1. MÉRÉSELMÉLET

Korábbi tanulmányainkban megismerkedtünk a kvantummechanika alapjaival, elméleti apparátusával és számos gyakorlati következményével.

Jelen fejezetben mélyebb bepillantást nyerünk a kvantummechanika méréselméletébe, amelyet korábban a fizikai mérés alaptörvénye kapcsán röviden már érintettünk. Most látni fogjuk, hogy a mérés elmélete összetettebb. Az állapot és mennyiség fogalmának különválasztása lehetőséget teremtett a mérés folyamatának részletesebb analízisére. A külső szemlélőben ugyanis joggal vetődhetnek fel különböző kérdések. Vajon a mérés valószínűségi értelmezése nem csupán tudásunk elégtelen voltát tükrözi-e? A mérés során bekövetkező ún. 'hullámfüggvény redukció' nem csupán ismereteink hiányát jelenti-e? Léteznek-e – ezen tudáshiányt pótlandó – ún. 'rejtett paraméterek', amelyek a méréselmélet egyik nyugtalanító pontját, a kvantumállapot mérés során bekövetkező hirtelen változását, redukcióját, az oksági logika szintjén próbálják magyarázni?

Ezen kérdések megválaszolására kerül sor ebben a fejezetben. Fogjuk látni, hogy – bár tudásunk nyilvánvalóan véges – a mérések valószínűségi jellege nem ismeretünk hiányából fakad, hanem az a fizikai állapotok elidegeníthetetlen, inherens tulajdonságát fejezi ki. A Bell egyenlőtlenségek kapcsán pedig megértjük, hogy a kvantummechanika V. axiómájaként számon tartott állapotváltozást, a mérés következtében létrejövő hullámfüggvény redukciót rejtett paraméterek segítségével nem sikerülhet megmagyarázni, mert ilyen paraméterek nem léteznek.

1.1. KVANTUMMECHANIKA AXIÓMÁI

A kvantummechnika öt axiómán nyugszik.

I. axióma: Egy fizikai állapotnak egy absztrakt Hilbert-térbeli állapotvektor felel meg. Az absztrakt állapotvektor jele általában a ket : $|\,\rangle$. Egy konkrét állapot pl. a

$$|\psi\rangle.$$

II. axióma: Egy fizikai mennyiségnek egy absztrakt, Hermitikus operátor felel meg. Az 'A' fizikai mennyiség megfelelője az

$$A = A^\dagger$$

Hermitikus operátor.

Ebből következik a matematikai tételek alapján a valós sajátértékek és a sajátérték egyenletek léte: $A|n\rangle = a_n|n\rangle$; a teljesség: $1 = \sum |n\rangle\langle n|$; a kifejtés: $|\psi\rangle = \sum c_n|n\rangle$; valamint az operátorok esetleges nemfelcserélhetősége.

III. axióma: Kimondja, hogy az A fizikai mennyiség a_n mért értékei csak a sajátértékek lehetnek, valamint azt, hogy a mért értékek középértéke a várható érték:

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = \overline{A}$$

$\equiv \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\sum_n N_n a_n$.

Így ez az axióma, az előzővel ötvözve, kiadja a fizikai mérés alaptörvényét: $W(a_n) = |c_n|^2$ (amelyet szoktak III. axiómaként is említeni), továbbá a bizonytalansági relációk is levezethetők.

IV. axióma: Az állapotvektor dinamikai változását a Schrödinger egyenlet írja le:

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H)|\psi\rangle = 0.$$

V. axióma: A $|\psi\rangle$ állapot az A fizikai mennyiség mérése alkalmával az A operátor egyik kvantumállapotába ugrik be:

$$|\psi\rangle \to |n\rangle,$$

ahol $A|n\rangle = a_n|n\rangle$ érvényes.

Ezek az axiómák elegendők a kvatummechanika körébe tartozó összes jelenség ellentmondás mentes és kvantitatív magyarázatához.

1.2. TISZTA ÁLLAPOT, KEVERT ÁLLAPOT

Alapozó tanulmányainkban már beszéltünk *tiszta* és *szuperponált* állapotokról. Mint látni fogjuk, a mérés szempontjából ez a kétfajta állapot azonos és ezért a továbbiakban nem teszünk különbséget tiszta és szuperponált állapotok között. A fizikai rendszert ebben az esetben csak egyfajta állapot, a $|\psi\rangle$ jellemzi, amely tehát több állapot szuperpozíciójából is összetevődhet: $|\psi\rangle = \sum c_n|n\rangle \quad (\sum |c_n|^2 = 1)$.

Más a helyzet akkor, amikor olyan fizikai rendszerünk van, amelyben többféle $|\psi_i\rangle$ állapot keveredik p_i valószínűséggel ($\sum p_i = 1$). Fizikai rendszerünk ilyen állapotát *kevert* állapotnak nevezzük, amelyet tehát nem lehet egyetlen pszi-vel jellemezni.

Összefoglalva:

tiszta állapotban	kevert állapotban
$\lvert\psi\rangle = \sum c_n\lvert n\rangle,$	$\lvert\psi_1\rangle, \lvert\psi_2\rangle, ..., \lvert\psi_N\rangle,$
ahol $\sum \lvert c_n\rvert^2 = 1,$	$p_1, p_2, ..., p_N; \quad \sum p_i = 1.$

Egy fizikai rendszeren végzett mérés szempontjából fontos szerepe lesz a *sűrűségoperátor*nak, amelyet

tiszta állapotban a	kevert állapotban a
$\rho \equiv \lvert\psi\rangle\langle\psi\rvert,$	$\rho \equiv \sum_{i=1}^{N} p_i\lvert\psi_i\rangle\langle\psi_i\rvert = \sum_{i=1}^{N} p_i\rho_i$

képlettel definiálunk.

Ismétlésképpen visszaidézzük, hogy egy X operátor nyomát (németül 'Sp'=Spur, angolul 'Tr'=trace) a következő definíció szerint képezzük:

$$\mathrm{Sp}\, X \equiv \sum_n \langle n|X|n\rangle,$$

ahol $\{|n\rangle\}$ egy tetszőleges ortonormált és teljes ($\sum |n\rangle\langle n| = 1$) rendszert jelöl.

Mármost könnyen belátható, hogy az A fizikai mennyiség mérési átlagértéke a ρA operátor nyomaként áll elő:

tiszta állapotban | kevert állapotban

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \mathrm{Sp}\, \rho A, \qquad \langle A \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle = \mathrm{Sp} \sum_i p_i \rho_i A = \mathrm{Sp}\, \rho A.$$

Látjuk tehát, hogy mind tiszta, mind kevert állapotban, formailag azonos kifejezés állítja elő a mérési átlagértéket. Ilyen módon tehát nem dönthetünk afelől, hogy fizikai rendszerünk tiszta (csupán egyféle) állapotokból, vagy többféle állapotok bizonyos (p_i) valószínűségű kombinációiból áll-e. Mérési eredményünkre viszont kihatással lehet az állapot milyensége, mint azt a későbbiekben látni fogjuk.

Megvizsgálhatjuk magának a sűrűségoperátornak a nyomát is. Amint az könnyen belátható, a sűrűségoperátor definícióból következő sajátossága az, hogy hermitikus és nyoma az egység:

$$\rho = \rho^\dagger, \qquad \mathrm{Sp}\, \rho = 1,$$

mindkét típusú állapotra. A sűrűségoperátor négyzete viszont már eltérést fog mutatni a tiszta és kevert állapotok esetén. Ugyanis

tiszta állapotban: | kevert állapotban:

$$\rho^2 = \rho, \quad \text{azaz} \quad \mathrm{Sp}\, \rho^2 = 1, \qquad \text{de} \qquad \rho^2 \neq \rho \quad \text{és} \quad \mathrm{Sp}\, \rho^2 < 1$$

könnyen belátható.[1]

[1] Lássuk be pl. a $\mathrm{Sp}\rho^2 < 1$ összefüggést:

$$\mathrm{Sp}\, \rho^2 = \sum_n \langle n | \sum_{ij} p_i p_j | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi_j \rangle \langle \psi_j | n \rangle =$$

$$\sum_{ijn} p_i p_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle \langle \psi_j | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle =$$

$$\sum_{ij} p_i p_j |\langle \psi_i | \psi_j \rangle|^2 < \sum_{ij} p_i p_j = (\sum_i p_i)(\sum_j p_j) = 1 \cdot 1 = 1$$

Eddigi vizsgálatainkat összegezve megállapíthatjuk tehát, hogy mérés szempontjából rendszerünknek tiszta állapotban *látszólagos* (inherens, v. látens) statisztikus jellege van, amely objektív, mert tőlünk független, és a tiszta állapotok elidegeníthetetlen tulajdonságából fakadva a c_n kifejtési együtthatókon keresztül jelenik meg ($\sum |c_n|^2 = 1$). Kevert állapotban viszont a fizikai rendszert *valódi* statisztikus tulajdonságok is jellemzik, amelyek a p_i valószínűségekben fejeződnek ki ($\sum p_i = 1$). Minthogy ezen p_i-k a rendszerről szerzett tudásunk, ismeretünk elégtelenségét tükrözi, a kevert állapotoknak szubjektív eleme is van.

Tiszta állapotban: kevert állapotban:

$$|\psi\rangle = \sum c_n|n\rangle \to \langle A\rangle = \sum |c_n|^2 a_n, \quad \langle A\rangle = \sum_i p_i\langle\psi_i|A|\psi_i\rangle = \sum_i p_i\langle A\rangle_i.$$

1.3. EGY RÉSZRENDSZER ESETE

1.3.1. S-$\frac{1}{2}$ rendszerek

Álljon fizikai rendszerünk egyetlen (rész)rendszerből, pl. csak feles spinű állapotokból.

Válasszunk egy tetszőleges ortonormált bázist, amely szerint egy operátor nyomát képezzük. Feles spinoperátor, $\mathbf{S}= \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, esetén lehetnek a bázis elemek pl. a Pauli operátorok[1] $z-$komponensének sajátálapotai. Ezekre többféle jelölést használnak az irodalomban:

$$\chi_+ \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |\uparrow\rangle \equiv \alpha \equiv |+\rangle \equiv \chi_{1/2}^{1/2} = |n\rangle$$

és

$$\chi_- \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |\downarrow\rangle \equiv \beta \equiv |-\rangle \equiv \chi_{1/2}^{-1/2} = |m\rangle.$$

Képezhetünk tiszta állapotokat:

$$|\uparrow\rangle,\ |\downarrow\rangle,\ \text{vagy}\ |\ \rangle_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle + e^{i\alpha}|\downarrow\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix}.$$

---

[1]

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

[Vegyük észre, hogy ezen utóbbi (szuperponált) tiszta állapot α megfelelő megválasztásával σ_x, ill. σ_y sajátállapotait állítja elő ($\alpha = 0$, ill. $\alpha = \pi/2$).]

Mármost képezhetjük a megfelelő sűrűségoperátorokat (matrix reprezentációban sűrűségmatrixnak hívjuk őket):

$$\rho_\uparrow = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1\,0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \rho_\uparrow^2,$$

$$\rho_\downarrow = |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0\,1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \rho_\downarrow^2,$$

és

$$\rho_\alpha = |\,\rangle_{\alpha\;\alpha}\langle\,| = \frac{1}{2}\left(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + e^{i\alpha}|\downarrow\rangle\langle\uparrow| + e^{-i\alpha}|\uparrow\rangle\langle\downarrow|\right)$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix} = \rho_\alpha^2$$

Elektronsugárral megvalósíthatunk olyan fizikai rendszert is, amelyben az elektronnyaláb felének felfelé mutató, másik felének lefelé mutató spinje van. Az ilyen állapot kevert állapot lesz, a megfelelő sűrűségmatrix pedig:

$$\rho_G = \frac{1}{2}\rho_\uparrow + \frac{1}{2}\rho_\downarrow = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \neq \rho_G^2 = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Mérési eredményekre kihatással lehet az, hogy rendszerünk tiszta vagy kevert állapotban van-e.

Legyen ugyanis a mérendő fizikai mennyiség $A = \sigma_x$. A középértékek a ρ_α és ρ_G sűrűségmatrixokkal jellemzett tiszta, ill. kevert állapotokban egyszerű számolással adódnak:

$$\langle A\rangle_\alpha = \mathrm{Sp}\,\rho_\alpha\,\sigma_x = \mathrm{Sp}\,\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & 1 \\ 1 & e^{i\alpha} \end{pmatrix} = \mathrm{Re}\,e^{i\alpha} = \cos\alpha \neq 0, \text{ ha}\,\alpha \neq \frac{\pi}{2},$$

viszont

$$\langle A\rangle_G = \mathrm{Sp}\,\rho_G\,\sigma_x = \mathrm{Sp}\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 0.$$

Tehát különböző fizikai állapotokban levő fizikai rendszer különböző eredményt szolgáltat az átlagértékre, s így mérést konstruálhatunk annak eldöntésére, hogy egy állapot tiszta, vagy kevert volt-e a mérés pillanatában. (Az egyedi mérések után, a mérési eredménytől függően, a rendszer σ_x sajátállapotba kerül, ld. következő alfejezetek.)

Azonban nem bármely fizikai mennyiség mérése nyújt lehetőséget a kiinduló állapot tiszta, vagy kevert voltának eldöntésére. Mérjük meg ugyanis a spin $z-$komponensének várható értékét. Az eredmény $(A = \sigma_z)$

$$\langle A\rangle_\alpha = \mathrm{Sp}\,\rho_\alpha\,\sigma_z = \mathrm{Sp}\,\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\begin{pmatrix} 1 & -e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & -1 \end{pmatrix} = 0$$

és

$$\langle A\rangle_G = \mathrm{Sp}\,\rho_G\,\sigma_z = \mathrm{Sp}\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 0$$

azonos mindkét típusú állapot esetén.

