus átmeneti valószínűségtől, amikor az ε energia az effektív transzmissziós potenciál v_c maximumának nagyságrendjébe esik, vagy annál kisebb, azaz $\varepsilon \lesssim v_c$. A kis apertúra méret per rotorhossz arány határesetben $c := b/a \ll 1$ az $\varepsilon \lesssim (\pi/2)^2 (1/c)^2$ (5.17) formula alapján végezhetünk becslést, amely az eredeti (nem átskálázott) mennyiségekkel:

$$E \lesssim \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left(\frac{a}{b}\right)^2 E_0. \quad (6.45)$$

Ahogy azt már a 4.3.1. alszakaszban láttuk, a szabad rotor első gerjesztett állapotának energiája (4.27) alapján $E_1^{(\text{rot})} = 4E_0$. Ebből adódóan a klasszikus szóráshoz képest a kvantumos effektusok

$$E \lesssim \left(\frac{\pi a}{4b}\right)^2 E_1^{(\text{rot})} \quad (6.46)$$

bejövő energiák esetén mutatkozhatnak meg. Mivel az érdekes esetben a rotor $2a$ hossza nagyobb, mint az apertúra $2b$ mérete, a prefaktor 1-nél nagyobb lehet.

A translációs mozgás „hullámszerűségét” a de Broglie hullámhosszal jellemezhetjük, amelyet a (4.13) szerint a dimenziótlan ε energiával is megadhatunk:

$$\lambda_{\text{dB}} := \frac{2\pi}{\sqrt{2ME/\hbar^2}} = \frac{2\pi \kappa a}{\sqrt{\varepsilon}}. \quad (6.47)$$

Az alacsony energiás rezonanciák nagy λ_{dB} de Broglie hullámhossz esetén lépnek föl. A (6.45) formula energiára vonatkozó megkötését kifejezhetjük a λ_{dB} de Broglie hullámhossz segítségével is:

$$\lambda_{\text{dB}} \gtrsim 4\kappa \left(\frac{b}{a}\right) a. \quad (6.48)$$

Ilyen módon kapcsolatba hoztuk a rotor tömegközépponti sebességét és a modell jellemző paramétereit, konkrétan: (i) a rotor a hosszát; (ii) a rotor κ -val jellemzett tömegeloszlását; és (iii) a c apertúra méret per rotorhossz arányt. A jellegzetes rezonancia jelenségek $\kappa < 1$ és $c < 1$ esetben fordulnak elő, így a fönti de Broglie hullámhosszra vonatkozó rezonancia föltétel alapján a hullámhossznak nagyobbnak kell lennie mint a rotor a mérete szorozva egy egy körüli vagy annál kisebb számmal.

6.5.2. Kísérleti lehetőségek

Az alacsony hőmérsékletű molekulasugarak előállítására irányuló kísérleti technikák gyorsan fejlődnek, így modellünk – amely fő vonásaiban analóg az ulmi veréb történetével – talán hamarosan megvalósíthatóvá válik.

A hélium-klaszterek jó kísérleti jelöltek lehetnek. A hélium-dimerek mérete ugyanis akár az 5 nm-t is elérheti [49], ráadásul esetükben a forgás szempontjából csak az alapállapot megengedett. Strukturált részecskéként szóba jöhetnek az optikailag csapdázott dimerek, amelyeket mágneses mezővel indukált Feshbach rezonancia segítségével keltenek, mint például a Li_2 vagy a Cs_2 . Ezeknek a gyengén kötött struktúráknak elég nagy a mérete, amely a keltésük során alkalmazott mágneses mező nagyságától is függ [41]. Az alacsony hőmérsékletű cézium Efimov állapota is lehetséges jelölt [44]. Méret szelektált rövid szén nanocsövek is használhatóak lennének strukturált „lövedék” gyanánt, bár esetükben a jól-definiált forgási állapot létrehozása komoly kihívásokat jelenthet.

Egy további érdekes kísérlet, amelyet perfluoroalkyl funkciós csoporttal ellátott azobenzol molekulákkal végeztek, demonstrálta a megnyúlt részecske tömegközépponti mozgásának hullám tulajdonságait [93]. Ezek a molekulák cisz és transz konfigurációban is előfordulnak, és e két konfiguráció között UV sugárzást alkalmazva előidézhető az átmenet. Transz alakjukban a molekulák hossza körülbelül 3 nm miközben szélességük csak néhány tized nm-t tesz ki. Egy ilyen molekula tehát méretei alapján jól megvalósíthatná az ulmi veréb szalmaszálának analogonját [94]. A fent említett [93] kísérletben a molekulák magasan gerjesztett forgási és rezgési állapotban voltak. A kutatócsoport azonban kísérletezett klasszikus Talbot-Lau interferometriával is olyan nyalábok esetén amelyekben csak néhány forgási és rezgési állapot volt betöltve [94]. Ezenkívül tervezik a transz és cisz konfiguráció közötti „átkapcsolást” [94], ami a rotor hosszának megváltoztatása mellett a tömegeloszlás paramétert is változtatja, így annak hatása is megfigyelhető lenne.

Mechanikus rácsok ma már 100 nm alatti rácsállandóval is készíthetőek. A rács döntésével pedig az effektív apertúra méret még tovább csökkenthető. Elméleti számításokkal és kísérletileg is igazolták, hogy egy valójában 100 nm-es rácsállandójú rács effektív mérete néhány nm-nyire redukálható [90, 43]. Ha ehhez földeljük, hogy a hélium trimerek ún. Efimov állapotának mérete 8 nm körüli, akkor az elvárt (6.48) egyenlőtlenség már elérhetőnek tűnik. Azonban a héliummal végzett kísérleteknél a de Broglie hullámhossz szobahőmérsékleten túl kicsiny (kevesebb mint 0,1 nm) [90] így alacsonyabb hőmérséklet szükséges. Ráadásul az atomok és a rács felülete között föllépő van der Waals kölcsönhatás elkenheti a minket érdeklő rezonancia effektusokat [91]. Ilyen struktúrákon vizsgálták például a hélium dimerek transzmissziós tulajdonságait [92].

Az idealizált infinitezimálisan vékony apertúrát – amelynek kémiai tulajdonságai nem befolyásolják a szórási folyamatot – megfelelő lézerterekkel lehetne megvalósítani. Az atomoptikai vizsgálatokban [35, 36] ugyanis bevált technikák vannak rácsozat kialakítására megfelelően beállított lézernyalábokkal.

A kísérleti lehetőségek elemzését egy friss eredmény ismertetésével zárjuk [95], amely új módszert mutatott be ultrahideg kétatomos nem poláris molekulák tengely helyzetének mintavételezésesre. A [95] cikkben beszámolnak különböző jóldefiniált forgási állapotú Rb_2 molekulák keltéséről háromdimenziós optikai csapdáknak. Jóllehet ezekben a kísérletekben a molekulák a rezgés szempontjából alapállapotban voltak, amikor is a magok távolsága nagyjából 0,61 nm, a forgási tengely befolyásolásának lehetősége ultrahideg molekulák sokaságában mindenképpen nagy előrelépés az ulmi veréb szórási problémájának megvalósításához.

6.6. Függelék: A Green-függvényes módszer technikai részletei

6.6.1. Általánosított Green-féle azonosság

A Green-függvény és a szórási probléma S -mátrix elemei közötti kapcsolatot levezethetjük az általánosított Green-féle azonosságot alkalmazva a hullámfüggvényre és a hozzá kapcsolódó Green-függvényre. Ennek a megközelítésnek megvan az az előnye is, hogy a kiválasztott térrészben közvetlenül szolgáltatja a hullámfüggvényt, ha ismert a hullámfüggvény a peremen továbbá a probléma retardált Green-függvénye az adott térrészben.

A peremérték problémákra vonatkozó Lagrange-féle azonosság integrálásából kapjuk a Green tétel általánosított formáját ([85] IV. fejezet 4. szakasz (4.5) egyenlet):

$$\int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \left[\phi^*(\mathbf{r}) L_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) (L_{\mathbf{r}}^\dagger \phi(\mathbf{r}))^* \right] = \oint_{\mathcal{S}} d\mathbf{f} \left[\phi^*(\mathbf{r}) \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} - \psi(\mathbf{r}) \frac{\partial \phi^*(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} \right]. \quad (6.49)$$

Itt $L_{\mathbf{r}}$ egy másodrendű differenciáloperátor koordináta-reprezentációban, míg $L_{\mathbf{r}}^\dagger$ ennek az adjungáltja, \mathcal{V} pedig az \mathcal{S} zárt felület által körülhatárolt térfogatot jelöli.

Megjegyezzük, hogy általában a Green-féle azonosságot ennél egyszerűbb alakban szokás megadni, amely nem tartalmaz komplex konjugálást és adjungálást (Lásd például [96] vagy [97]), hiszen többnyire valós függvényterekben működő peremérték problémák megoldására használják. A kvantummechanikai energia-sajátérték egyenlet megoldásánál azonban már komplex függvénytéren dolgozunk, ennek megfelelően elővigyázatosabban kell eljárunk, különös tekintettel a peremföltételekre. A nyílt vég peremföltételével ellátott differenciáloperátor ugyanis nem önadjungált, mert a kapcsolódó peremföltétel elrontja ezt a tulajdonságot.

Az összefüggést háromdimenziós térben írtuk föl, de ebből a számunkra szükséges kétdimenziós alak is könnyen kikövetkeztethető a térfogati integrált felületi integrálra, míg a zárt felületre vett integrált zárt görbére vett integrálra cserélve.

Mint ahogy az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet a kapcsolódó Green-függvény segítségével szeretnénk megoldani egy kiválasztott térrészben, a mi esetünkben az $L_{\mathbf{r}}$ differenciáloperátor az energia és a Hamilton-operátor különbsége, azaz

$$L_{\mathbf{r}} := (\varepsilon + i\eta) \mathbb{1} + \nabla_{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r}), \quad \text{ahol } \eta \rightarrow 0^+. \quad (6.50)$$

Az infinitezimális η segítségével már belekódoltuk az operátorba a nyílt vég peremföltételét.

Legyen tehát $\psi(\mathbf{r})$ a $\Psi_\varepsilon(\mathbf{r})$ energia sajátfüggvény, míg $\phi(\mathbf{r})$ a $G_\varepsilon^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ avanszált Green-függvény és helyettesítsük be őket (6.49)-be. Az energia-sajátérték egyenlet alapján tudjuk, hogy

$$L_{\mathbf{r}} \Psi_\varepsilon(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{és} \quad L_{\mathbf{r}}^\dagger G_\varepsilon^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (6.51)$$

így a bal oldalon megkapjuk a hullámfüggvényt magát

$$- \int_{\mathcal{V}} d^3\mathbf{r} \Psi_\varepsilon(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\Psi_\varepsilon(\mathbf{r}') \quad \text{ha } \mathbf{r}' \in \mathcal{V}. \quad (6.52)$$

A Ψ_ε -re vonatkozó inhomogén peremföltétel esetén a jobb oldali felületi integrál (6.49)-ben nem tűnik el, így G_ε segítségével többet tudhatunk meg Ψ_ε -ről [85]. Kihasználva az

$$[G_\varepsilon^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]^* = G_\varepsilon^R(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \quad (6.53)$$

összefüggést az avanzsált és a retardált Green-függvény között és végrehajtva az $\mathbf{r} \leftrightarrow \mathbf{r}'$ átjelölést kapjuk, hogy

$$\Psi_\varepsilon(\mathbf{r}) = \oint_{\mathcal{S}} d\mathbf{f}' \left[\Psi_\varepsilon(\mathbf{r}') \frac{\partial G_\varepsilon^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} - G_\varepsilon^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_\varepsilon(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] \quad \text{ha } \mathbf{r} \in \mathcal{V}. \quad (6.54)$$

6.6.2. Dobozra megszorított energia-sajátfüggvény és S-mátrix

Fisher és Lee [87], akik nano-struktúrák töltéshordozóival foglalkoztak, levezettek egy összefüggést az S-mátrix elemei és a szórási probléma Green-függvénye között. Itt egy másik levezetést adunk, amely a Green-féle azonosságon alapul és a Dobozra megszorított hullámfüggvényt is megadja.

Alkalmazzuk a 6.6.1. alszakaszban levezetett (6.54) Green-féle azonosságot a kétdimenziós (s, φ) síkon. A \mathcal{B} Doboz belsejében választott $\mathbf{r} = (s, \varphi)$ pontban az energia-sajátfüggvényt megkapjuk a Dobozt körülhatároló $\mathcal{S}_\mathcal{B}$ zárt görbe mentén integrálva:

$$\Psi_\varepsilon(\mathbf{r}) = \oint_{\mathcal{S}_\mathcal{B}} d\mathbf{l}' \left[\Psi_\varepsilon(\mathbf{r}') \frac{\partial G_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} - G_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_\varepsilon(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] \quad \text{ha } \mathbf{r} \in \mathcal{B}. \quad (6.55)$$

Kihasználva $\Psi_\varepsilon(\mathbf{r}')$ -re és $G_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ -re a Dobozt határoló $\mathcal{S}_\mathcal{B}$ görbe mentén érvényes peremföltételeket a fönti integrálás elvégezhető. Ennek eredményeként megkapjuk a hullámfüggvényt a Dobozban a (4.35) bejövő hullám amplitúdóinak és a Dobozra vonatkozó $G_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ -nek az ismeretében.

A (6.55) integrál kiértékelése során először használjuk ki a $\varphi = \pm\pi/2$ -nél érvényes periodikus határföltételt. Ennek köszönhetően a Dobozt a 6.1 ábrán alulról és felülről határoló szakaszok mentén az integrál épp ellentétes előjelű, így csak a Doboz bal és jobb oldala számít. Tehát egy φ' szerinti integrálás marad, miközben az integrandust a \mathcal{B}_L és \mathcal{B}_R határokon kell vegyük:

$$\Psi_\varepsilon(s, \varphi) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi' \left[\Psi_\varepsilon(s', \varphi') \frac{\partial G_\varepsilon(s, \varphi; s', \varphi')}{\partial s'} - G_\varepsilon(s, \varphi; s', \varphi') \frac{\partial \Psi_\varepsilon(s', \varphi')}{\partial s'} \right] \Big|_{\mathcal{B}_L}^{\mathcal{B}_R}. \quad (6.56)$$

Használjuk ki, hogy a szórási problémánk a π periodicitás miatt kvázi-egydimenziós, így a \mathcal{B}_L és \mathcal{B}_R végeken érvényes peremföltételeket föl tudjuk írni külön-külön minden egyes $\phi_m(\varphi)$ módusfüggvényhez. Fejtsük ki tehát a $\Psi_\varepsilon(s, \varphi)$ energia-sajátfüggvényt a teljes ortonormált rendszert alkotó $\phi_m(\varphi)$ -ek segítségével, azaz térjünk át az $|s, \varphi\rangle$ bázisról az $|s, \phi_m\rangle$ bázisra.

$$\Psi_\varepsilon(s, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \psi_m(s) \phi_m(\varphi), \quad \text{ahol} \quad (6.57)$$

$$\psi_m(s) := \langle s, \phi_m | \Psi_\varepsilon \rangle = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \phi_m^*(\varphi) \Psi_\varepsilon(s, \varphi). \quad (6.58)$$

A (4.35) bejövő hullámot föltételezve, a Dobozon kívül a (4.36) és (4.37) aszimptotikus függvényalakok érvényesek, azaz a Doboztól balra és jobbra rendre

$$\psi_l^L(s) = c_l e^{ik_l(s+D)} + r_l e^{-ik_l(s+D)}, \quad \text{ha } s \leq -D, \quad (6.59)$$

$$\psi_l^R(s) = t_l e^{ik_l(s-D)}, \quad \text{ha } s \geq D. \quad (6.60)$$

A számolás egyszerűsítésére mindkét régióban bevezettünk $e^{\pm ik_l D}$ fázisfaktorokat, azaz különböző – az s tengely mentén eltolt – koordináta-rendszereket alkalmazunk a bal és jobb drótokban, úgy hogy azok origója éppen a drót végére esik. Ez a változtatás nem befolyásolja a transzmissziót és a reflexiót, hiszen az csak az r_l és t_l abszolút értékének négyzetét tartalmazza. Hasonló okokból a hullámfüggvény abszolút értékének négyzetét sem befolyásolja.