Figyeljük meg, hogy olyan esetben nem tudunk méréssel dönteni az állapot tiszta, vagy kevert volta felől, ha olyan mennyiséget mérünk, amely sajátállapotaiból tevődik össze a rendszer állapota. Ha olyan mennyiséget mérünk, amelynek nem sajátállapotai a rendszert felépítő állapotok (azaz a két fizikai mennyiség – a mérendő és a rendszer összetevőket generáló fizikai mennyiség – nem felcserélhető egymással), akkor lesz különbség a tiszta ill. kevert állapotú rendszeren elvégzett mérés között. Utóbbira példa a σ_x mérése, előbbire a σ_z mérése.

1.3.2. Spinpolarizáció

A legáltalánosabb $2\times 2-$es sűrűségmatrix a következő alakban írható:

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + \vec{b}\,\vec{\sigma}),$$

ahol $\vec{b}$ egy tetszőleges vektor állandó. Könnyen belátjuk, hogy ez valóban sűrűségmatrix ($\rho = \rho^+$ és $\mathrm{Sp}\,\rho$=1), és

$$\langle\vec{\sigma}\rangle_\rho = \mathrm{Sp}\,\rho\,\vec{\sigma} = \vec{b}.$$

Az általánosság megszorítása nélkül vehetjük $\vec{b}$-t a z-tengely irányába, azaz legyen $\vec{b} = (0, 0, b)$. Ekkor

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + b\,\sigma_z) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+b & 0 \\ 0 & 1-b \end{pmatrix}.$$

Minthogy a sűrűségmatrix diagonális elemei valószínűségeknek felelnek meg, kell hogy $(1 \pm b)/2 \leq 1$ legyen, azaz $|b| \leq 1$.

Feltehetjük a kérdést: mely esetben jellemez a fenti általános sűrűségmatrix tiszta állapotot? Ehhez kiszámítjuk a négyzetét. Az eredmény:[1]

$$\rho^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1+b^2}{2} + \vec{b}\,\vec{\sigma}\right).$$

Láthatjuk tehát, hogy ρ csak abban az esetben jelent tiszta állapotot ($\rho^2 = \rho$), ha $|\vec{b}| = b = 1$. Az ilyen állapotot teljesen polarizált állapotnak hívjuk. (A spin ilyenkor $\vec{b}$ irányba 'mutat'.) Minden más esetben kevert állapottal van dolgunk. Pl. $b = 0$ egy olyan kevert állapotot jelent, amelyben 50%-ban felfelé, 50%-ban lefelé mutató spinű állapotok keverednek (ld. előző pont).

Fentiekből nyilvánvalóak az elnevezések: $\vec{b}$ a polarizációs vektor, $|\vec{b}|$ a polarizáció foka.

1.4. KÉT RÉSZRENDSZER ESETE

Mérés esetén mindig legalább két részrendszerrel van dolgunk: az 'A' mérőberendezéssel és az 'O' mérendő objektummal. A később részletesen tárgyalandó Stern-Gerlach kísérletben a fizikai rendszer két alrendszer (részrendszer) együttesének fogható fel. Az egyik alrendszer a z-koordináta sajátállapotokkal jellemezhető; ez a berendezés 'mutatójának' fogható fel, amely a nyaláb makroszkopikus eltérülését jelzi. A másik alrendszer a spin sajátállapotokkal jellemezhető; ez a mérendő mikroszkopikus objektum.

---

[1] Felhasználtuk a Pauli matrixok ismert tulajdonságait:

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k,$$

$$(\vec{\sigma}\,\vec{a})(\vec{\sigma}\,\vec{b}) = \vec{a}\,\vec{b} + i\vec{\sigma}(\vec{a} \times \vec{b}).$$

1.4.1. Mérés, amely csak az egyik részrendszert érinti

Tegyük fel, hogy az egyes részrendszerek (alrendszerek) lehetséges állapotai a következők:

$$\psi(1) = \{|1n\rangle\}, \qquad \psi(2) = \{|2m\rangle\}.$$

Tiszta (szuperponált) állapotban a rendszer állapota legáltalánosabban a

$$|\psi\rangle = \sum_{nm} c_{nm} |1n\rangle|2m\rangle$$

formában írható, ahol a két alrendszer kölcsönhatására jellemző c_{nm} szuperpozíciós együtthatókra az alrendszer állapotok ortonormáltsága és a ψ normáltsága miatt

$$\sum_{nm} |c_{nm}|^2 = 1$$

megszorítás áll fenn.

Rendszerünk sűrűségoperátora

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|,$$

amelyre természetesen igazak a tiszta állapotokat jellemző kritériumok:

$$\rho^2 = \rho, \qquad \text{és} \qquad \mathrm{Sp}\,\rho^2 = 1.$$

Mármost, ha olyan mérést végzünk, amely csak az egyik alrendszert érinti, azaz az 'A' mérendő fizikai mennyiségnek megfelelő A operátor (pl. $A = z$ a Stern-Gerlach kísérletben) csak $|1\rangle-$re hat, akkor a mérés átlagértéke az előzőekben megismert szabályok szerint adódik:

$$\langle A_1\rangle = \mathrm{Sp}_{1,2}\,\rho A_1 = \mathrm{Sp}_1\,\mathrm{Sp}_2\,\rho A_1 = \mathrm{Sp}_1\left[\left(\mathrm{Sp}_2\,\rho\right)A_1\right] \equiv \mathrm{Sp}_1\,\hat{\rho}_1 A_1,$$

ahol bevezettük a

$$\hat{\rho}_1 \equiv \mathrm{Sp}_2\,\rho$$

sűrűség matrixot, amely az $1-$es részrendszerre vonatkozó minden mérést jellemez. ($\mathrm{Sp}_{1,2}$ az alrendszereket jellemző bázis állapotok szerint képzendő.)

Ez a (redukált) sűrűségmatrix általában *nem* tiszta álapotot jellemez: $\hat{\rho}_1 \neq \hat{\rho}_1^2$ (általában). Annak viszont, hogy egy rendszer tiszta vagy kevert állapotban van-e a mérés előtt, mérési konzekvenciái vannak.

Az A_1 fizikai mennyiség mérése alkalmával történő

$$\rho_{1,2} \xrightarrow{A_1} \hat{\rho}_1$$

sűrűségmatrix redukció a kvantummechanika V. axiómájának mélyebb megértését teszi lehetővé. Ugyanis

tiszta állapot $\to$ kevert állapot

átmenet történik (általában) az A_1 fizikai mennyiség mérése szempontjából.

Megvizsgálhatjuk, mely esetben találja mérőberendezésünk tiszta állapotban a mérendő alrendszert. Könnyen beláthatjuk, hogy a

$$\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_1^2$$

tiszta állapotra utaló összefüggés csak abban az esetben teljesül, ha

$$|\psi\rangle = |\psi(1)\rangle|\psi(2)\rangle,$$

azaz, ha a két alrendszer egymástól független. Ez azt jelenti, hogy egymással nincsenek kölcsönhatásban. Ekkor az is igaz, hogy $\rho = \rho_1\rho_2$ és külön-külön $\rho_1 \equiv |\psi(1)\rangle\langle\psi(1)| = \rho_1^2$ és $\rho_2 \equiv |\psi(2)\rangle\langle\psi(2)| = \rho_2^2$ is igaz. A c_{nm} kifejtési együtthatókra mindez azt jelenti, hogy ezen kölcsönhatásmentes részállapotok esetén az együtthatók faktorizálhatók, $c_{nm} = b_n d_m$, ahol $\sum |b_n|^2 = \sum |d_m|^2 = 1$, mert $|\psi(1)\rangle = \sum b_n|n\rangle$ és $|\psi(2)\rangle = \sum d_m|m\rangle$. Viszont, legalább is, ha mérni akarunk, a részrendszerek (mérőberendezés és mérendő objektum) között *van* kölcsönhatás, így a kvantummechanikai objektum mérés szempontjából általában kevert (tehát valódi statisztikus jelleget hordozó) állapotban van. Mindez szépen illusztrálható a Stern-Gerlach kísérlet révén.

1.5. STERN-GERLACH KÍSÉRLET

Tekintsük az 1.1 ábrát, ahol az azonos elektronállapotokat generáló forrásból $+y$ irányba kirepülő elektronok $z-$irányú $B(z)$ inhomogén mágneses téren haladnak keresztül és egy felfogó ernyőbe csapódnak be.

1.1 ábra. A Stern-Gerlach kísérlet elrendezése.

Mérendő objektumunk az elektron spinje. A spinállapotok bázisterét kifeszíti a σ_z spinoperátor két sajátvektora: $|\pm\rangle$. Mérő berendezésünk az ernyő, amely az elektron $z-$ koordinátájának a sajátértékét méri. A bázis tehát, ami szerint a nyomot képezzük, az elektron $\hat{z}$ koordináta operátorának $|z\rangle$ sajátállapota lesz.

Az előzőeknek megfelelően tehát, a teljes elektronállapot két részrendszer szuperpozíciójából tevődik össze: a $z-$irányú mozgást leíró, az elektron *helyét* jellemző $f(z,t)$ hullámcsomagból, és az elektron *spinjét* jellemző χ spinállapotból. A két komponens (részállapot, alrendszer) közti csatolást (kölcsönhatást) a $B(z)$ inhomogén mágneses tér létesíti.

Az elektronállapotot meghatározó energiaoperátor

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + B(z)\mu_B\sigma_z.$$

Legyen az elektron kezdeti állapota

$$\langle z|\psi(0)\rangle \equiv \psi(z,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_+ + \chi_-\right) f(z).$$

Itt $f(z)$ az elektron térbeli elhelyezkedését megadó hullámcsomag, a spin pedig éppen a $+x$ irányba 'mutat'.

A t időpillanatbeli (mérés előtti) végállapotot H segítségével határozhatjuk meg:

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(0).$$

Elvi nehézséget nem tartalmazó számolás után kapjuk a végeredményt:

$$\langle z|\psi(t)\rangle \equiv \psi(z,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_+ f(z+Ct^2)e^{-i\alpha t} + \chi_- f(z-Ct^2)e^{i\alpha t}\right),$$

ahol $\alpha = B(z)\mu_B/\hbar$, $C = -B'(z)\mu_B/2m$. Itt az első tag a lefelé ($-z$ irányú), a második pedig a felfelé ($+z$ irányú) elmozdulást jelöli.

Tekintettel arra, hogy csak makroszkópikus szétválást tudunk detektálni, szükséges az, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(z+Ct^2)f(z-Ct^2)\,dz = 0$$

legyen (műszerünk makroszkópikus méretekkel rendelkezik).

Előállítjuk a sűrűségmatrix egy 4×4-es blokkját:

$$\rho_{zz'} = \langle \pm | \langle z | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | z' \rangle | \pm' \rangle \equiv$$

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} f(z+Ct^2) f^*(z'+Ct^2) & f(z+Ct^2) f^*(z'-Ct^2) e^{-i2\alpha} \\ f(z-Ct^2) f^*(z'+Ct^2) e^{i2\alpha} & f(z-Ct^2) f^*(z'-Ct^2) \end{pmatrix}.$$

(Az 1/2-es faktor eredete jól látszik: a hullámfüggvény normálása.)

Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy állapotunk tiszta:

$$\rho^2_{zz'} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dz'' \rho_{zz''} \rho_{z''z'} = \rho_{zz'}.$$

Ennek így is kell lennie, hiszen az elektronállapotot egyetlen hullámfüggvény írja le.

Ha viszont mérünk, detektáljuk az elektronok becsapódási helyét, a helyzet megváltozik; beavatkozunk a tiszta állapotba.

Detektáljuk a részecskéket mindenütt, a $+z$ és a $-z$ irányban egyaránt! Ekkor a sűrűségmatrix nyomát a teljes z tartományban (mindenhol, ahova az ernyőt raktuk) kell képezni:

$$\mathrm{Sp}_z\, \rho \equiv \hat{\rho} = \int_{-\infty}^{\infty} dz\, \rho_{zz} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \rho_G \neq \rho_G^2.$$

Tehát a mérés hatására kevert állapotba kerül a rendszer, méghozzá olyanba, amelyben 50%-ban $\uparrow$, 50%-ban $\downarrow$ irányú spinű állapotokból van összekeverve. Minden, csak a spinre vonatkozó $F(\vec{\sigma})$ fizikai mennyiség mérése kevert spinállapotra utaló sűrűségmatrixszal kapcsolatos, azaz

$$\langle F(\vec{\sigma}) \rangle = \mathrm{Sp}_{z\pm}\big(\rho F(\vec{\sigma})\big) = \mathrm{Sp}_{\pm}\big(\hat{\rho} F((\vec{\sigma})\big).$$

Mérjünk most csak a $+z$ irányban! (Ernyő csak a $+z$ félsíkon van.) Ekkor

$$\mathrm{Sp}_{z\geq 0}\, \rho \equiv \hat{\rho} = \int_{0}^{\infty} dz\, \rho_{zz} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \rho_{\downarrow} = \frac{1}{2} \rho_{\downarrow}^2,$$

azaz tiszta állapotot kaptunk, méghozzá olyat, amely $\downarrow$ állapotú elektronokat jelent. (Az 1/2-es valószínűségi faktor eredete a későbbiekben válik világossá.)

Mérés révén tehát előállhat

$$\text{tiszta} \to \text{kevert},$$

ill.

$$\text{tiszta} \to \text{tiszta}$$

állapotváltozás s ez lehetőséget nyújt arra, hogy mélyebb bepillantást nyerhessünk az V. axióma 'működésébe'.