(6.59)-ből és (6.60)-ból azonnal látszik, hogy $\psi_m(s)$ minden egyes $m \in \{-m_0, \dots, m_0\}$ -ra, rendre az alábbi *inhomogén* peremföltételeknek tesz eleget a bal és jobb oldalon

$$\left. \frac{\partial \psi_m(s)}{\partial s} \right|_{-D} + ik_m \psi_m(-D) = 2ik_m c_m, \quad \left. \frac{\partial \psi_m(s)}{\partial s} \right|_D - ik_m \psi_m(D) = 0. \quad (6.61)$$

A Green-függvény ebben a reprezentációban

$$G_{lm}(s; s') := \langle s, \phi_l | \mathbf{G}(\varepsilon) | s', \phi_m \rangle = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi' \phi_l^*(\varphi) G_\varepsilon(s, \varphi; s', \varphi') \phi_m(\varphi'). \quad (6.62)$$

A szórási probléma Green-függvénye szükségképpen öröklí a hullámfüggvényre vonatkozó (6.61) inhomogén peremföltételek homogén változatát [85], azaz

$$\left. \frac{\partial G_{lm}(s; s')}{\partial s'} \right|_{-D} + ik_m G_{lm}(s; -D) = 0, \quad \left. \frac{\partial G_{lm}(s; s')}{\partial s'} \right|_D - ik_m G_{lm}(s; D) = 0. \quad (6.63)$$

Írjuk ezután át a Green-féle azonosságból adódó (6.56) formulát is az $|s, \phi_m\rangle$ reprezentációba, azaz fejtjük ki a jobb oldalon szereplő $\Psi_\varepsilon(s', \varphi')$ -t (6.57)-nek megfelelően. Megjegyezzük, hogy a kifejtésben a folytonosság miatt véges összegzésnek kell szerepelnie, hiszen a $\Psi_\varepsilon(s', \varphi')$ függvényt a jobb és bal határokon kell vennünk, ahol (4.36) és (4.37) érvényes. Ezután levetítve az egyenlet mindkét oldalát a $\phi_l(\varphi)$ módusfüggvényekre:

$$\psi_l(s) = \sum_{m=-m_0}^{m_0} \left[\psi_m(s') \frac{\partial G_{lm}(s; s')}{\partial s'} - G_{lm}(s; s') \frac{\partial \psi_m(s')}{\partial s'} \right] \Big|_{-D}^D. \quad (6.64)$$

A fönti kifejezésben kihasználva a (6.61) és (6.63) peremföltételeket a parciális deriváltakat ki tudjuk értékelni az $s' = \pm D$ pontokban. Ennek eredményeként a (6.64) egyenlet jobb oldalán szinte minden kiesik és kapjuk, hogy

$$\psi_l(s) = \sum_{m=-m_0}^{m_0} G_{lm}(s; -D) 2ik_m c_m. \quad (6.65)$$

Kihasználva a (6.57) kifejtést és $G_{lm}(s; -D)$ (6.62) definícióját visszatérhetünk koordináta-reprezentációba, így az energia-sajátfüggvény \mathcal{B} Dobozra eső része

$$\Psi_\varepsilon^B(s, \varphi) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi' G_\varepsilon(s, \varphi; -D, \varphi') \left[\sum_{m=-m_0}^{m_0} 2ik_m c_m \phi_m(\varphi') \right]. \quad (6.66)$$

A Dobozra megszorított hullámfüggvény (6.65) alakjának az ismeretében – kihasználva a folytonosságot a Doboz bal és jobb határán – az S -mátrix elemeit már könnyen kiszámíthatjuk. A szórási mátrix elemeinek (4.39) definíciója alapján a (6.59) és (6.60) egyenletek jobb oldalát az alábbi módon átírhatjuk:

$$\psi_l^L(s) = \sum_{m=-m_0}^{m_0} \left[e^{ik_l(s+D)} \delta_{lm} + e^{-ik_l(s+D)} S_{lm}^{LL} \right] c_m, \quad (6.67)$$

$$\psi_l^R(s) = \sum_{m=-m_0}^{m_0} e^{ik_l(s-D)} S_{lm}^{RL} c_m. \quad (6.68)$$

Ezeket az egyenleteket (6.65)-tel összevetve és kihasználva a hullámfüggvény folytonosságát az $s = \pm D$ határokon megkapjuk a S -mátrix és a probléma Green-függvénye közötti kapcsolatot:

$$S_{lm}^{LL} = -\delta_{lm} + 2ik_m G_{lm}(-D, -D), \quad (6.69)$$

$$S_{lm}^{RL} = 2ik_m G_{lm}(D, -D). \quad (6.70)$$

Ez az összefüggés (6.24) kevésbé kompaktul fölírt változata. G_{lm} -et a (6.62) definíció alapján kiértékelve pedig a (6.23) Fisher-Lee formulához jutunk.

6.6.3. Kétdimenziós félvégtelen drót Green-függvénye

Ebben a szakaszban – a teljesség kedvéért – [82] alapján részletekbe menően levezetjük a kétdimenziós félvégtelen drót retardált Green-függvényét. Ez az analitikus eredmény szükséges a 6.1.3. alszakaszban részletesen tárgyalt $\Sigma(\varepsilon)$ sajátenergiás korrekciók meghatározásához. Az alábbi levezetés a mi konkrét szórási problémánknál általánosabban is érvényes, bármilyen jól meghatározott transzverzális módusfüggvény esetén működik, hiszen csak a függvények teljes ortonormáltságát használja ki, a tényleges alakjuk nem számít. A drót szó éppen ezt fejezi ki, hogy a terjedés irányára merőlegesen jól meghatározott diszkrét módusfüggvényeink vannak. Az általánosság kedvéért visszatérünk a dimenziós energia-sajátérték problémához:

$$\left[E + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{M}} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - U(\varphi) \right] \Psi_E(x, \varphi) = 0, \quad (6.71)$$

ahol φ -re bármilyen értelmes peremföltétel megengedett, és fölléphet egy további $U(\varphi)$ csapdázó potenciál is. A koordináta rendszert úgy irányítjuk, hogy a félvégtelen drót a pozitív x irányba álljon és $x = 0$ -ban érjen véget. Könnyen ellenőrizhető, hogy a szorzat alakú

$$\Psi_{\mu,m}(x, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\mu x) \phi_m(\varphi) \quad (6.72)$$

sajátfüggvénye a (6.71) Hamilton-operátornak

$$E_{\mu,m} = \frac{\hbar^2}{2M} \mu^2 + \varepsilon_m \quad (6.73)$$

sajátenergiával és tudja a zárt vég peremföltételt is, azaz $\Psi_{\mu,m}(0, \varphi) = 0$. A forgási módusokra vonatkozó transzverzális egyenlet $\phi_m(\varphi)$ megoldásai pedig teljes ortonormált rendszert alkotnak. Lásd (4.27) az általunk vizsgált esetben.