1.6. ÁLTALÁNOS MÉRÉSELMÉLET

Ezek után egyszerűen összefoglalhatjuk az általános mérést jellemző történéseket, a mérés hatására bekövetkező állapotváltozásokat. Könnyen eloszlathatjuk a "Schrödinger macskája" néven híressé vált gondolat kísérlettel kapcsolatos félreértéseket.*

A mérés szempontjából világunk állapotát három részegységre oszthatjuk fel:

az $|O\rangle$ – objektum állapotára, amely általában mikroszkópikus s így az n kvantumszámok jellemzik (példaként gondoljunk a $\beta-$részecske spinjére $n = \pm 1$);

az $|A\rangle$ – műszer állapotára, amely makroszkópikus és így az O két különböző állapotát kijelző $|A(n)\rangle$, ill. $|A(m)\rangle$ állapota szükségszerűen ortogonális egymásra:

$$\langle A(n)|A(m)\rangle = \delta_{nm}.$$

(Példa itt a macska állapota, amely élő, vagy halott lehet);

* Ebben a gondolat kísérletben egy macskát dobozba zárnak egy $\beta-$sugárzó radioaktív preparátummal és egy olyan nyaktilóval együtt, amely működik, ha $\uparrow$ spinű elektron találja el, nem működik, ha $\downarrow$ elektron megy át rajta. A rosszul megfogalmazott probléma a következő: mindaddig, amíg nem nyitjuk ki a dobozt, nem avatkozunk be a zárt rendszer állapotába, az tiszta állapotban fejlődik az időben, hullámfüggvénye élő és elpusztult macska állapotok szuperpozíciójából tevődik össze, jóllehet a $\beta-$bomlás közben megtörténik. Mikor következik be a hullámfüggvény redukciója, azaz mikor dől el, hogy a macska életben maradt-e, vagy elpusztult-e; akkor, amikor kinyitjuk a dobozt, s ezáltal beavatkozunk a hullámfüggvény szabad fejlődésébe? Ha igen, mint ahogy tévesen hitték a kvantummechanikai méréselmélet interpretálása hajnalán, akkor az súlyos ismeretelméleti és egyéb következményekkel járhatna a mérés tudatunktól független objektív megvalósulására nézve. (A probléma megoldását, mint látjuk, a környezet figyelembevétele jelentette.)

végül a Z – környezet állapotára, amely nem elhanyagolható, és mindig jelenlevő (példánkban a nyaktiló, egyéb mechanizmusok, és a doboz fala valósítja meg).

A kezdeti állapotban a világ (doboz, macska, preparátum, nyaktiló stb.) állapotát megadó hullámfüggény a következőképpen írható:

$$t = 0 \qquad |\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |O, n\rangle |A\rangle |Z\rangle.$$

A kölcsönhatások miatt ez a kezdeti tiszta állapot szuperponált tiszta álapotba fog fejlődni:

$$t = t \qquad |\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |O, n\rangle |A(n)\rangle |Z(n)\rangle.$$

Mármost háromféle mérési eshetőség képzelhető el:

1) Nem olvassuk le $Z-$t, nem vagyunk figyelemmel a környezetre (a gyakorlatban természetesen mindig ez van). Ezért az "objektum+műszer" (eletronspin+macska) rendszer kevert állapota áll elő,

$$\mathrm{Sp}_Z\, \rho = \hat{\rho} = \sum |c_n|^2 |A(n)\rangle |O, n\rangle \langle O, n| \langle A(n)| \neq \hat{\rho}^2,$$

ugyanis $\langle Z(n)|Z(m)\rangle = \delta_{nm}$ a makroszkópikusság miatt.

Tehát N db ilyen (spin+macska) azonos részrendszer úgy viselkedik, mint

$N_1 = N|c_1|^2$ db részrendszer az $|O, 1\rangle |A(1)\rangle$ állapotban,

$N_2 = N|c_2|^2$ db részrendszer az $|O, 2\rangle |A(2)\rangle$ állapotban,

... stb.

Azaz részrendszereink tetszőlegesen kiragadott $i-$dik eleme $N_i/N = p_i = |c_i|^2$ valószínűséggel van az $|O, i\rangle |A(i)\rangle$ állapotban, ami azt jelenti, hogy az A műszer (a macska) $|c_i|^2$ valószínűséggel mutat $'i'$ értéket (tehát a spin+macska részrendszer *vagy* $|\uparrow\rangle|\text{halott}\rangle$ *vagy* $|\downarrow\rangle|\text{élő}\rangle$ állapotban van).

2) $A(n)-$t sem olvassuk le. Ekkor szintén kevert állapot áll elő az O állapotát tekintve, mivel

$$\mathrm{Sp}_{Z,A}\, \rho = \hat{\hat{\rho}} = \sum_n |c_n|^2 |O, n\rangle \langle O, n|,$$

ugyanis $\langle A(n)|A(m)\rangle = \delta_{nm}$ a makroszkópikusság miatt.

3) $A-$t leolvassuk és $A(m)$ eredményt kapunk. Ekkor

$$\mathrm{Sp}_{Z,A(m)}\,\rho = |c_m|^2 \hat{\hat{\rho}}$$

ahol tehát $|c_m|^2$ valószínűséggel kapjuk meg az objektum tiszta állapotát, amit a

$$\hat{\hat{\rho}} \equiv |A(m)\rangle|O,m\rangle\langle O,m|\langle A(m)| = \hat{\hat{\rho}}^2$$

sűrűségmatrix jellemez. Ez az V. axióma esete.

1.7. KVANTUM TELEPORTÁCIÓ

A sci-fi irodalomban gyakran találkozhatunk a teleportáció jelenségével, amikor is egy tárgy vagy élőlény azonos másolata, replikációja a tér egy másik távoli pontján megjelenik. Általában idő nem szükségeltetik a teleportációhoz és makroszkópikus targyakat is minden nehézség nélkül teleportálnak a sci-fi szerzők.

Látni fogjuk, hogy a kvantummechanika valóban lehetővé teszi a teleportációt, azonban csak kvantum állapotok teleportációját lehet megvalósítani a kauzalitás megsértése nélkül.

A kvantum teleportáció lehetőségét 1993-ban vetették fel[1] és azóta kísérletileg többben is kimutatták. Magyarországon Janszky és csoportja végzett sikeres kísérleteket fotonok polarizációs állapotainak teleportálásával.

1 Bennet et al, Phys.Rev.Letters 70, 1895 (1993)

Tekintsük a mellékelt diagrammot, amely bemutatja a kvatum teleportáció lényegét. A folyamatban három feles spinű részecske vesz részt. Az A-val jelölt egyik mérőhely (Alíz) rendelkezésére áll a teleportálandó 1-es részecske, amely a $|\varphi\rangle$ állapotban van. Egy spin szinglett (EPR) párokat generáló forrásból a 2-es részecske Alízhoz, a 3-as részecske a B mérőhelyre (Bobhoz) érkezik. Fogjuk látni, hogy ha Alíz egy Bell-mérést (ld. később) végez el a rendelkezésére álló 1-es és 2-es részecske páron, és ennek eredményét klasszikus információs csatornán közli Bobbal (ezt jelöli a diagrammon a folytonos kettős vonal), akkor Bobnak lehetősége van az ő 3-as részecskéjét a $|\varphi\rangle$ állapotba hozni s ezzel a teleportáció folyamatát megvalósítani.

Magyarázat. A teljes háromrészecske állapot az 1-es részecske és a (2,3)-as részecske pár állapotainak szorzataként írható:

$$|\Psi_{123}\rangle = |\varphi_1\rangle|\psi_{23}^-\rangle,$$

ugyanis a 2-es és 3-as részecske pár bármely tagján, vagy mindkettőn végzett mérés semmilyen információval nem szolgál az 1-es részecske állapotáról. Sem klasszikus korreláció, sem kvantumos összefonódás (szuperpozíció) nincs köztük.

Legyen az 1-es részecske állapota

$$|\varphi_1\rangle = a|\uparrow_1\rangle + b|\downarrow_1\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_1,$$

az EPR állapotban levő (2,3)-as részecske pár állapotfüggvénye pedig a következőképpen írható:

$$|\psi_{23}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_2\rangle|\downarrow_3\rangle - |\downarrow_2\rangle|\uparrow_3\rangle).$$

Bevezetjük az ún. Bell-bázist az 1-es és 2-es részecskék spinállapotainak jellemzésére:

$$|\psi_{12}^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle \pm |\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle),$$

és

$$|\Phi_{12}^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle \pm |\downarrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle),$$

amely elemek sajátállapotai az ún. Bell-operátoroknak. Pl. a jól ismert spin szinglett (EPR) $|\psi_{12}^-\rangle$ állapot az $\vec{S}_{12} = \vec{s}(1) + \vec{s}(2)$ operátorból képezett S_{12}^2 és $S_{z,12}$ operátorok sajátfüggvénye $S = 0$ és $S_z = 0$ sajátérték mellett.

Könnyen megmutatható, hogy a fenti háromrészecske állapot kifejthető a Bell-bázis állapotok szerint:

$$|\Psi_{123}\rangle = \frac{1}{2}\Big[|\psi_{12}^-\rangle \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + |\psi_{12}^+\rangle \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$+|\Phi_{12}^-\rangle \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + |\Phi_{12}^+\rangle \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\Big]|\varphi_3\rangle.$$

Ily módon tehát Alíz méréseket végezhet az ő 1-es és 2-es részecske párján, megmérheti, hogy milyen a négyféle Bell-operátornak megfelelő fizikai mennyiség értéke. Sokszor megmérve ezeket az értékeket, 1/4-ed valószínűséggel kapja mindegyik értéket. De elegendő csak egyszer mérnie a teleportáció érdekében, ugyanis, ha azt találja, hogy mérésének kimenetele például a $|\psi_{12}^-\rangle$ Bell-állapotnak megfelelő sajátérték, akkor az V. axióma értelmében biztos lehet benne, hogy Bob részecskéje a $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}|\varphi_3\rangle$ állapotba került. Hasonlóan, ha az állapotfüggvény második összetevőjére való redukciójára következtet mérési eredményéből, akkor a Bobnál lévő részecske $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}|\varphi_3\rangle$ állapotba került, és így tovább. Mérése után Alíz klasszikus információ hordozók útján közölheti Bobbal mérési eredményét, s ezután Bobnak nem kell mást csinálni, mint az ő részecskéjén egy inverz uniter transzformációt végrehajtani (ez pl. foton polarizációs állapotok esetén tükrök megfelelő alkalmazását jelenti), s máris megkapta az Alíznál levő eredeti részecske replikáját, anélkül, hogy ezt a részecskét oda kellett volna szállítani, bonyolult berendezésekkel védeni a környezettel való kölcsönhatástól, stb. Tehát a kvantumállapot teleportációja végbement. Alíz számára viszont elveszett az eredeti $|\varphi_1\rangle$ állapot, hiszen a mérése során keletkezett valamelyik Bell-állapotból már nem tudja visszaállítani azt. Tehát kvantumállapotok nem klónozhatók. A mérési eredmény viszont megmarad, az másolható.

Megjegyzendő, hogy a teleportáció nem valósítható meg a klasszikus információ hiányában, Bob nem tudja kitalálni Alíz mérési eredményét. Számára, amíg nincs az információ birtokában, mindegyik inverz transzformáció egyenlő eshetőséggel bír.

Várható, hogy a jövőben a kvantum teleportációnak jelentős gyakorlati alkalmazásai lesznek.

1.8. BELL-EGYENLŐTLENSÉGEK

A Bell-egyenlőtlenségek a kvantummechanikai méréselmélet valószínűségi értelmezését 'pontosítani' kívánó egyik elmélet, az ún. lokális *rejtett paraméterek* elméletének tarthatatlanságát hivatott – mérésekkel kimutatható módon – bemutatni. A rejtett paraméterek elméletének megfogalmazói szerint az, hogy a mérés k_n (saját)értéke csak a mérés pillanatában realizálódik $|c_n|^2$ valószínűséggel, csupán tudásunk hiányos voltát, a kvantummechanika tökéletlenségét tükrözi. Ezt a hiátust áthidalandó, feltételezték, hogy a különféle mérési lehetőségek már eleve be vannak kódolva a mérendő rendszerbe egy ismeretlen elmélet révén. Ez a kód, ez az előzetes *információ*, paraméter formájában benne rejlik a mérési adatokban. Az az elmélet, amelyben ez az információ explicite jelentkezik, nem ismeretes, így ez az információ csupán logikai úton, rejtett paraméterek formájában érhető el számunkra.

Ezen paraméterek segítségével bizonyos matematikai egyenlőtlenségek, az ún. Bell-egyenlőtlenségek vezethetők le a mérési adatok észlelt gyakoriságai között. Ezen egyenlőtlenségeknek szükségszerűen fenn kell állniuk minden olyan mérési eseményre, amelyek az előzetesen kódolt információt tartalmazzák. A másik eshetőség az, hogy az egyenlőtlenségek nem teljesülnek. Ekkor a rejtett paraméterek elméletét fel kell adnunk, előzetesen kódot információk nem léteznek. Mint kiderül, makroszkópikus mérési eseményekre mindig fennállnak az egyenlőtlenségek, mikroszkópikus objektumokon végzett mérések (pl. spin mérés) esetén nem mindig. Így tehát a kvantummechanika jelenlegi elméletét rejtett paraméterek bevezetésével 'finomítani' nem lehetséges.

Az eddigiekből nyilvánvaló már, hogy a Bell-egyenlőtlenségek felállításához nem szükséges a kvantummechanika. Bármely két, egymástól független mérőhelyen mért, egymással korrelációba hozható olyan adatsorozat gyakoriságaira vonatkozóan felállíthatók az egyenlőtlenségek, amelyekben az észlelt korrelációt egy közös ok okozta.

A Bell-egyenlőtlenségek felállításának egyik lehetséges módozatát, és a megfelelő kísérletet Hraskó Péter írta le (Fizikai Szemle, 1984/7. sz., 252 oldal). Jelenlegi ismereteink szerint kéféle információ áramlás típust tudunk elképzelni: (i) a közvetlen ok típusút, amelyben az A ok közvetlen kiváltója a B okozatnak ; (ii) a közös ok típusút, amelyben a C közös ok a felelős az A és B eseménysorozatban fellelhető korrelációért. Logikai úton azonban eljuthatunk egy harmadik típusú ok-okozati kapcsolathoz (információ áramláshoz), amelyet felfogni nehéz, de kétségtelen, hogy mikrovilágunk gazdag mozgásformái ilyen információ áramlás típust (is) tartalmaznak.

C

A B

1 2 3 1 2 3

1.2 ábra. A Bell-egyenlőtlenségek felállítását lehetővé tevő Hraskó-féle kísérleti elrendezés.

A Hraskó-kísérlet a következő (ld. 1.2 ábra). A C postamester asztalán egy nagy halom tökéletesen egyforma nagyalakú boríték halmaz van. C a halomból véletlenszerűen kivesz egy nagyborítékot, felnyitja, s a benne levő két, tökéletesen egyforma, lezárt, közepes alakú borítékot továbbítja a szomszéd szobákban ülő A, ill. B munkatársaihoz. A és B kibontja a saját közepes alakú borítékját, s a benne található *három*, számozott kisboríték közül találomra kivesz egyet, a többit megsemmisíti. A megtartott számozott kisborítékot felbontja, s abban egy színes korongot talál. Feladata, mind A-nak mind B-nek csupán annyi, hogy az így hozzájuk érkező kisborítékok számát, valamint a bennük talált a korongok színét egy jegyzőkönyvbe rögzítsék, s várják a következő közepes alakú boríték küldeményt, amely megérkezése esetén hasonlóképpen járnak el. A korongok színe *kétféle* lehet, pl. kék K és piros P. Így mind A, mind B 6−féle (2×3) eseményt rögzíthet. A nagyszámú boríték felbontásból (mérésből) mind A-nál, mind B-nél keletkezik egy lista (vö. 1.1 táblázat). A listákat a mérés sorozat befejezése után összehasonlítják. Az összehasonlításából A és B a következő információ C általi közvetítésére gondolhat: egy nagyborítékon belül az azonos számú kisborítékok csak különböző színű korongot tartalmazhatnak, azaz $nKnP$. Minthogy egyazon nagyborítékból származó, azonos színű korong azonos számozású kisborítékon belül nem fordulhat elő, összesen $6 \times 6 - 6 = 30$ esemény regisztrálása fordulhat elő, különböző gyakorisággal az egymás mellé tett jegyzőkönyvek listájának soraiban.

Sőt, mivel nem lehet megkülönböztetést tenni a közepes borítékok között, összesen csupán 30/2=15 különböző esemény szerepelhet az egymás mellé tett mérési jegyzőkönyvek megfelelő soraiban (ld. 1.1 táblázat). Enek a 15 eseménynek az előfordulási valószínűsége, a relatív gyakorisága, p_i kiszámolható: $p_i = N_i/N$, ahol N_i jelenti az $i-$dik esemény előfordulási számát, N pedig a minden határon túl növelt összesemény (a szétküldött azonos nagyborítékból származó közepes alakú borítékok) számát ($\sum_{i=1}^{15} p_i = 1$).

1.1 táblázat: A és B listáján szereplő események.

Mármost A és B, a klasszikus fizikán iskolázott alpostamesterek jóhiszeműen valóban azt gondolhatják, hogy főnökük, C, jól preparált közepes alakú borítékokat küldözget nekik; nevezetesen olyanokat, amelyekben még véletlenül sem fordulhat elő az, hogy azonos számozású kisborítékba azonos színű korong kerül. Bár A és B számára elérhetetlen főnökük manipulációiba való betekintés, logikai úton mégis kitalálják, hogy C hányféle nagyalakú borítékot készíthet el. Okoskodásuk azon alapul, hogy C tényleg eleve bekódolja az általuk később megállapított információt az egyszerre feladott közepes alakú borítékokba. Ennek ellentéte csak az lehet, hogy nincs eleve bekódolva az $nKnP$ információ az egy nagyborítékból származó levelekbe, hanem az közben, pl. a felnyitás pillanatában keletkezik. Ez esetben sérülhet okoskodásuk, s ekkor az információ továbbítás egy olyan módozatával állunk szemben, amely a klasszikus világunkban megismert típusok egyikébe sem illeszthető bele.

Az 1.2 táblázat tartalmazza A és B logikai munkájának eredményét. Ha tényleg $nKnP$ a közvetített információ (márpedig ez alól egyetlen kivétel sem ismeretes) és valóban már C-nél bekerül a nagy borítékokba ez az információ, akkor csupán az 1.2 táblázatban felsorolt négyféle (a, b, c, d) közepes alakú boríték típust tartalmazhatják a C előtt fekvő nagyborítékok. Ha A és B a kísérlet megkezdése előtt bemehetnének C szobájába és felnyithatnák az összes nagyborítékot, akkor megállapíthatnák az egyes típusok előfordulási gyakoriságát, s így annak w_a, w_b, w_c, w_d valószínűségét is, amellyel C a különféle típusú nagyborítékokat küldözgeti számukra: pl. $w_a = N_a/N$, ahol N_a az $a-$tipusú nagyborítékok száma. (Nyilvávalóan $w_a + w_b + w_c + w_d = 1$.) Viszont nem mehetnek be a nagyborítékos szobába, ezért csupán *feltételezik*, hogy ezek a $w_a, ..., w_d$ valószínűségek *léteznek*. (Teljesen normális feltételezés.) Viszont számukra, a megfigyelők számára ténylegesen *nem* hozzáférhetők (mérhetők) ezek az adatok, s ezért rejtett paramétereknek nevezik el őket. Feltételezésük viszont lehetőséget nyújt arra, hogy az általuk a *tapasztalatból* nyert valószínűségeket, a p_i-ket kifejezhessék ezekkel a w valószínűségekkel. Pl. egy ilyen összefüggés a $p(1P, 2P) \doteq \left(\frac{1}{3}\right)^2 (w_c + w_d)$, amint az az 1.1 és 1.2 táblázat összevetéséből nyilvánvaló. (Az 1/9-es faktor abból adódik, hogy mind B, mind A 1/3 valószínűséggel választ ki egy borítékot a kapott három közül.)

Ezért a tapasztalt (mért) p_i valószínűségek között felállíthatók bizonyos összefüggések, méghozzá egyenlőtlenségek alakjában. Ezek a *Bell-egyenlőtlenségek.* Pl. egy ilyen egyenlőtlenség a következő:

1.2 táblázat: A C boríték típusai.

$$p(1P, 2P) + p(2P, 3P) \geq p(1P, 3P), \tag{1.1}$$

ugyanis

$$(w_c + w_d) + (w_b + w_d) \geq w_b + w_c,$$

mivel a w_d valószínűség határozottan nem negatív.

Bell 1964-ben állította fel egyenlőtelenségeit[1], amelyektől való eltérést végül 1981-ben Aspect-nek és munkatársainak[2] sikerült kimérni spinkorrelációs mérések során.

---

1 J.S. Bell, Physics **1**, 195 (1964); in Die Deutung der Quantentheorie (eds. K.R. Baumann, R.U. Sexl) (Vieweg, Wiesbaden, 1984), p. 193.

2 A.P. Aspect et al, Phys. Rev. Letters, **47**, 460 (1981); ibid **49**, 91 (1982)

Kvantummechanikai tanulmányaink során láttuk, hogy egy feles spinű részecske spinjének tetszőleges irányra való vetülete $\pm\hbar/2$ lehet. Feleltessük most meg az előző, borítékos (Hraskó-féle) kísérletben szereplő korongok színeit a kétféle beállásnak: $K = +$, $P = -$. Legyen továbbá adva az egymástól izolált A ill. B laboratóriumban egy-egy olyan mérőberendezés (Stern-Gerlach apparátusok, megfelelő elrendezésben), amellyel véletlenszerűen kiválasztott, háromféle irányra vonatkozó spinvetületet tudunk mérni. Az előző kísérlettel való analógia tehát: borítékok számozása = mérési irányok, azaz $1 = \hat{n}_1, 2 = \hat{n}_2, 3 = \hat{n}_3$. Az A-hoz és B-hez érkező feles spinű *azonos* részecskék egy C-forrásból származnak. A C-forrás $S = 0$ szinglet állapotban levő, két-nukleon rendszerek sokaságát tartalmazza, ezek bomlása révén keletkeznek az ellentétes irányba, A-hoz, ill. B-hez repülő nukleonok. (A postamester szerepét tehát a radioaktív bomlás és az impulzus megmaradás tölti be, a nagyboríték maga a szétsugárzó, $S = 0$ spinű kétrészecske rendszer.)

Mármost, ahhoz, hogy kimutassuk: a kvantummechanika sérti a Bell-egyenlőtlenségeket, nem is kell elvégeznünk a mérést. Ugyanis a kvantummechanika alapján ki tudjuk számítani a p_i valószínűségeket. (Természetesen, bíznunk kell abban, hogy a kvantummechanika helyes, pontos elmélet, s a kísérlet majd javára dönt.) Annak valószínűsége (átlagértéke), hogy egy $S = 0$ állapotban levő részecske pár *egyik* részecskéjének $\hat{n}_1$ irányra vonatkozó spinvetülete *ugyanolyan előjelű* legyen, mint a részecske pár *másik* résztvevőjének egy tetszőleges másik $\hat{n}_2$ irányra nézve,

$$q(\hat{n}_1, \hat{n}_2) = \frac{1}{2}(1 - \cos\vartheta_{12}),$$

ahol ϑ_{12} az irányok által bezár szöget jelenti. Válasszunk három, előre megadott különböző irányt mindkét laboratóriumban! Ekkor az (1.1)-ben szereplő p_i valószínűségekre a következő képletek adhatók meg:

$$p(1P, 2P) = \left(\frac{1}{3}\right)^2 q(\hat{n}_1, \hat{n}_2) = \frac{1}{18}(1 - \cos\vartheta_{12}),$$

$$p(2P, 3P) = \left(\frac{1}{3}\right)^2 q(\hat{n}_2, \hat{n}_3) = \frac{1}{18}(1 - \cos\vartheta_{23}),$$

$$p(1P, 3P) = \left(\frac{1}{3}\right)^2 q(\hat{n}_1, \hat{n}_3) = \frac{1}{18}(1 - \cos\vartheta_{13}).$$

Ezeket az (1.1) alatti Bell-egyenlőtlenségbe helyettesítve a következő összefüggés fennállását kapjuk:

$$1 - \cos\vartheta_{12} + 1 - \cos\vartheta_{23} \geq 1 - \cos\vartheta_{13},$$

azaz

$$1 + \cos\vartheta_{13} \geq \cos\vartheta_{12} + \cos\vartheta_{23}.$$

Válasszuk a 2-es irányt merőlegesnek a 3-as irányra, az $\hat{n}_1, \hat{n}_2$ irányok közti ϑ_{12} szöget pedig $\pi/4 = 45^o-$nak! Ekkor $-\cos\vartheta_{13} = \cos\vartheta_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $\cos\vartheta_{23} = 0$, amiket behelyettesítve, látjuk, hogy az egyenlőtlenség, $1 \geq 2\frac{1}{\sqrt{2}} = \sqrt{2}$ (helytelen!) ebben az esetben nem teljesül.

Aspect-ék kísérletei ezt meg is erősítették, amennyiben méréseik mindig a kvantummechanika által szolgáltatott eredményeket adták vissza a mérési hibán belül (1.3 ábra), azaz lokális rejtett paraméterek nem léteznek.

1.3 ábra. Spinkorrelációs mérés.

2. DIREKT SZÓRÁSELMÉLET

A kvantumfizikában minden szóráskísérlet hátterében az a cél húzódik meg, hogy információt szerezzünk a szóródó (összetett) részecskék közötti kölcsönhatásokról. Az ütközésben általában két részecske vesz részt: a bombázódó céltárgy, a target és a bombázó lövedék, a projektil. A méréseket laboratóriumban végezzük, itt a target az ütközés előtt nyugalomban van. Az elméleti leírás ezzel szemben általában tömegközépponti koordináta rendszerben történik, ahol a kétrészecske rendszer tömegközéppontja van nyugalomban. Abban az esetben, ha a két részecske kölcsönhatási potenciálja csak a részecskék relatív távolságától függ, az elméleti leírás a relatív koordináta rendszert használja, amelyben a kétrészecske probléma egyrészecske problémára redukálódik. (Olyan egyrészecskéére, amelynek tömege a redukált tömeg, azaz mindkét partner tömegénél kisebb tömeg.) Bár a relatív koordináta rendszer nem inercia rendszer (az impulzus nem marad meg), a relatív energia és a relatív impulzusmomentum megmarad (lévén, hogy ezek megegyeznek a tömegközépponti rendszerbeli értékekkel).

Első lépésként áttekintjük a mérések kiértékeléséhez szükséges energia és szórási szög transzformációs képleteket. A továbbiakban klasszikus mechanikai és kvantummechanikai tanulmányaink elemeit alkalmazzuk töltött részecskék ütközése esetére s levezetjük Rutherford szórási képletét, valamint meghatározzuk a Coulomb szórási amplitúdót. Ezután érintjük a szennyezések környezetében létrejövő Friedel-oszcillációkat, illetve az ún. Friedel-összegszabályt és a fázistolások előjelének az ütközési idővel kapcsolatos összefüggését tisztázzuk. A fejezet végén a kétdimenziós kvantummechanikai szórás elemeit alkalmazzuk töltött részecskék szórására.