A Green-függvény (6.3) sajátfüggvények szerinti kifejtését használva, koordináta-reprezentációban az alábbi kifejezésre jutunk

$$G(x, \varphi; x', \varphi') = \frac{2}{L} \sum_{\mu,m} \frac{\phi_m(\varphi) \phi_m^*(\varphi') \sin(\mu x) \sin(\mu x')}{E - \varepsilon_m - \frac{\hbar^2}{2M} \mu^2 + i\eta}. \quad (6.74)$$

Nekünk csak az $x = x'$ esetben van szükségünk a függvény értékére, ahogyan az (6.40)-ből egyértelműen látszik, így a továbbiakban ezt az esetet számoljuk végig. Az μ -ra vonatkozó formálisan írt összegzés valójában integrálást jelent a folytonos μ változóra, azaz $\sum_{\mu} \rightarrow \frac{L}{\pi} \int_0^{\infty} d\mu$.

$$G(x, \varphi; x, \varphi') = \frac{2}{L} \sum_m \phi_m(\varphi) \phi_m^*(\varphi') \frac{L}{\pi} \int_0^{\infty} d\mu \frac{\sin^2(\mu x)}{E - \varepsilon_m - \frac{\hbar^2}{2M} \mu^2 + i\eta}. \quad (6.75)$$

Bevezetve a $k_m^2 := (E - \varepsilon_m) \frac{2M}{\hbar^2}$ és $\delta := \frac{\eta}{E - \varepsilon_m}$ jelöléseket a fönti integrál:

$$I_m(x) := \frac{2M}{\hbar^2} \int_0^{\infty} d\mu \frac{\sin^2(\mu x)}{k_m^2(1 + i\delta) - \mu^2}. \quad (6.76)$$

Az integrál kiszámításához írjuk át $\sin^2(\mu x)$ -et az Euler-formula segítségével:

$$\sin^2(\mu x) = \frac{1 - \cos(2\mu x)}{2} = \frac{2 - e^{i2\mu x} - e^{-i2\mu x}}{4}. \quad (6.77)$$

A (6.77) kifejezés szimmetriáját kihasználva az integrálási határokat megváltoztathatjuk $(0, \infty)$ -ről $(-\infty, \infty)$ -re:

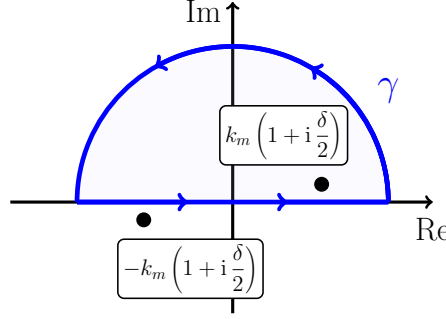
$$I_m(x) = \frac{2M}{\hbar^2} \frac{1}{4} \int_0^{\infty} d\mu \frac{(1 - e^{i2\mu x}) + (1 - e^{-i2\mu x})}{k_m^2(1 + i\delta) - \mu^2} = \frac{M}{2\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \frac{1 - e^{i2\mu x}}{k_m^2(1 + i\delta) - \mu^2}. \quad (6.78)$$

Így az integrált alkalmassá tettük arra, hogy kontúrintegrálós módszerrel kiértékeljük. A szingularitásokat tartalmazó integrandusnak két pólusa van az $\mu_{1,2} = \pm k_m \sqrt{1 + i\delta} \approx \pm k_m \left(1 + i \frac{\delta}{2}\right)$ helyeken. Látjuk, hogy az infinitezimális δ (amely arányos az infinitezimális η -val) kimozdítja a pólusokat a valós tengelyről, ahogyan azt a 6.12 ábrán szemléltetjük. A felső félsíkon a γ kontúr mentén integrálva:

$$\oint_{\gamma} d\zeta \frac{1 - e^{i2\zeta x}}{\mu_1^2 - \zeta^2} = 2\pi i \operatorname{Res} \left(\frac{1 - e^{i2\zeta x}}{\mu_1^2 - \zeta^2}, \mu_1 \right) = 2\pi i \left(-\frac{1 - e^{i2\mu_1 x}}{2\mu_1} \right) \underset{\eta \rightarrow 0^+}{=} \pi i \frac{e^{i2k_m x} - 1}{k_m}, \quad (6.79)$$

hiszen a reziduum

$$\operatorname{Res} \left(\frac{1 - e^{i2\zeta x}}{\mu_1^2 - \zeta^2}, \mu_1 \right) = \operatorname{Res} \left(\frac{1 - e^{i2\zeta x}}{2\mu_1} \left(\frac{1}{\zeta + \mu_1} - \frac{1}{\zeta - \mu_1} \right), \mu_1 \right) = -\frac{1 - e^{i2\mu_1 x}}{2\mu_1}. \quad (6.80)$$



6.12. ábra. A komplex számsíkon a felső félsíkhoz tartozó γ kontúrt választjuk, amely körülöleli a $\mu_1 \cong k_m \left(1 + i \frac{\delta}{2}\right)$ pólust. Ezzel biztosítjuk, hogy a retardált Green-függvényt kapjuk eredményül.

Most már csak annyi a feladatunk, hogy megmutassuk az integrál félkörre eső része konvergál a nullába, ha a kör sugara tart a végtelenbe. Ehhez a kör pontjait $R e^{i\phi}$ módon paraméterezzük.

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow \infty} \left| \int_0^\pi d\phi \, R i e^{i\phi} \frac{1 - e^{i2R e^{i\phi} x}}{k_m^2 - R^2 e^{2i\phi}} \right| &\leq \lim_{R \rightarrow \infty} R \int_0^\pi d\phi \left| \frac{1 - e^{i2R e^{i\phi} x}}{k_m^2 - R^2 e^{2i\phi}} \right| \\ &\leq \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{R}{\sqrt{k_m^4 + R^4 - 2k_m^2 R^2}} \int_0^\pi d\phi \left(1 + e^{-2R x \sin \phi}\right) = 0 \end{aligned} \quad (6.81)$$

Ahol a számlálót és a nevezőt az alábbiak szerint becsültük:

$$\left| 1 - e^{i2R e^{i\phi} x} \right| = \left| 1 - e^{-2R x \sin \phi} e^{i2R x \cos \phi} \right| \leq 1 + e^{-2R x \sin \phi}, \quad (6.82)$$

$$\left| k_m^2 - R^2 e^{2i\phi} \right| = \sqrt{k_m^4 + R^4 - 2k_m^2 R^2 \cos(2\phi)} \geq \sqrt{k_m^4 + R^4 - 2k_m^2 R^2}. \quad (6.83)$$

Tehát a γ kontúr sugarát végtelen nagynak választva éppen a kívánt $I_m(x)$ integrált kapjuk, hiszen a fenti (6.81) értelmében a félkör nem járul hozzá az integrál értékéhez, így

$$I_m(x) = i \pi \frac{M}{2\hbar^2} \frac{e^{i2k_m x} - 1}{k_m} = -\pi \frac{M}{\hbar^2} \frac{\sin(k_m x)}{k_m} e^{ik_m x}. \quad (6.84)$$

Ahol az utolsó tényezőt az Euler-formula segítségével átírtuk.

A félvégtelen drót retardált Green-függvénye tehát (6.75) alapján:

$$G(x, \varphi; x, \varphi') = - \sum_m \frac{2 \sin(k_m x)}{\hbar v_m} \phi_m(\varphi) \phi_m^*(\varphi') e^{ik_m x}, \quad (6.85)$$

ahol bevezettük az egyes módusok $v_m = \frac{\hbar k_m}{M}$ sebességét, amelyet $\hbar v_m = \frac{\partial E}{\partial k_m}$ diszperziós reláció szolgáltat. Ezt a konkrét problémánkra a dimenziótlanított mennyiségekkel alkalmazva (6.19) már könnyen adódik. Megjegyezzük továbbá, hogy a v_m sebesség bevezetése egy „kényelmi” lépés, ami megkönnyíti a helyes dimenziótlan, illetve diszkrét reprezentációban érvényes formulák fölírását.