2.1. LABOR ÉS TÖMEGKÖZÉPPONTI RENDSZERBELI ENERGIÁK ÉS SZÓRÁSI SZÖGEK KÖZTI ÖSSZEFÜGGÉSEK

Jelölje m_1 és m_2 a két ütköző részecske tömegét, $\mathbf{v}_1$ és $\mathbf{v}_2$ labor rendszerbeli (L-i) sebességüket, $\mathbf{w}_1$ és $\mathbf{w}_2$ tömegközéppont rendszerbeli (tkp-i) sebességüket, ütközés előtt. Az ütközés utáni sebességek: $\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2$, illetve $\mathbf{w}'_1, \mathbf{w}'_2$. Legyen a 2-es részecske a target, azaz $\mathbf{v}_2 = 0$.

A tömegközéppont sebessége labor rendszerben

$$\mathbf{u}^L = \frac{m_1\mathbf{v}_1}{m_1+m_2} = \frac{m_1\mathbf{v}'_1 + m_2\mathbf{v}'_2}{m_1+m_2},$$

míg tkp-i rendszerben

$$\mathbf{u}^{tkp} = 0 = \frac{m_1\mathbf{w}_1 + m_2\mathbf{w}_2}{m_1+m_2} = \frac{m_1\mathbf{w}'_1 + m_2\mathbf{w}'_2}{m_1+m_2}.$$

A tkp-i és labor rendszerbeli sebességek közötti különbség éppen a tömegközéppont labor rendszerbeli sebessége:

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{w}_1 + \mathbf{u}^L, \quad \to \quad \mathbf{w}_1 = \mathbf{v}_1 - \mathbf{u}^L = \mathbf{v}_1\left(1 - \frac{m_1}{m_1+m_2}\right) = \mathbf{v}_1\frac{m_2}{m_1+m_2}$$

és

$$\mathbf{v}_2 = 0 = \mathbf{w}_2 + \mathbf{u}^L, \quad \to \quad \mathbf{w}_2 = -\mathbf{u}^L = -\mathbf{v}_1\frac{m_1}{m_1+m_2}.$$

Látjuk, hogy $\mathbf{u}^L||\mathbf{v}_1$, $\mathbf{w}_1||\mathbf{v}_1$, $\mathbf{w}_2||\mathbf{v}_1$. Ezen, egy egyenesen fekvő sebességvektorok jelölik ki a szórás $z-$tengelyét, amelytől mérjük a θ szórási szöget.

Azonos tömegek, $m_1 = m_2$ esetén, $\mathbf{w}_1 = \frac{1}{2}\mathbf{v}_1, \mathbf{w}_2 = -\mathbf{w}_1$.

A tkp-i sebességek nagysága rugalmas ütközés során nem változik. Ezt a következőképpen láthatjuk be. A tkp-i teljes impulzus definíció szerint zérus: $0 = m_1\mathbf{w}_1 + m_2\mathbf{w}_2 = m_1\mathbf{w}'_1 + m_2\mathbf{w}'_2$, amiből $w_2 = w_1 m_1/m_2$ és $w'_2 = w'_1 m_1/m_2$ adódik. A tkp-i energiamegmaradás miatt $m_1 w_1^2 + m_2 w_2^2 = m_1 {w'_1}^2 + m_2 {w'_2}^2$ írható, amiből $0 = m_1(w_1^2 - {w'_1}^2) + m_2(w_2^2 - {w'_2}^2) = m_1(w_1^2 - {w'_1}^2) + (m_1^2/m_2)(w_1^2 - {w'_1}^2) = m_1(1 + m_1/m_2)(w_1^2 - w'^2_1)$. Mivel $m_1 \neq 0$, kell, hogy $w_1^2 = {w'_1}^2$ fennálljon. Azaz $w_1 = w'_1$. Hasonlóan, $w_2 = w'_2$ fennállása is bizonyítható $m_2 \neq 0$ révén.

Ezek után az energiák közti átszámítást könnyen megkapjuk. (Csak kinetikus energiákról van szó, mert a részecskéknek most nem tulajdonítunk szerkezetet, azaz belső energiát.)

Labor rendszerben:

$$E^L = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 \equiv E_1 .$$

Tkp-i rendszerben:

$$E^{tkp} = \frac{1}{2}\left(m_1 w_1^2 + m_2 w_2^2\right) = \frac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} v_1^2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E^L . \tag{2.1}$$

A két energia különbsége éppen a tömegközéppont kinetikus energiája:

$$E^L - E^{tkp} = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\left(u^L\right)^2 .$$

Egyenlő tömegek esetén: $E^{tkp} = \frac{1}{2} E^L$.

Kevésbé gyakran tárgyalt összefüggés a szórási szögek, θ^L és θ^{tkp} közti transzformáció. Ennek fontossága azonnal nyilvánvalóvá válik, ha a hatáskeresztmetszetek alábbi összefüggésére tekintünk, amely a detektált részecskeszámok vonatkoztatási rendszertől való függetlenségét fejezi ki:

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_L \mathrm{d}\Omega^L = \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{tkp} \mathrm{d}\Omega^{tkp} ,$$

amiből

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_L = \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{tkp} \frac{\mathrm{d}\Omega^{tkp}}{\mathrm{d}\Omega^L} ,$$

azaz a mért laborbeli és a számolt tkp-i hatáskeresztmetszetek közötti transzformációt a

$$\frac{\mathrm{d}\Omega^{tkp}}{\mathrm{d}\Omega^L} = \frac{\mathrm{d}\cos\theta^{tkp}}{\mathrm{d}\cos\theta^L} \tag{2.2}$$

biztosítja, mivel az ütközés síkban zajlik le s így az azimutális szögváltozók nem transzformálódnak ($\phi^L = \phi^{tkp}$).

Mármost, ütközés előtt

$v_1 = w_1 + u^L$.

Ütközés után pedig az alábbi egyenleteket írhatjuk fel a szórási szögek tkp-i és labor rendszerbeli értéke között (ld. 2.1. ábra):

$w_1' \sin\theta^{tkp} = v_1' \sin\theta^L$,

$w_1' \cos\theta^{tkp} + u^L = v_1' \cos\theta^L$.

2.1. Ábra: szórási szögek közti összefüggések.

Elosztva egymással a két egyenletet, kapjuk a hasznos összefüggést:

$$\tan\theta^L = \frac{\sin\theta^{tkp}}{\cos\theta^{tkp} + \lambda},$$

ahol $\lambda = u^L/w_1' = u^L/w_1 = \frac{m_1 v_1}{m_1+m_2}\frac{m_1+m_2}{m_2 v_1} = m_1/m_2$. Itt a második egyenlőség jel után felhasználtuk az imént levezetett $w_1 = w_1'$ egyenlőséget, ami rugalmas ütközések esetére érvényes. (Rugalmatlan ütközések esetén a fenti transzformációs képlet kicsit más.) Ahhoz, hogy a (2.2) transzformációs képletet megkapjuk, még négyzetre emelést és gyökvonást kell végeznünk, amiből a következő összefüggést nyerjük:

$$\cos\theta^L = \frac{\cos\theta^{tkp} + \lambda}{\sqrt{1 + 2\lambda\cos\theta^{tkp} + \lambda^2}}.$$

Deriválva ezt a kifejezést, kapjuk a kívánt eredményt:

$$\frac{\mathrm{d}\cos\theta^{tkp}}{\mathrm{d}\cos\theta^L} = \frac{\left(1 + 2\lambda\cos\theta^{tkp} + \lambda^2\right)^{3/2}}{|1 + \lambda\cos\theta^{tkp}|}. \tag{2.3}$$

Könnyen belátható a fenti képletekből, hogy azonos tömegű részecskék rugalmas ütközése ($\lambda = 1$) esetén a differenciális hatáskeresztmetszetek között a

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_L = 4\cos\theta^L \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{tkp}$$

egyszerű összefüggés áll fenn, a szórási szögek tartománya pedig $0 \le \theta^{tkp} \le \pi$, illetve $0 \le \theta^L \le \pi/2$ értékekre korlátozódik és $\theta^L = \theta^{tkp}/2$.

A fenti képleteket haszonnal kamatoztathatjuk, ha például inverz szórás segítségével (ld. 3. fejezet) fázistolásokból akarjuk meghatározni a mikrorendszerek (atomok, atommagok stb.) szóródását létrehozó kölcsönhatást. Mivel mindig labor rendszerben mérjük a differenciális hatáskeresztmetszeteket, a mért szög és a hatáskeresztmetszet értékeket először át kell számítani a megfelelő tömegközépponti értékekre. Ezután a hatáskeresztmetszet ismert elméleti formulájának (ld. potenciál szórás) felhasználásával és valamilyen modell független eljárás segítségével meghatározhatjuk az inverz módszer input adatait képező fázistolásokat.

2.2. KLASSZIKUS COULOMB SZÓRÁS

Először a gömbszimmetrikus $V(r)$ potenciállal kölcsönható kétrészecske szórás esetét vizsgáljuk. Mivel a részecskéknek nem tulajdonítunk szerkezetet (nem gerjeszthetők, belső állapotuk nem változtatható meg), csak rugalmas ütközésre van lehetőség.

A teljes energia a két részecske kinetikus energiájából, valamint a kölcsönhatási potenciális energiából tevődik össze, amit tömegközépponti és relatív energia felbontásban is írhatunk:

$$E = \frac{1}{2}m_1\dot{\mathbf{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\mathbf{r}}_2^2 + V(r) = \frac{1}{2}M\dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{r}}^2 + V(r) \equiv \frac{1}{2}M\dot{\mathbf{R}}^2 + E_r.$$

Itt a szokásos $M = m_1 + m_2$, $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ és $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ jelölést alkalmaztuk.

Az impulzusmomentumot szintén felírhatjuk, mint két részecske labor rendszerbeli impulzusmomentumának összegege, illetve mint a tömegközéppont impulzusmomentuma plusz a relatív impulzusmomentum:

$$\mathbf{L} = (\mathbf{r}_1 \times m_1\dot{\mathbf{r}}_1) + (\mathbf{r}_2 \times m_2\dot{\mathbf{r}}_2) = (\mathbf{R} \times M\dot{\mathbf{R}}) + (\mathbf{r} \times \mu\dot{\mathbf{r}}) \equiv (\mathbf{R} \times M\dot{\mathbf{R}}) + \mathbf{L}_r.$$

A relatív mozgást klasszikusan a Newton egyenlet írja le

$$\mu\ddot{\mathbf{r}} = -\nabla V(r),$$

amelyet $\dot{\mathbf{r}}$-rel skalárisan megszorozva kapjuk az energiamegmaradást kifejező egyenletet a következőképpen:

$$\mu\ddot{\mathbf{r}}\dot{\mathbf{r}} + \nabla V(r)\dot{\mathbf{r}} = 0.$$

Az első tag a kinetikus energia teljes időderiváltja, $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{r}}^2\right)$. A második tag pedig a potenciál teljes deriváltjaként írható, mivel a centrális potenciál csak az $r(t)$ változón keresztül függ az időtől, explicite nem: $\frac{\mathrm{d}V(r(t))}{\mathrm{d}t} = \nabla V(r)\dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial V}{\partial t} = \nabla V(r)\dot{\mathbf{r}}$. Végeredményben tehát a relatív kinetikus energia időbeli állandóságát kaptuk:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{r}}^2 + V(r)\right) \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}E_r = 0.$$

Mivel $V(r \to \infty) = 0$, a relatív sebesség abszolút értéke, $|\dot{\mathbf{r}}|$ is megmarad ütközés előtt és után, amint annak rugalmas ütközések esetén lennie kell.

A mozgásegyenletet $\mathbf{r}$-rel vektoriálisan beszorozva, a relatív impulzusmomentum időbeli állandóságát kifejező összefüggést kapjuk $(\mathbf{r} \times \nabla \equiv 0)$:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathbf{r} \times \mu\dot{\mathbf{r}}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{L}_r = 0.$$

Mivel $\mathbf{r}(t)\mathbf{L}_r = 0$, az ütközés az $\mathbf{L}_r$-re merőleges síkban zajlik le. Relatív koordináta rendszerünk origója a target, innen mutat az $\mathbf{r} = (x, y) = (r\cos\varphi, r\sin\varphi)$ helyvektor a projektil felé, ahol φ az a polárszög, amely a kezdeti beesési $x-$irány tengelyétől (általában ezt szoktuk $z-$tengelynek nevezni) méri a szöget az $\mathbf{r}$ helyvektorig. $t = -\infty$-ben $\varphi = \pi$, majd az idő növekedtével φ csökken, $t = \infty$ esetén értéke megegyezik a θ szórási szög értékével.

A relatív energia képletét célszerű polár koordináta rendszerben is felírni:

$$E_r = \frac{1}{2}\mu\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\right) + V(r).$$

A relatív impulzusmomentum nagysága is felírható polár koordináta rendszerben:

$$L_r = \mu b v = -\mu r^2\dot{\varphi},$$

ahol a $-$ előjel van figyelemmel φ időbeli csökkenésére, és bevezettük a b ütközési (impakt) paramétert és a v kezdeti relatív sebességet a jól ismert definíciókkal.

Az impulzusmomentum egyenletéből a $\dot{\varphi}$ szögsebességet kifejezve,

$$\dot{\varphi} = -\frac{L_r}{\mu r^2} = -\frac{bv}{r^2},$$

és ezt E_r kifejezésébe helyettesítve,

$$E_r = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + \frac{L_r^2}{2\mu r^2} + V(r) = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + \frac{\mu b^2 v^2}{2r^2} + V(r),$$

a következő egyenletet nyerjük az $\dot{r}^2$ radiális sebesség négyzetére ($E_r = \mu v^2/2$):

$$\dot{r}^2 = \frac{2E_r}{\mu} - \frac{2V}{\mu} - \frac{b^2v^2}{r^2} = v^2\left(1 - \frac{V}{E_r} - \frac{b^2}{r^2}\right).$$

Ebből gyököt vonva nyerjük a potenciálszórásra vonatkozó klasszikus radiális sebesség egyenletet:

$$\dot{r} = \mp v\left\{1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{b^2}{r^2}\right\}^{\frac{1}{2}}.$$

A $\mp$ előjel azt jelzi, hogy a projektil kezdetben közeledik a targethez, ekkor a sebesség negatív, majd, elérve a legkisebb megközelítési távolságot, r_m-et, ettől kezdve távolodik a targettől, így sebessége pozitív. A megközelítés legkisebb távolságát a zérus sebesség határozza meg:

$$0 = \left\{1 - \frac{V(r_m)}{E_r} - \frac{b^2}{r_m^2}\right\},$$

ami egy implicit egyenletet jelent az $r_m = r_m(E_r, b)$ függvényre.