Összefoglalás

Egy fizikai rendszer kvantummechanikai leírásában alapvető az állapotok szuperpozíciójának lehetősége, melynek következtében összetett rendszerek esetén föllép az összefonódottságnak nevezett jelenség. Összetett rendszer esetén a lehetséges kvantumállapotok Hilbert-tere az egyedi rendszerek Hilbert-tereinek tenzori szorzata, ahol a szuperpozíciós elv miatt olyan állapotok is megengedettek, melyek nem írhatóak föl az egyes részrendszerek egy-egy állapotának egyszerű tenzorszorzataként.

Az összefonódás tehát a tenzorszorzat térbeli állapotokkal leírható kvantumrendszerek általános tulajdonsága, amely megnyilvánulhat függetlenül mérhető objektumok pl. különböző részecskék állapotainak összefonódásaként, vagy egyetlen objektum szabadsági fokainak összefonódásaként is. Dolgozatunk első részében az előbbi míg második részében az utóbbi eshetőséggel foglalkoztunk.

I. rész: Koherens állapotok és összefonódottság

Az összefonódás és a koherens állapotok fogalma külön-külön is lényeges szerepet játszik számos kvantummechanikai probléma esetében, azonban ezek szoros kapcsolatáról az irodalomban szinte alig történik említés. Saját munkánkat megelőzően erre vonatkozóan egyetlen közleményről van tudomásunk Brif és társszerzői részéről [26]. Ők azonban egy összetett rendszer *két részre* bonthatósága szempontjából tettek megállapítást, míg mi egy sokrészű rendszer *teljes* szorzatállapotként való fölírhatóságát vizsgáltuk.

Munkák első részében célul tűztük ki az N qubitese sokrészecske rendszer ún. atomi koherens állapotainak vizsgálatát – a sokrészecskes tenzorszorzat struktúra miatt lehetséges – összefonódottság szempontjából. Bizonyításaink és számításaink során a feladathoz tartozó Hilbert-tér tulajdonságai felől közelítettünk, és a fizikusok számára az impulzusnyomaték elméletéből ismert vagy ahhoz hasonló fogalmakat és érveket használtunk.

A dolgozat első fejezetében röviden fölidéztük a qubitek fogalmát, a rajtuk ható operátorokat és a fölcserélési relációkban kódolt algebrai struktúrát, amely megszabja a kétállapotú modellben lehetséges dinamikát. Ezután az irodalom alapján ismertettük az atomi koherens állapotok konstrukcióját [15] mint a qubit sokrészecske rendszer szimmetrikus alterének speciális állapotait. A qubit rendszerek esetén is adottak a koherens állapot értelmes definíciójához szükséges matematikai föltételek [20]. A szokásos spin operátorok segítségével adott egy Lie-algebra és ezen keresztül egy Lie-csoport struktúra, amelyet a definiáló kétdimenziós Hilbert-téren és ezek tenzorhatványain is ábrázolhatunk. Egy N részecskes qubit rendszer esetén az $SU(2, \mathbb{C})$ Lie-csoportozhoz kötődő, az impulzusnyomaték algebrai elméletéből ismert $\{J_z, J_+, J_-\}$ globális spin operátorok jelennek meg. A koherens állapotokat ezek segítségével lehet definiálni az ábrázolási tér egy alkalmasan választott referencia állapotának folytonosan paraméterezett exponenciális transzformációival.

Saját eredményeinket a második és harmadik fejezetben mutattuk be. A második fejezetben először qubitek sokrészesecske rendszerét vizsgáltuk, ahol Meyer és Wallach globális összefonódási mértékétől inspirálva [28] egy formális kritériumot adunk az N qubites tiszta sokrészesecske rendszer teljes szeparálhatóságára vonatkozóan. A harmadik fejezetben ezt a qubit rendszerre kapott eredményt kiterjesztettük a *quditek* esetére is, azaz arra az esetre, ahol az egyes alrendszerek egy-egy d (véges) dimenziós Hilbert-tér vektoraival írhatóak le. Ezzel új általános formális szeparálhatósági kritériumot adtunk meg az N qudites tiszta sokrészesecske rendszerre. [A2].

Ezen kritériumot fölhasználva először a kétállapotú rendszerek összességének ún. atomi koherens állapotait vizsgáltuk. Igazoltuk azt az állítást, hogy az \mathbb{S} *szimmetrikus altérbeli állapot akkor és csak akkor nem összefonódott, ha koherens állapot* [A1]. Az \mathbb{S} szimmetrikus altéren kívüli, annak \mathbb{S}_\perp ortogonális komplementerébe tartozó állapotokról pedig megmutattuk, hogy *tetszőleges \mathbb{S}_\perp altérbeli vektor összefonódott* [A1].

A d darab ortogonális állapot által alkotott qudit rendszer esetén – a d dimenzió által megszabott módon – megszorodnak a különböző állapotok közt kapcsolatot teremtő léptető operátorok és az állapotokat rendező nulla nyomú diagonális operátorok. A léptető operátorok segítségével a qubiteknél látottakkal analóg módon definiáltuk az $SU(d, \mathbb{C})$ szimmetria esetére általánosított koherens állapotokat. Majd a qubiteknél alkalmazott logikai lépések mentén haladva bizonyítottuk az egyes állítások quditekre vonatkozó általánosítását [A3].

II. rész: Apertúrán áthaladó forgó kétatomos molekula problémája

Ebben a második témában belső struktúrával rendelkező részecske vékony ernyőn lévő apertúrán való szóródásának egyszerű kvantummechanikai modelljét vizsgáltuk abban az esetben, amikor a rés nagysága összemérhető a részecske méretével. A technológiai fejlődés lehetővé tette, hogy a mérettartományok szempontjából hasonló kísérleti szituációt laboratóriumban is vizsgáljanak. Megfigyelték többek között atomok, molekulák és klaszterek résen és rácson való elhajlását és interferenciáját [47, 42, 48]. Ezen kísérletek kapcsán fölmerül az a kérdés, hogy a belső struktúra jelenléte milyen hatást gyakorol a részecske apertúrán való áthaladására, mennyire könnyíti vagy nehezíti azt.

Egyszerű modellünkben belső struktúrának merev rúdként való forgást tételeztünk föl, és a tömegközéppont mozgását az apertúra szimmetriatengelye mentén megszorítottuk, így a mozgásnak két szabadsági foka van. A réstől távol – kölcsönhatás hiányában – a rendszer dinamikáját megadó Hamilton-operátor a két szabadsági foknak megfelelően szeparálható megoldásokat tesz lehetővé. A második részt kezdő negyedik fejezetben az apertúrán áthaladó forgó molekula kvantummechanikai feladatát átfogalmaztuk egy kvázi-egydimenziós stacionárius szórási problémává. A kölcsönhatási régióban a merev forgásként föltételezett belső struktúra és az apertúra kölcsönhatását a hullámfüggvényre kirótt – a klasszikus kényszerekből eredeztetett – peremföltételekkel vettük figyelembe. A vázolt stacionárius szórási probléma megoldása révén megvizsgálható a belső struktúra hatása a beérkező részecskék transzmissziójának energiafüggésére.

A megoldás céljából az ötödik fejezetben analitikus közelítéseket tettünk a kvantummechanikai állapot kölcsönhatási régióbeli alakjára. A forgó-haladó rotor problémához tartozó energiasajátérték egyenletből kiindulva, a forgási és a translációs szabadsági fokokat összezsároló tagok közül a diagonálisakat meghagyva, a translációt leíró kifejtési

együtthatókra vonatkozóan független egyenleteket vezettünk le, amelyekben a peremföltételek hatása egy effektív potenciálként jelentkezik. A transzmisszióra vonatkozó effektív potenciálokhoz illesztett fiktív oszcillátor potenciál segítségével a kölcsönhatási régióban közelítő analitikus megoldást adtunk a stacionárius állapotokra, majd a kapott hullámfüggvény illesztéséből kiszámítottuk a keresett transzmissziót az energia függvényében.

Nem forgó kezdeti állapotú rotor esetén a transzmisszióban rezonanciákat mutattunk ki, amelyek a kvantumos terjedés hullámtulajdonságainak a következményei. A rezonanciák a rotor késleltetett áthaladását jelentik, azaz egy csapdázódási jelenséget írnak le. Ezen rezonanciák energiájára a fiktív oszcillátor potenciál energiasajátértékei segítségével egy a geometriai paramétereiktől függő közelítő formulát is adtunk [A4].

Az alkalmazott elhanyagolások sora azonban csak alacsony energián (nem forgó bejövő molekulák esetén) lehet érvényes, és első látásra még ott is túlegyszerűsítettnek tűnik. Ezért az analitikus eljárás elvégzése után a megoldást egy numerikus módszerrel is ellenőriztük, amely lehetőséget biztosított egyrészt a közelítések ellenőrzésére, másrészt a teljes szórási feladat – tetszőleges bejövő állapot esetén érvényes – megoldására.

A numerikus megoldáshoz, amelyet a hatodik fejezetben ismertettünk, diszkrét rács reprezentációt használtunk, amelynél a bonyolult peremföltételek a megfelelő rácpontok elhagyásával természetes módon figyelembe vehetőek. A nehézséget ezen a ponton a mátrixokká alakuló operátoraink végtelen mérete jelentette. Hasonló feladattal nanoméretű szilárdtest rendszerek kvantumos vezetési tulajdonságainak leírása során találkozhatunk, ahol a szórási problémát az érdekes véges tartomány Green-függvényének megkeresésével oldják meg [82, 83, 88]. Az analógiát kihasználva a periodikus határföltétel miatt szükséges komplex módusfüggvények esetére is részletesen kibontottuk a Green-függvény és az S-mátrix Fisher-Lee relációként ismert kapcsolatát [87].

A probléma megfelelő particionálásával elérhető hogy a Green-függvény ismerete csak a kölcsönhatás szempontjából releváns véges tartományon szükséges, és annak kiszámítása a tartomány eredeti Hamilton-operátorához hozzávett ún. sajátenergiás korrekciók segítségével lehetséges is. A korrekciók – ebben a diszkrét rács reprezentációban – egzaktul figyelembe veszik a leválasztott szabad részekkel való kölcsönhatást [82].

A numerikus számításból nyert adatok segítségével jellemeztük a folytonos spektrumot: megadtuk az állapotsűrűséget (DOS) és a helyi állapotsűrűséget (LDOS) az energia függvényében. Az állapotsűrűség energiafüggésében szintén olyan csúcsok mutatkoznak, amelyek nagy élettartamú rezonáns állapotokra, azaz az áthaladó részecskék csapdázódására utalnak [A5].

A nagy élettartamú rezonáns állapotok közül a legalacsonyabb energiájú a paraméterek alapján azonosnak bizonyult az előzőleg analitikus módszerrel a transzmisszió energiafüggése alapján meghatározott csúccsal. Az állapotsűrűség energiafüggését elemezve megállapítottuk, hogy a rezonanciák osztályozhatóak a bejövő hullám forgásszimmetriájának szempontjából. Az elvégzett numerikus számítások eredményeivel igazoltuk az alacsony energiás analitikus közelítés helyességét, és rámutattunk az analitikus módszer korlátaira is [A5].

Summary

In case of a composite system the Hilbert space of the possible quantum states builds up from the tensor product of the individual Hilbert spaces. Due to the superposition principle we can consider any kind of linear combinations, but not all of them can be factorised into simple tensor product of vectors from the individual spaces. This entanglement property is characteristic of quantum systems described by a tensor product space, and it can appear either in the context of independently measurable particles, or in the context of a single particle with different degrees of freedom. This first kind of entanglement is the subject of the first part of our dissertation, while the latter kind of entanglement is discussed in the second part.

Part I.: Coherent states and entanglement

Both the concept of entanglement and the concept of coherent states play an important role in several quantum mechanical problems, but their strong connection is hardly ever mentioned in the literature. We are aware of only one earlier paper, where Brif et al. [26] pointed out a relation between coherent states and entanglement. They have shown what happens if a system is split into two parts, while we investigate the question of total separability in a multi-partite system.

The aim of the first part of our work was to investigate the atomic coherent states of an N qubit system from the point of view of entanglement or separability. Throughout of our proofs and calculations we relied on the Hilbert space structure of the problem, and used arguments familiar from the theory of angular momentum algebra.

In the first chapter of the dissertation we have shortly recalled the concept of qubits, the operators acting on them, and the algebraic structure coded in their commutation relations determining the possible dynamics in the two-state system. Then in a short survey we have reviewed the construction of atomic coherent states [15] as special states of the symmetric subspace in the multi-partite qubit system. The mathematical conditions for a useful coherent state definition are readily given in the case of a qubit system [20]. The Hilbert-space of one qubit carries the defining representation of the $SU(2, \mathbb{C})$ Lie-group, where the usual spin operators are the elements of the corresponding Lie-algebra. In case of a multi qubit system the tensor product representation enters, and the $\{J_z, J_+, J_-\}$ global spin operators, well known from the algebraic theory of angular momentum, play the crucial role. Coherent states are then defined by continuously parametrized exponential transformations of a reference state.

We presented our results and the proofs in the second and third chapters. First we investigated the multi-partite qubit system in the second chapter, which could be grasped more easily. Here we have given a formal condition of N qubit pure state separability

inspired by an idea behind the entanglement measure introduced by Meyer and Wallach [28]. In the third chapter we generalized this result for the case of *qudits*, where the subsystems were d dimensional Hilbert spaces [A2].

Using this criterion, we investigated the atomic coherent states of multi-partite qubit and qudit systems, as well. We have shown that *a state in the symmetric subspace \mathbb{S} of the composite system is not entangled, if and only if it is a coherent state*. We have also shown, that *an arbitrary state which is an element of \mathbb{S}_\perp (which is the orthogonal complement of the symmetric subspace \mathbb{S}) is always an entangled state* [A1, A3].

Part II. The transmission of a rotating diatomic molecules through an aperture

In the second part of our work, we have investigated a specific physical situation where entanglement between different degrees of freedom emerges. We considered the quantum mechanical scattering of a particle with internal structure, from a single slit in a thin screen. Progress in the experimental techniques has made it possible to study the transmission of particles through apertures, or aperture arrays, where the characteristic size of the projectile is comparable to the aperture. The observed phenomena include the scattering and interference from mechanical gratings of atoms, molecules, and clusters [47, 42, 48]. In connection with these experiments one may address the simple question: what is the effect of the aperture on the transmission of the particle with an internal structure, is the passage enhanced or hindered?

In our simple model we assumed a rigid rotation as internal structure and constrained the centre-of-mass motion to be along the symmetry axis of the aperture, this way the motion had only two degrees of freedom. Far away from the aperture the translational and rotational degrees of freedom are uncoupled, so the energy eigenfunctions of the Hamiltonian separate into a product of a plane wave, corresponding to the centre-of-mass motion, and a transversal mode function of the free rotation. The problem is simplified and reformulated to a quasi one-dimensional scattering problem with unconventional boundary conditions prescribed for the wavefunction through the classical constraints. Our goal was to solve the scattering problem and investigate the effect of the inner structure on the transmission probability of the particles.

In the fifth chapter we obtained results for incident particles of low energy by means of analytic approximations. Starting from a suitable ansatz, we decoupled the translational and rotational motions by preserving only the diagonal coupling terms. Thereby we obtained a set of one-dimensional Schrödinger equations for the hindered translation, which embodied the effect of boundary conditions as *effective potentials*. These effective potentials could be further approximated by a fictitious harmonic oscillator, which allowed us to give an approximate analytic solution for the stationary states in the interaction region. Fitting these solutions to the incoming and outgoing free wavefunctions of the so called leads, we have calculated the transmission coefficient as the function of the energy [A4].