Kombinálva a szögsebesség és radiális sebesség egyenletét, megkaphatjuk az eltérülés szögére (szórási szög) vonatkozó egyenletet. Először a φ polárszög megváltozásának egyenletét származtatjuk le:

$$\mathrm{d}\varphi = \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}r}\mathrm{d}r = \frac{\dot{\varphi}}{\dot{r}}\mathrm{d}r = \pm\frac{b}{r^2}\left\{1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{b^2}{r^2}\right\}^{-\frac{1}{2}}\mathrm{d}r.$$

φ zéruspontját a pálya szimmetria tengelyénél felvéve, azaz a $\varphi(r_m) = 0$ által kijelölt apszistól mérve, látható a fenti egyenletből, hogy a $\varphi(r)$ trajektória szimmetrikus erre az apszisra nézve, mivel ugyanaz az r érték tartozik a $+\varphi$-hez, mint a $-\varphi$-hez. φ-t továbbra is a pozitív $x-$tengelytől mérve, integrálás után a szórási szög

$$\theta = \pi - 2\int_{r_m}^{\infty}\frac{b}{r^2}\left\{1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{b^2}{r^2}\right\}^{-\frac{1}{2}}\mathrm{d}r \equiv \theta(b, E_r).$$

Coulomb potenciál, $V(r) = C/r$, esetére alkalmazva:

$$\theta = \pi - 2\int_{r_m}^{\infty} \frac{b}{r^2}\left\{1 - \frac{C}{rE_r} - \frac{b^2}{r^2}\right\}^{-\frac{1}{2}} \mathrm{d}r = 2\arcsin\frac{C/2bE_r}{\{1+(C/2bE_r)^2\}^{1/2}},$$

amely eredményt az

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\mathrm{d}x}{x(ax^2+bx+c)^{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{-c}}\arcsin\frac{bx+2c}{x(b^2-4ac)^{1/2}}\Big]_{x_1}^{x_2}$$

integrációs képlet használatával kaptuk meg.* Szükség volt még az

$$\arcsin x - \arcsin y = \arcsin(x\sqrt{1-y^2} - y\sqrt{1-x^2})$$

összegzési tétel alkalmazására ($xy \geq 0$), valamint az

$$r_m^2 - \frac{C}{E_r}r_m - b^2 = 0$$

összefüggés megoldásából adódó r_m minimális megközelítési távolság, Coulomb potenciál esetén érvényes, következő értékére:

$$r_m = \frac{C/E_r \pm \sqrt{(C/E_r)^2 + 4b^2}}{2} = b\{C/2bE_r + ((C/2bE_r)^2+1)^{1/2}\}.$$

Látjuk, hogy Coulomb potenciálra centrális ütközés ($b = 0$) esetén a minimális ütközési távolság:

$$r_m(b=0) = C/E_r \equiv R(E_r).$$

A szórási szögre vonatkozó képletet másként írva,

$$\sin\frac{1}{2}\theta = \frac{C/2bE_r}{\{1+(C/2bE_r)^2\}^{1/2}},$$

azaz

$$\tan\frac{1}{2}\theta = C/2bE_r = R(E_r)/2b.$$

Ez az egyszerű összefüggés lesz a Coulomb szórási hatáskeresztmetszet kiszámolásának az alapja.

---

* Ld. pl. Bronstein 1.1.3.3 fejezet 258. integrál.

Differenciális hatáskeresztmetszet

A $\sigma(\theta, E_1)$ differenciális hatáskeresztmetszet a részecskék θ irányokba való szóródásának valószínűségét, a mérő apparátus által észlelt eloszlásának intenzitását, az ún. szögeloszlását adja meg. Azt mutatja meg, hogy a b és $b + \mathrm{d}b$ közti körszeleten áthaladó ϕ fluxussűrűségű projektil részecskék közül mennyi jelenik meg a szórás után a $\theta(b)$ és $\theta(b + \mathrm{d}b) = \theta(b) + \mathrm{d}\theta$ szórási szögtartományban.**

$$\phi 2\pi b |\mathrm{d}b| = \phi\sigma(\theta)\mathrm{d}\Omega = \phi\sigma(\theta) 2\pi \sin\theta |\mathrm{d}\theta|,$$

ahol $\phi = nv$ a beeső részecskék homogén fluxus sűrűsége, azaz az egységnyi felületen egységnyi idő alatt áthaladó részecskék száma (n a sűrűség, v a sebesség). Átrendezve,

$$\sigma(\theta) = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta} \right|. \tag{2.4}$$

2.2 Ábra. Szemléltetés a differenciális hatáskeresztmetszet definícójához.

Alkalmazva a fenti definiciót Coulomb szórásra, kapjuk

$$\sigma_c(\theta) = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta} \right| = \frac{b}{\sin\theta} \frac{R}{4} \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta} =$$

$$= \frac{(C/4E_r)^2}{\sin^4 \frac{1}{2}\theta} = \left(\frac{R}{4}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{1}{2}\theta}. \tag{2.5}$$

** Kvantummechanikában a fenti definíciót, tehát a másodpercenként a $\mathrm{d}\Omega$ térszögbe szóródó részecskék számát, a leíráshoz jobban illeszkedő radiális fluxussal fejezzük ki:

$\phi\sigma(\theta)\mathrm{d}\Omega = \phi_r r^2 \mathrm{d}\Omega.$

Ez Rutherford képlete, ami független C előjelétől. $C > 0$ esetén azonban $0 \leq \theta \leq \pi$ érvényes, míg $C < 0$ esetén $-\pi \leq \theta \leq 0$.

Transzfer hatáskeresztmetszet

Rugalmas ütközés során energia (és impulzus) transzferálódik át a projektilről a targetre (inercia rendszerből figyelve az eseményt). Az átadódott energia nyilván $\Delta E = E_2' \equiv T$-vel, azaz a ”2”-es részecske (target) ütközés utáni (visszalökődési) energiájával egyenlő, amit szokás T-vel jelölni.

Egyszerű számolással kapjuk:

$$T = E_2' = E_1 \frac{4m_1m_2}{M^2} \sin^2 \frac{1}{2}\theta \equiv T_m \sin^2 \frac{1}{2}\theta = E_1 \frac{2m_1m_2}{M^2}(1 - \cos\theta),$$

ahol bevezettük a $\theta = \pi$ esetén (centrális ütközés) transzferálódó maximális energiát:

$$T_m = E_1 \frac{4m_1m_2}{M^2}.$$

Az energia transzport (vagy momentum transzfer) hatáskeresztmetszet, hasonlóan a labor–tkp hatáskeresztmetszetek egymásba való számolásához, egyszerű transzformációval kapható a szögeloszlást jelentő differenciális hatáskeresztmetszetből:

$$\phi 2\pi b |\mathrm{d}b| = \phi\sigma(\theta, E_1)\mathrm{d}\Omega = \phi\sigma_m(T, E_1)\mathrm{d}E_2',$$

amelyből

$$\sigma_m(T, E_1) = \sigma(\theta, E_1)\frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}E_2'} = \sigma(\theta, E_1) 2\pi \sin\theta \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}E_2'}$$

$$= -\sigma(\theta, E_1) 2\pi \; \frac{\mathrm{d}\cos\theta}{\mathrm{d}E_2'} = +\sigma(\theta, E_1) 2\pi \; \frac{1}{E_1 \frac{2m_1m_2}{M^2}} = \sigma(\theta, E_1)\frac{4\pi}{T_m}.$$

Coulomb szórásra alkalmazva, további átalakításokra nyílik lehetőség. Mivel

$$\frac{1}{\sin^4 \frac{1}{2}\theta} = \left(\frac{T_m}{T}\right)^2 \quad \text{és} \quad R = \frac{C}{E_r},$$

ezért

$$\sigma_{m,c}(T, E_1) = \sigma_c(\theta, E_1)\frac{4\pi}{T_m} = \left(\frac{C}{4E_r}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{1}{2}\theta} \frac{4\pi}{T_m} =$$

$$= \left(\frac{C}{4E_r}\right)^2 \frac{4\pi}{T^2} T_m = \frac{\pi R^2(E_1)}{4} \frac{T_m}{T^2}, \tag{2.6}$$

ahol $0 \leq T \leq T_m$. Mint látjuk, kis energia-transzfer a preferált eset, amely kis θ esetén valósul meg. $\theta = 0$ esetén mind σ_c, mind $\sigma_{m,c}$ divergál Coulomb potenciál esetén, mivel a kölcsönhatás hosszúhatótávolságú.

Fékezőerő (stopping power)

Az imént definiált $\sigma_m(T, E_1)$ veszteségi hatáskeresztmetszet segítségével kiszámíthatjuk a szó ródó részecske átlagos energiaveszteségét:

$$\langle T \rangle = \int \frac{T\sigma_m(T, E_1)}{\sigma_{tot}} \mathrm{d}T.$$

Egy σ_{tot} hatásos keresztmetszettel $\bar{v}$ átlagsebességgel rendelkező részecske $\bar{v}t$ út megtétele után $n(\sigma_{tot}\bar{v}t)$ számú target részecskével találkozik, ahol n a target részecskesűrűséget jelenti. Így az egy ütközésre eső útszakasz, az átlagos szabadúthossz a

$$\lambda = \frac{\bar{v}t}{n(\sigma_{tot}\bar{v}t)} = \frac{1}{n\sigma_{tot}}$$

képlettel adható meg. Ezért ν ütközés esetén a részecskénk $\Delta R = \nu\lambda$ utat tesz meg és ennek során

$$-\Delta E_1 = \nu \langle T \rangle$$

energiát veszít. Az egységnyi útra eső energiaveszteség

$$-\frac{\mathrm{d}E_1}{\mathrm{d}x} = \frac{\nu\langle T \rangle}{\nu\lambda} = n\sigma_{tot} \int_0^{T_m} \frac{T\sigma_m(T, E_1)}{\sigma_{tot}} \mathrm{d}T = n \int_0^{T_m} T\sigma_m(T, E_1)\mathrm{d}T$$

arányos a közeg sűrűségével. A közeg sűrűségtől független fékezőereje (a "stopping power") ezért

$$S(E_1) = -\frac{1}{n}\frac{\mathrm{d}E_1}{\mathrm{d}x} = \int_0^{T_m} T\sigma_m(T, E_1)\mathrm{d}T \equiv \frac{1}{2} T_m \sigma_{tr}, \tag{2.7}$$

ahol az energia transzport hatáskeresztmetszet definíciója az előzőek alapján:

$$\sigma_{tr} = \int \sigma(\theta) 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \mathrm{d}\Omega = 2\pi \int_{-1}^{1} \sigma(\theta)(1 - \cos\theta) \mathrm{d}\cos\theta.$$

2.3. POTENCIÁLSZÓRÁS

Ebben a fejezetben a kvantummechanikai potenciálszórás elméletét tekintjük át vázlatosan, támaszkodva a Kvantummechanika alaptárgyban tanult anyagra.

Potenciálszórásról akkor beszélünk, ha két részecske olyan potenciálon keresztül hat egymással kölcsön, amely csupán a két részecske közti távolságtól függ: $V = V(\mathbf{r})$. Mint ismeretes, ekkor a laboratóriumi rendszerben felírt kétrészecske Schrödinger egyenlet,

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_1}\Delta_{\mathbf{r}_1} + \frac{-\hbar^2}{2m_2}\Delta_{\mathbf{r}_2} + V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)\right]\Psi_L(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = E_L\Psi_L(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2),$$

egzaktul szétesik a tömegközéppont transzlációs mozgását leíró

$$\frac{-\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\Delta_{\mathbf{R}}\Phi(\mathbf{R}) = E_{cm}\Phi(\mathbf{R})$$

érdektelen egyenletre és a relatív koordináta rendszerben felírt ($E_L = E_{cm} + E$)

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$

egyenletre, amely a kétrészecske relatív, egymáshoz viszonyított mozgását írja le, a nyilvánvaló jelölésekkel. Ez utóbbi egyenlet az, amit ismert E és megfelelő határfeltételek mellett meg kell oldanunk, ha a szórás kísérletek eredményeiből következtetni akarunk a kölcsönhatási potenciálra.

Korábbi szóráselméleti tanulmányainkban bizonyítottuk, hogy $V(r \to \infty) \sim r^{-1-\epsilon}$ rövid hatótávolságú (árnyékolt) potenciálok esetén a szórási hullámfüggvény az aszimptotikus ($r \to \infty$) tartományban a következő általános alakban írható ($|\mathbf{k}_i| = k$):

$$\psi^{(+)a}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = A\left(e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{+ikr}}{r}\right) \equiv \Phi_{be} + \psi_{sz},$$

ahol minden információ a köcsönhatásról az $f(\theta,\phi)$ szórásamplitúdóba sűrűsödik.

2.3. Ábra. A hatáskeresztmetszet kvantummechanikai definícója.