For an initially non-rotating rotor we have found resonances in the transmission, which emerged as the consequence of the wave-like nature of quantum-mechanical propagation. The resonances describe a delayed transmission of the rotor, i.e. they correspond to a trapping phenomenon. We have given an approximate expression for the energies of these resonances by expressing them with the ground state energy of the fictitious oscillator determined by the geometric parameters [A4].

The approximations we used can only be valid for low energy (non rotating) particles, but even in that case they may seem to be oversimplified. The verification of our analytical approximative results necessitated to use a numerical method that enabled us to check the validity of the approximations, as well as to obtain the solution for the whole scattering problem, valid for an arbitrary incoming state.

We introduced a discrete lattice representation in the sixth chapter, where the complicated boundary conditions could be taken into account naturally, using only the lattice points where the wavefunction was declared to be nonzero. Complications in this case still appear, as the matrices of the relevant operators become infinite due to the free regions. A similar problem occurs in the modelling of quantum transport properties of nano-scale solid state systems, where the scattering problem is solved by calculating the Green's function for a relevant finite size region [82, 83, 88]. The Green's function is connected to the S-matrix through the Fisher-Lee relation [87]. Using the above analogy we derived in detail this connection for our case, where the periodic boundary conditions prescribed for the rotation introduced complex transversal mode functions.

By a proper partitioning of the problem, it is possible to show that only a restricted part of the Green's function is necessary to describe the interaction [82]. This restricted part can be calculated by "dressing up" the original Hamilton operator with the so called self-energy corrections. These corrections – though only on a discrete lattice – take into account the effect of the connection with the infinite parts exactly.

The results of our numerical calculations allowed us to characterize the whole continuous spectrum, and we have determined the density-of-states (DOS), as well as the local density-of-states (LDOS) of the system as functions of the energy. In the energy dependence of the density of states we have found peaks again, related to resonances with long lifetimes, i.e. to trapping of the transmitted particles [A5].

Among the resonances with long lifetimes, the one with the lowest energy could be identified with the peak in the energy dependence of transmission found previously by our analytic method. Analyzing the energy dependence of the density of states, the resonances could be classified according to the rotational symmetries of the incoming waves. Our numerical calculations approved the analytic results obtained earlier at low energies, and pointed out the limits of the applicability of the analytic method, as well [A5].

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom témavezetőmnek, Dr. Benedict Mihály egyetemi tanárnak, aki szakmai tanácsaival és emberi támogatásával mindvégig segítette munkámat. Köszönöm, hogy töretlen lelkesedéssel vezetett be a kvantummechanika izgalmas világába és, hogy irodája az évek során mindig egy nyugodt pont volt.

Ezúton szeretném megköszönni az Elméleti Fizikai Tanszék korábbi és jelenlegi vezetőjének Dr. Gyémánt Ivánnak és Dr. Fehér Lászlónak, hogy bíztak bennem és lehetőséget biztosítottak számomra a Ph.D. munkám elkészítéséhez.

Köszönettel tartozom továbbá az Elméleti Fizikai Tanszék jelenlegi és volt munkatársainak, különösen Dr. Földi Péternek, Dr. Czirják Attilának, Dr. Kálmán Orsolyának, Dr. Varga Zsuzsának, Görbe Tamásnak és Szabó Lórántnak, akik hozzájárultak a tanszék támogató légkörének kialakításához. Sokat tanultam tőlük mind az oktató mind a kutató munka kapcsán.

Köszönöm Wolfgang Schleich professzornak (tanszékvezető, Universität Ulm, Institut für Quantenphysik), hogy megszakításokkal több mint egy évet dolgozhattam az intézetében. Köszönöm továbbá Dr Bruce Shore-nak a közös munka cikké formálásában nyújtott lelkes és fáradhatatlan segítségét.

Köszönöm szüleimnek, testvéreimnek és páromnak, akik mindig mellettem voltak és vannak. Végül köszönöm túratársaimnak, akik kellemes társaságukkal felvidítottak akkor is ha néha elcsüggedtem.

Publikációk

- [A1] P. Dömötör and M. G. Benedict, „Coherent states and global entanglement in an N qubit system,” *Physics Letters A*, vol. 372, no. 21, pp. 3792–3795, 2008.
- [A2] P. Dömötör and M. G. Benedict, „Entanglement and coherent states,” *Physica Scripta*, vol. 2009, no. T135, p. 014030, 2009.
- [A3] P. Dömötör and M. G. Benedict, „Global entanglement and coherent states in an N-partite system,” *European Physical Journal D*, vol. 53, no. 2, pp. 237–242, 2009.
- [A4] B. W. Shore, P. Dömötör, G. Süssmann, E. Sadurní, and W. P. Schleich, „Scattering of a particle with internal structure from a single slit,” *New Journal of Physics*, vol. 17, no. 1, p. 013046, 2015.
- [A5] P. Dömötör, P. Földi, M. G. Benedict, B. W. Shore, and W. P. Schleich, „Scattering of a particle with internal structure from a single slit: Exact numerical solutions,” *New Journal of Physics*, vol. 17, no. 2, p. 023044, 2015.

Irodalomjegyzék

- [1] Neumann, J., *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Springer, 1932.
- [2] Bohm, D., *Quantum Theory*, Prentice-Hall, 1951.
- [3] Schrödinger, E., *Naturwissenschaften* **23** (1935) 807.
- [4] Einstein, A., Podolsky, B., and Rosen, N., *Phys. Rev.* **47** (1935) 777.
- [5] Bell, J. S., *Physics* **1** (1964) 195.
- [6] Clauser, J. F., Horne, M. A., Shimony, A., and Holt, R. A., *Phys. Rev. Lett.* **23** (1969) 880.
- [7] Freedman, S. J. and Clauser, J. F., *Phys. Rev. Lett.* **28** (1972) 938.
- [8] Aspect, A., Grangier, P., and Roger, G., *Phys. Rev. Lett.* **49** (1982) 91.
- [9] Weihs, G., Jennewein, T., Simon, C., Weinfurter, H., and Zeilinger, A., *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 5039.
- [10] Feynman, R. P., *International Journal of Theoretical Physics* **21** (1982) 467.
- [11] Nielsen, M. A. and Chuang, I. L., *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [12] Schmidt, E., *Mathematische Annalen* **63** (1907) 433.
- [13] Ekert, A. and Knight, P. L., *American Journal of Physics* **63** (1995) 415.
- [14] Dicke, R. H., *Phys. Rev.* **93** (1954) 99.
- [15] Arecchi, F. T., Courtens, E., Gilmore, R., and Thomas, H., *Phys. Rev. A* **6** (1972) 2211.
- [16] Horodecki, R., Horodecki, P., Horodecki, M., and Horodecki, K., *Rev. Mod. Phys.* **81** (2009) 865.
- [17] Schrödinger, E., *Naturwissenschaften* **14** (1926) 664.
- [18] Glauber, R. J., *Phys. Rev.* **131** (1963) 2766.
- [19] Klauder, J. R., *Annals of Physics* **11** (1960) 123 .
- [20] Gilmore, R., *Annals of Physics* **74** (1972) 391 .