A hatáskeresztmetszet kvantummechanikai tárgyaláshoz illeszkedő definíciója a következő: azon részecskék száma, amelyek egységnyi idő alatt, egységnyi $\phi = |\mathbf{j}_{be}|$ beeső fluxus mellett az $\mathbf{r}$ vektor körüli dΩ térszögbe szóródnak:

$$\sigma(\theta, E_1) = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{|\mathbf{j}\hat{\mathbf{r}}|}{|\mathbf{j}_{be}|} r^2 = \frac{\phi_r}{\phi} r^2,$$

ahol

$$\mathbf{j}_{be} = \Re \frac{\hbar}{im} \Phi_{be}^{*} \nabla_{\mathbf{r}} \Phi_{be} = |A|^2 \frac{\hbar \mathbf{k}_i}{m} = |A|^2 \mathbf{v}$$

a beeső áramsűrűség,

$$\phi_r = \mathbf{j}\hat{\mathbf{r}} = \Re \frac{\hbar}{im} \Psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)a*} \nabla_{\mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)a} \hat{\mathbf{r}} = (\mathbf{j}_{be} + \mathbf{j}_{sz} + \mathbf{j}_{int})\hat{\mathbf{r}}$$

a teljes áramsűrűség radiális része, amelyből a differenciális hatáskeresztmetszethez csak a $\mathbf{j}_{sz}$ szórt áramsűrűség ad járulékot:

$$\mathbf{j}_{sz}\hat{\mathbf{r}} = |A|^2 v \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2} + \mathcal{O}(r^{-3}),$$

mivel a $\mathbf{j}_{int}$ interferenciából származó áramsűrűség csak előreszórás esetén véges (ld. optikai tétel), a beeső áramsűrűség pedig nem ad járulékot a hatáskeresztmetszethez. Így a

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2$$

alapvető kvantummechanikai differenciális hatáskeresztmetszet kifejezéshez jutunk, amiből a teljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma_{tot} = \int |f(\theta,\varphi)|^2 \mathrm{d}\Omega. \tag{2.8}$$

Az energia transzport hatáskeresztmetszet csak egy $(1 - \cos\theta)$ faktorban tér el a szórási szögek eloszlását jellemző differenciális hatáskeresztmetszettől, mivel $(1 - \cos\theta)$ arányos az energiaveszteség átlagával:

$$\sigma_{tr} = \int |f(\theta,\varphi)|^2 (1 - \cos\theta) \mathrm{d}\Omega. \tag{2.9}$$

Ez utóbbi kifejezést diffúziós hatáskeresztmetszetnek is szokás nevezni.

Parciális hullámok módszere

Amennyiben a potenciál csak $|\mathbf{r}|$-től függ, alkalmazható a parciális hullámok módszere, amikor a szórási hullámfüggvény Legendre-függvények szerint sorba fejthető:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l \psi_l(r) P_l(\cos\theta).$$

A szórási amplitúdó ilyenkor csak a szórási szög függvénye, és a következőképpen írható:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1) P_l \cos(\theta),$$

amiből a teljes hatáskeresztmetszetre a

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \tag{2.10}$$

a transzport hatáskeresztmetszetre pedig* a

$$\sigma_{tr} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2 (\delta_l - \delta_{l+1}) \tag{2.11}$$

képletek adódnak, ahol az új mennyiség, δ_l, a fázistolás. A fázistolás, nevével összhangban, azt mutatja meg, hogy a radiális hullámfüggvény

* Ld. függelék

aszimptotikus részének a fázisa mennyire tér el a szabad mozgás hullámfüggvényének fázisától:

$$\psi_l(r \to \infty) = \frac{A_l}{kr} \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l).$$

Ismétlésképpen idézzük fel a radiális hullámfüggvényre vonatkozó Schrödinger egyenletet:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} r + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 \right) \psi_l(k;r) = 0.$$

A megoldáshoz szükséges két határfeltétel közül a végtelenbelit az imént írtuk fel, a másik lehet az origóbeli regularitás: $\psi_l(r \to 0) \sim r^l$.

Fázistolással kapcsolatos tételek, szabályok.

A gömbszimmetrikus potenciálon történő szórást a fázistolás egyértelműen meghatározza. Ezért, ha ismerjük a fázistolásokat az összes $(l = 0, 1, ...\infty)$ parciális hullámban, akkor a szórásprobléma teljesen megoldottnak tekinthető, minden feltett kérdésre válasz adható.

Ezért igen fontos a $\delta_l(k)$ fázistolások viselkedésének ismerete az energia (ehelyett általában a $k \sim \sqrt{E}$ hullámszámot használjuk) és impulzusmomentum (l) függvényében. Regge és Levinson foglalkozott ezzel a kérdéskörrel behatóan a 30-as, 40-es években. Vizsgálataikból tudjuk, hogy zérus energián $\delta_l(0) = n_l\pi$-vel egyenlő, ahol n_l az l-dik parciális hullámban létrejövő kötött állapotok száma. Amennyiben zérus energián is van kötött állapot, akkor az összefüggés $\delta_l(0) = (n_l + 1/2)\pi$-re módosul.

Végtelen energián a szórópotenciál hatása nyilván elhanyagolható a részecske végtelen kinetikus energiájához képest, így szabad mozgásunk van, azaz a fázistolás zérus: $\delta_l(k \to \infty) = 0$.

$l = 0$ esetre $\delta_0(k)$ a centrális ütközés fázistolását jelenti, aminek kis energiák esetén van jelentősége (vö. $l_{max} \sim kr_0$ klasszikus összefüggéssel, ahol r_0 a potenciál hatótávolsága). $l \to \infty$ esetére $\delta_{l\to\infty} = 0$ a távoli ütközések fázistolását jelenti, ami zérus, mivel a potenciál már nem gyakorol hatást a részecskére.

Friedel oszcilláció és összegszabály

Friedel fontos összefüggést vezetett le a szennyeződések indukálta potenciálon történő elektronszórás fázistolásaira. Eredménye a szilárdtestfizika azon tételén alapul, hogy az elektrongáz teljesen leárnyékolja a beléhelyezett Z töltést. A szennyeződés körül indukálódó ΔN többlet elektronállapotok száma így megegyezik a Z töltéssel:

$$Z = \Delta N = 4\pi \int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r[\rho(r) - \rho_0], \tag{2.12}$$

ahol

$$\rho_0 = 2 \int_{k<k_F} \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} |\Phi_\mathbf{k}(\mathbf{r})|^2$$

a szennyeződés bevitele előtt uralkodó töltéssűrűség, amit a szabadon mozgó elektronok alakítottak ki, ρ pedig a szennyeződésen szóródást szenvedő elektronok megváltozott sűrűsége:

$$\rho = 2 \int_{k<k_F} \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} |\Psi_\mathbf{k}(\mathbf{r})|^2.$$

Először vizsgáljuk meg (2.12) integrandusának viselkedését $r \to \infty$ esetén.

$$\lim_{r\to\infty} (\rho - \rho_0) \sim \frac{2 \cdot 4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2 \mathrm{d}k$$

$$\times \sum_l \left(\frac{\sin^2(kr + \delta_l - l\pi/2)}{k^2 r^2} - \frac{\sin^2(kr - l\pi/2)}{k^2 r^2} \right) (2l+1) =$$

$$= \sum_l \frac{2l+1}{\pi^2 r^2} \int_0^{k_F} \mathrm{d}k \frac{1}{2} \Big(1 - \cos(2kr + 2\delta_l - l\pi) - 1 + \cos(2kr - l\pi) \Big).$$

Most felhasználjuk azt, hogy az elektronállapotok nagyrésze be van töltve és szóródás csak k_F környékén lehetséges. Ezért $\delta_l(k)$-t Taylor sorba fejtve, $\delta_l(k) \sim \delta_l(k_F) + (k - k_F) \frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}k}\Big|_{k=k_F}$, a fenti levezetés továbbfolytatható:

$$\lim_{r\to\infty} (\rho - \rho_0) \sim$$

$$\sim \sum_l \frac{2l+1}{2\pi^2 r^2} (-1)^l \int_0^{k_F} \left(\cos 2kr - \cos\left[2k(r + \frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}k}) + 2\delta_l(k_F) - 2k_F \frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}k}\right] \right) \mathrm{d}k$$

$$\sim \frac{1}{4\pi^2 r^3} \sum_l (2l+1)(-1)^l \Big(\sin 2k_F r - \sin\left[2k_F r + 2\delta_l(k_F)\right] \Big)$$

$$\sim \frac{\cos 2k_F r}{r^3}. \tag{2.13}$$

Ezt az eredményt nevezik Friedel-oszcillációnak. Azt kaptuk, hogy a szennyeződés leárnyékolásában a nagy távolságoknak nincs szerepe, mivel ott a sűrűség r^{-3}-nal csökken és $r \sim \infty$ miatt igen gyorsan oszcillál, s így járuléka az állapotváltozáshoz elhanyagolható:

$$\int_{r>>1}^{\infty} r^2 \mathrm{d}r[\rho(r) - \rho_0] = 0.$$

Az $r \sim 0$ kis távolságok esetén másképpen fogjuk kiszámolni a Z töltésű szennyeződés által okozott állapotváltozást. Tekintsünk egy olyan R sugarú felületet Z körül, amely a vizsgált anyagot teljes egészében magában foglalja. Amennyiben nincs szennyeződés, azaz a perturbáló potenciál zérus ($V = 0$), R mentén a szabad elektronállapotokhoz tartozó megoldások tűnnek el:

$$j_l(kR) = 0 = \frac{1}{kR}\sin(kR - l\frac{\pi}{2}).$$

Ebből

$$kR = n\pi + l\frac{\pi}{2}, \qquad n = 0, 1, 2, ...$$

Ha van szennyeződés, akkor $V \neq 0$, és a perturbált elektronállapotok hullámfüggvénye tűnik el az R sugarú gömbfelületen. Ezek a hullámfüggvények pontosan a δ_l fázisban különböznek a szabad gömbhullámoktól (valamint egy C_l normálási állandóban):

$$\psi_l(kR) = 0 = \frac{C_l}{kR}\sin(kR + \delta_l - l\frac{\pi}{2}),$$

amiből

$$kR + \delta_l = n\pi + l\frac{\pi}{2}, \qquad n = 0, 1, 2, ...$$

adódik. Ez utóbbi képletből kiszámolhatjuk a k és $k + \mathrm{d}k$ közötti állapotok számát, amit δn-nel jelölünk:

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}k} = \frac{R}{\pi} + \frac{1}{\pi}\frac{\mathrm{d}\delta_l}{\mathrm{d}k} = \frac{\mathrm{d}(\delta n)}{\mathrm{d}k}.$$

Felismerjük, hogy itt az első tag reprezentálja a $V = 0$ esetéhez tartozó állapotok számát, a második tag pedig a szennyeződés általi változást, ami iránt érdeklődünk valójában. Ahhoz, hogy a szennyeződés hatására a k és $k + \mathrm{d}k$ intervallumban történő teljes állapotsűrűség változást megkapjuk, összegezni kell még az impulzusmomentum és mágneses kvantumszámokra:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}N = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\sum_{m_s m_l l}\frac{\delta_l}{\pi}.$$

Ebből integrálással kapjuk az akkumulálódott töltések (állapotok) számát:

$$\int_0^{k_F}\mathrm{d}k\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}k} = \Delta N = Z = \sum_{m_s m_l l}\frac{\delta_l(k_F)-\delta_l(0)}{\pi} =$$

$$= \frac{2}{\pi}\sum_l (2l+1)[\delta_l(k_F)-\delta_l(0)]. \tag{2.14}$$

Ez utóbbi összefüggést hívják Friedel összegszabálynak. Jelentősége abban van, hogy bármely, a szennyződések kristálybeli modellezésére kifejlesztt elméletnek teljesítenie kell ezen egzakt összefüggést a fázistolásokra nézve.

A fázistolások energiabeli változásának jelentése.

A valóságban mindig egy $\mathbf{k}_i$ körüli

$$\Phi(\mathbf{r}) = \int A(\mathbf{k}_i)\Phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})\mathrm{d}\mathbf{k}_i$$

hullámcsomag szóródik a céltárgyon. A bejövő $\mathbf{k}_i$ hullámszámok tartományát a kísérleti elrendezés kollimátora szabja meg.

Az egyszerűség kedvéért álljon hullámcsomagunk két homogén nyalábból, amelyeket $E \pm \mathrm{d}E$ energia, $k \pm \mathrm{d}k$ hullámszám és fix l jellemez:

$$\Phi_{be}(r \to \infty) \to \frac{1}{r}\left[e^{-i(k+\mathrm{d}k)r-\frac{i}{\hbar}(E+\mathrm{d}E)t} + e^{-i(k-\mathrm{d}k)r-\frac{i}{\hbar}(E-\mathrm{d}E)t}\right].$$

Ennek a radiálisan befelé futó hullámcsomagnak a centruma (maximuma) ott van, ahol a hullámok fázisai megegyeznek:

$$-i(k+\mathrm{d}k)r - \frac{i}{\hbar}(E+\mathrm{d}E)t = -i(k-\mathrm{d}k)r - \frac{i}{\hbar}(E-\mathrm{d}E)t,$$

azaz

$$r\mathrm{d}k + \frac{1}{\hbar}t\,\mathrm{d}E = 0.$$

Szórás után a radiálisan kifelé futó hullámban egy $\delta \pm \mathrm{d}\delta$ fázistolás indukálódik, amit az $S_\pm$-matrixszal fogunk figyelembe venni. [$S_\pm = \exp 2i(\delta \pm \mathrm{d}\delta)$.] Így

$$\psi_{sz}(r \to \infty) \to \frac{1}{r}\Big[e^{+i(k+\mathrm{d}k)r - \frac{i}{\hbar}(E+\mathrm{d}E)t + 2i(\delta+\mathrm{d}\delta)} +$$

$$+ e^{+i(k-\mathrm{d}k)r - \frac{i}{\hbar}(E-\mathrm{d}E)t + 2i(\delta-\mathrm{d}\delta)}\Big].$$

A centrum most az

$$r\mathrm{d}k - \frac{1}{\hbar}\, t\, \mathrm{d}E + 2\mathrm{d}\delta = 0$$

összefüggés által meghatározott

$$r = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}t - 2\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}k} = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}\left(t - 2\hbar\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}E}\right) = v(t - \Delta t).$$

pontban van, ahol $\Delta t = 2\hbar \mathrm{d}\delta/\mathrm{d}E = \frac{2}{v}\mathrm{d}\delta/\mathrm{d}k$. Itt felhasználtuk, hogy $E = (\hbar^2/2m)k^2$ és $v = \hbar k/m$. Pozitív $\mathrm{d}\delta/\mathrm{d}E$ esetén a szórás miatt a hullámcsomag késik, retardálódik a szórás nélküli esethez képest. Ilyen általában vonzó potenciálok esetén kialakuló rezonancia helyek körül van. Ellenkező esetben s ez az általános, a szórócentrum sietteti a szórt hullámot a szórás nélküli állapothoz képest.