- [21] Perelomov, A. M., Communications in Mathematical Physics **26** (1972) 222.
- [22] Klauder, J. and Skagerstam, B., *Coherent States: Applications in Physics and Mathematical Physics*, World Scientific, Singapore, 1985.
- [23] Perelomov, A., *Generalized Coherent States and Their Applications*, Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [24] Ali, S. T., Antoine, J. P., and Gazeau, J. P., *Coherent States, Wavelets, and Their Generalizations*, Springer, Berlin, 2000.
- [25] Zhang, W.-M., Feng, D. H., and Gilmore, R., Rev. Mod. Phys. **62** (1990) 867.
- [26] Brif, C., Mann, A., and Revzen, M., Phys. Rev. A **57** (1998) 742.
- [27] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., and Laloe, F., *Quantum Mechanics Volume 1-2*, Wiley and Hermann, Paris, 1977.
- [28] Meyer, D. A. and Wallach, N. R., Journal of Mathematical Physics **43** (2002) 4273.
- [29] Plenio, M. B. and Virmani, S., eprint arXiv:quant-ph/0504163 (2005).
- [30] Sanders, B. C., Phys. Rev. A **45** (1992) 6811.
- [31] Humphreys, J., *Introduction to Lie Algebras and Representation Theory*, Springer, 1972.
- [32] Gilmore, R., *Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications*, Dover Publications, 2012.
- [33] Wegmann, C., Die transmissionswahrscheinlichkeit eines langsamen hantelmoleküls durch einen engen spalt, Diplomarbeit, Ludwig-Maximilians Universität, Munich, 1995.
- [34] Dahl, J. P. et al., Laser Physics **15** (2005) 18.
- [35] Adams, C. S., Contemp. Phys. **35** (1994) 1.
- [36] Adams, C. S., Sigel, M., and Mlynek, J., Phys. Repts. **240** (1994) 143.
- [37] Glauber, R. J., Phys Rev **100** (1955) 242.
- [38] Glauber, R. J., Phys Rev **99** (1955) 1515.
- [39] Hillery, M., Mlodinow, L., and Bužek, V., Phys. Rev. A **71** (2005) 062103.
- [40] Herbig, J. et al., Science **301** (2003) 1510.
- [41] Jochim, S. et al., Phys Rev Lett **91** (2003) 240402.
- [42] Kalinin, A., Kornilov, O., Rusin, L., Toennies, J. P., and Vladimirov, G., Phys Rev Lett **93** (2004) 163402.

- [43] Brühl, R. et al., Phys Rev Lett **95** (2005) 063002.
- [44] Kraemer, T. et al., Nature **440** (2006) 315.
- [45] Zaccanti, M. et al., Nature Physics **5** (2009) 586.
- [46] Ferlaino, F. and Grimm, R., Physics **3** (2010) 102.
- [47] Fabre, C., Gross, M., Raimond, J.-M., and Haroche, S., J Phys B **16** (1983) L671.
- [48] Hackermüller, L. et al., Phys Rev Lett **91** (2003) 090408.
- [49] Grisenti, R. E., Schöllkopf, W., and Toennies, J. P., Phys Rev Lett **1** (2000) 4.
- [50] von Neumann, J. and Wigner, E., Phys. Zs. **30** (1929) 465.
- [51] Rauch, J. and Reed, M., Comm. Math. Phys. **29** (1973) 105.
- [52] Reed, M. and Simon, B., *Methods of Modern Mathematical Analysis II*, Academic Press, New York, 1975.
- [53] Simon, B., Annals of Phys **146** (1983) 209.
- [54] Goldhaber, A. S. and Requist, R., Phys Rev A **68** (2003) 012109.
- [55] Wegscheider, W. et al., Phys Rev Lett **71** (1993) 4071.
- [56] Schult, R., Ravenhall, D., and Wyld, H., Phys Rev B **39** (1989) 5476.
- [57] Wegscheider, W., Schedelbeck, G., Abstreiter, G., Rother, M., and Bichler, M., Phys Rev Lett **79** (1997) 1917.
- [58] Schedelbeck, G., Wegscheider, W., Bichler, M., and Abstreiter, G., Science **278** (1997) 1792.
- [59] Exner, P. and Seba, P., J Math Phys **30** (1989) 2574.
- [60] Exner, P. and Seba, P., Phys Lett A **144** (1990) 347.
- [61] Duclos, P. and Exner, P., Rev Math Phys **7** (1995) 73.
- [62] Leboeuf, P. and Pavloff, N., Phys Rev A **64** (2001) 033602.
- [63] Londergan, J. T., Carini, J. P., and Murdock, D. P., *Binding and Scattering in Two-Dimensional Systems. Applications to Quantum Wires, Waveguides and Photonic Crystals*, Springer-Verlag, Berlin, 1999.
- [64] Luna-Acosta, G. A., Na, K., Reichl, L. E., and Krokhin, A., Phys Rev E **53** (1996) 3271.
- [65] Cirone, M. A., Schleich, W. P., and Metikas, G., Z. Naturforsch. A **56** (2001) 48.
- [66] Bittner, S. et al., Phys Rev E **87** (2013) 042912.

- [67] Jensen, H. and Koppe, H., *Annals of Phys* **63** (1971) 586.
- [68] Koppe, H. and Jensen, H., *Sitz Heidelberg Akad Wiss* **5** (1971) 127.
- [69] Tolar, J., *Group Theoretical Methods in Physics*, chapter On a quantum mechanical d'Alembert principle, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [70] Gallas, J. A. C., Schleich, W. P., and Wheeler, J. A., *Appl Phys B* **60** (1995) 279.
- [71] Bestle, J., Schleich, W. P., and Wheeler, J. A., *Appl Phys B* **60** (1995) 289.
- [72] Greenberger, D. M., *Physica B* **151** (1988) 374.
- [73] Lévy-Leblond, J.-M., *Phys Lett A* **125** (1987) 441.
- [74] Rauch, H., Lemmel, H., Baron, M., and Loidl, R., *Nature* **417** (2002) 630.
- [75] Souma, S. and Suzuki, A., *Phys. Rev. B* **65** (2002) 115307.
- [76] Griffiths, D., *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 2 edition, 2005.
- [77] Feshbach, H., *Annals of Physics* **5** (1958) 357.
- [78] Feshbach, H., *Annals of Physics* **19** (1962) 287.
- [79] Callaway, J., *Phys. Rev.* **154** (1967) 515.
- [80] Domcke, W., *Physics Reports* **208** (1991) 97.
- [81] Economou, E., *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer, Berlin, 2006.
- [82] Datta, S., *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [83] Di Ventra, M., *Electrical Transport in Nanoscale Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, 2008.
- [84] Datta, S., *Superlattices and Microstructures* **28** (2000) 253.
- [85] Dennerly, P. and Krzywicki, A., *Mathematics for Physicists*, Dover Publications, New York, 1967.
- [86] Lippmann, B. and Schwinger, J., *Phys. Rev.* **79** (1950) 469.
- [87] Fisher, D. and Lee, P., *Phys. Rev. B* **23** (1981) 6851.
- [88] Ferry, D., Goodnick, S., and Bird, J., *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press, Cambridge, 2nd edition, 2009.
- [89] Caroli, C., Combescot, R., Lederer, D., Nozieres, P., and Saint-James, D., *Journal of Physics C: Solid State Physics* **4** (1971) 2598.

-
- [90] Grisenti, R. E. et al., Phys Rev A **61** (2000) 033608.
 - [91] Grisenti, R. E., Schöllkopf, W., Toennies, J. P., Hegerfeldt, G. C., and Köhler, T., Phys Rev Lett **83** (1999) 1755.
 - [92] Luo, F., Giese, C. F., and Gentry, W. R., J Chem Phys **104** (1996) 1151.
 - [93] Gerlich, S. et al., Nature Phys **3** (2007) 711.
 - [94] Hornberger, K., Gerlich, S., Haslinger, P., Nimmrichter, S., and Arndt, M., Rev Mod Phys **84** (2012) 157.
 - [95] Deiß, M., Drews, B., Deissler, B., and Hecker Denschlag, J., Phys. Rev. Lett. **113** (2014) 233004.
 - [96] Jackson, J., *Classical Electrodynamics*, Wiley, New York, 1999.
 - [97] Kaplan, W., *Advanced Calculus*, Addison-Wesley, 1984.