Born közelítés

Igen fontos és gyakran alkalmazott közelítés, ami nagy energiájú szórás (azaz gyenge potenciál) esetén használható.

A Born közelítéshez legkönnyebben a Lippmann-Schwinger egyenletből lehet eljutni, amely a következő:

$$\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = \Phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) + \int G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi^+_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}')\mathrm{d}\mathbf{r}',$$

ahol

$$\Phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}}$$

a befutó hullámot jelöli,

$$U(\mathbf{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\mathbf{r})$$

a redukált potenciál s a szabad Green függvény kielégíti a

$$(\nabla_{\mathbf{r}}^2 + k^2)G_0^+(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\mathrm{d}\mathbf{k}'$$

definíciós egyenletet, amelyből meg is határozható analitikusan:

$$G_0^+(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3}\lim_{\epsilon\to 0}\int \frac{e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k'^2-k^2-i\epsilon}\mathrm{d}\mathbf{k}' = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

úgy, hogy kifutó aszimptotikával rendelkezzen:

$$\lim_{|\mathbf{r}|\to\infty} G_0^+(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}e^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}'} = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi}\Phi^*_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}')\frac{e^{ikr}}{r}.$$

Itt felhasználtuk a $\mathbf{k}_f = k\mathbf{r}/r$ összefüggést, amikor az exponensben vettük a limeszt.

Behelyettesítve ezt az összefüggést a Lippmann-Schwinger egyenletbe, a hullámfüggvény aszimptotikus alakját kapjuk,

$$\lim_{r\to\infty}\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}\right],$$

a szórásamplitúdó integrális reprezentációjával együtt:

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\langle\Phi_{\mathbf{k}_f}|\,U\,|\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}\rangle = -2\pi^2\langle\Phi_{\mathbf{k}_f}|\,U\,|\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}\rangle. \qquad (2.15)$$

A Lippmann-Schwinger egyenletet általában iterációval oldjuk meg. Kiindulunk egy nulladik közelítésből, ezt behelyettesítjük a jobboldalba, megkapjuk baloldalt az első közelítést, amit újra a jobboldalba helyettesítve nyerjük a második közelítést és így tovább, egészen addig, amíg az egymásra következő közelítő megoldások egymástól való eltérése kisebb egy előre meghatározott mennyiségnél. Az általános iterációs séma formálisan a

$$\psi_n = \Phi_{\mathbf{k}_i} + G_0 U\psi_{n-1}$$

alakban írható. Itt G_0 a szabad Green (integrál) operátort jelöli.

Az egyes iterációs megoldások a Born sorozat elemeit állítják elő:

$$\Phi_{\mathbf{k}_i} \equiv \Phi_0 \equiv \psi_{B0},$$

$$\Phi_0 + G_0 U \Phi_0 \equiv \Phi_0 + \Phi_1 \equiv \psi_{B1},$$

$$\Phi_0 + G_0 U \Phi_0 + G_0 U G_0 U \Phi_0 \equiv \Phi_0 + \Phi_1 + \Phi_2 \equiv \psi_{B2},$$

és így tovább. Az index a potenciál előfordulásának legmagasabb fokú hatványát jelöli. Az Born sorozat n-dik eleme:

$$\sum_{i=0}^{n} \Phi_i \equiv \psi_{Bn},$$

míg a teljes megoldás a

$$\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} = \sum_{i=0}^{\infty} \Phi_i \equiv \psi_{B\infty},$$

végtelen sor alakjában áll elő. Láthatjuk, hogy a Born sorozat konvergenciája akkor remélhető, ha gyenge a potenciál (U kicsi), vagy nagy az energia (G_0 erősen oszcillál). Bizonyítható, hogy a Born sorozat konvergens, ha a potenciál kielégíti az $\int r|U|\mathrm{d}r < 1$ feltételt.

A szórásamplitúdó Born sorozat alakban történő előállítása:

$$f = -2\pi^2 \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | U | \psi_{\mathbf{k}_i}^{+} \rangle = -2\pi^2 \sum_{n=0}^{\infty} \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | U | \psi_{Bn} \rangle \equiv \sum_{n=1}^{\infty} f_{Bn},$$

ahol az index ugyancsak a potenciál legmagasabb előfordulási hatványát jelöli.

A Born közelítés nem más, mint a Born sorozat megfelelő elemeinek használata az egzakt mennyiség helyett. Így például a szórásamplitúdó az elsőrendű Born közelítésben:

$$f_{B1} = -2\pi^2 \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | U | \psi_{B0} \rangle = -2\pi^2 \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | U | \Phi_{\mathbf{k}_i} \rangle,$$

másodrendű Born közelítésben:

$$f_{B2} = -2\pi^2 \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | U | \psi_{B1} \rangle = -2\pi^2 \langle \Phi_{\mathbf{k}_f} | U | \Phi_{\mathbf{k}_i} + G U \Phi_{\mathbf{k}_i} \rangle,$$

és így tovább.

A Born közelítés előnye az, hogy könnyen számolható analitikus formulák nyerhetők általa. Az elsőrendű Born közelítés a szórásamplitúdóra az

$$f_{B1} = -2\pi^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \mathrm{d}\mathbf{r}' = \frac{-1}{4\pi} U(\mathbf{q}) \tag{2.16}$$

képletet szolgáltatja, amely nem más, mint a potenciál Fourier transzformáltja a $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ transzfer impulzus térben.

Centrális potenciál esetén ez még tovább egyszerűsödik:

$$f_{B1} = -\frac{1}{4\pi}\int e^{i\mathbf{qr}}U(r)\mathrm{d}\mathbf{r}$$

$$= -\frac{2\pi}{4\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}r \int_{-1}^1 \mathrm{d}x\, e^{iqrx} r^2 U(r) = -\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2 j_0(qr)U(r),$$

ahol $|\mathbf{q}| = 2k\sin(\theta/2)$ az impulzus transzfer abszolút értéke, és felhasználtuk az alábbi integrált:

$$\int_{-1}^1 \mathrm{d}x\, e^{iqrx} = 2j_0(qr) = 2\sin(qr)/qr.$$

A hatáskeresztmetszet elsőrendű Born közelítésben:

$$\sigma_{B1} = |f_{B1}|^2 = \sigma_{B1}(k,\theta).$$

Parciális hullámokra vonatkozó Lippmann-Schwinger egyenlet és a Born közelítés

Gömbszimmetrikus potenciálszórás esetén a Lippmann-Schwinger egyenletnek is van parciális hullámú megfelelője:

$$\psi_l(k;r) = j_l(kr) + \int_0^\infty G_l(r,r')U(r')\psi_l(k,r'){r'}^2\mathrm{d}r',$$

ahol a parciális hullámú szabad Green-függvény

$$G_l(r,r') = kj_l(kr_<)n_l(kr_>),$$

tartalmazza az n_l szferikus Neumann-függvényt és a j_l szferikus Bessel-függvényt. Az $r_<(r_>)$ változó a kisebbet (nagyobbat) jelenti az r, r' változók közül. Elvégezve az $r \to \infty$ határátmenetet, kapjuk az aszimptotikus alakot:

$$\psi_l(k;r\to\infty) = j_l(kr) - \tan\delta_l n_l(kr),$$

és a fázistolás integrális reprezentációját

$$\tan\delta_l = -k\int_0^\infty j_l(kr)U(r)\psi_l(k;r)r^2\mathrm{d}r. \qquad (2.17)$$

A Born sorozatot a

$$\psi_l^{(n)} = j_l + G_l U \psi_l^{(n-1)}$$

rekurzióból állíthatjuk elő s így elsőrendű Born közelítésben

$$(\tan\delta_l)_{B1} = -k\int_0^\infty \big(j_l(kr)\big)^2 U(r) r^2 \mathrm{d}r, \tag{2.18}$$

másodrendű Born közelítésben

$$(\tan\delta_l)_{B2} = (\tan\delta_l)_{B1} +$$

$$+\int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^\infty \mathrm{d}r' j_l(kr) U(r) G_l(r,r') U(r') j_l(kr') r^2 r'^2.$$

A Bessel- és Neumann-függvények sorfejtéses alakját felhasználva argumentumaik kicsi ($k \to 0$), illetve nagy ($k \to \infty$) értékeire, bebizonyítható, hogy a Born sorozat akkor konvergens, ha a potenciálra teljesülnek az

$$\int_0^\infty r|U(r)|\mathrm{d}r < 2l+1, \qquad (k \to 0),$$

illetve az

$$\int_0^1 |U(r)|\mathrm{d}r < \infty \qquad (k \to \infty) \qquad \text{és az} \qquad \left|\int_0^\infty U(r)\mathrm{d}r\right| < \pi k$$

feltételek.

$U(r) = U_0 a e^{-r/a}/r$, Yukawa (árnyékolt Coulomb) potenciál esetén $(|U_0|a/k)[\log(ka)/\pi] < 1$ egyenlőtlenség kell teljesüljön a konvergencia fennállásához (W. Kohn feltétele).

2.4. KVANTUMMECHANIKAI COULOMB PROBLÉMA

Coulomb szórás esetén az $E = \hbar^2 k^2/2\mu > 0$ energia adott és $V = C/r = ZZ'e^2/r$ Coulomb potenciál. A Schrödinger egyenlet a következő egyszerű formába alakítható át:

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{r}) + \left(k^2 - \frac{\beta}{r}\right)\psi(\mathbf{r}) = 0, \qquad \beta = \frac{2\mu}{\hbar^2} ZZ'e^2.$$

Meg fogjuk mutatni, hogy a ψ szórási hullámfüggvény r nagy értékeire a

$$\psi(|\mathbf{r}| \to \infty) \sim I + S f_c(\theta)$$

asszimptotikus alakot ölti, ahol I a bejövő hullámot, S pedig a szórt hullámot reprezentálja. A kölcsönhatás végtelen hosszúhatótávolságából eredendően, mindkét hullám tartalmaz egy síkhullámot disztortáló faktort, így:

$$I = e^{ikz + i\alpha \ln k(r-z)},$$

és a szórás amplitúdó abszolút értéke

$$|f_c| = \left(\frac{ZZ'e^2}{2mv^2}\right) \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta} = \frac{C}{4E_r} \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta},$$

pontosan a Rutherford szórásképlet amplitúdójával egyezik meg. Szokás mondani ezért, hogy a kvantummechanika ugyanazt a Coulomb szórási hatáskeresztmetszetet adja, mint a klasszikus leírás. Fogjuk azonban látni, hogy a kvantummechanikai leírás egy egységnyi abszolút értékű fázisfaktort is szolgáltat a szórásamplitúdóhoz, ami azonos részecskék szórása esetén mérésekkel is kimutatható interferenciát, és ezáltal oszcillácókat fog eredményezni a hatáskeresztmetszetben a klasszikus (Rutherford) érték körül a szórási szög függvényeként.

A kvantummechanikai Coulomb problémát kétféle módon, henger illetve gömbi koordináta rendszert használva oldhatjuk meg.

Megoldás vázolása henger koordináta rendszerben.

Válasszuk le szórási hullámfüggvényünkből a z-irányú (bejövő) síkhullámot:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} F.$$

Behelyettesítés után a

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 F + 2ik \frac{\partial F}{\partial z} - \frac{\beta}{r} F = 0$$

differenciál egyenletre jutunk. [Az energia tag a Schrödinger egyenletből kiesett, mert $\partial_z \psi = ik\psi + \exp(ikz)\partial_z F$, $\partial_z^2 \psi = -k^2\psi + 2ik\exp(ikz)\partial_z F + \exp(ikz)\partial_z^2 F$.]

Ennek a parciális differenciálegyenletnek van $F = F(r - z)$ alakú megoldása, amint arról a behelyettesítés azonnal meggyőz bennünket:

$$2\left(1 - \frac{z}{r}\right) F'' + \frac{2}{r} F' + 2ik \left(\frac{z}{r} - 1\right) F' - \frac{\beta}{r} F = 0,$$

ahol a vessző a $\xi \equiv r - z = r(1-\cos\vartheta)$ argumentum szerinti deriválást jelenti. $r/2$-vel beszorozva kapjuk az ún. Kummer-Laplace egyenletet

$$\xi F'' + F' - ik\xi F' - \frac{\beta}{2}F = 0,$$

amely tényleg csak $r - z = \xi$-től függ $(0 \leq \xi \leq \infty)$.

A Kummer-Laplace egyenletek megoldásai a differenciálegyenletek elméletében jól ismertek. Ezek az elsőfajú hipergeometrikus függvények,

$${}_1F_1(a;c;z) = 1 + \frac{a}{c}\frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{z^2}{2!} + ...,$$

amelyek a

$$zF''(z) + (b-z)F'(z) - aF = 0$$

típusú differenciálegyenletet elégítik ki $F(0) = 1$ kezdeti feltétel esetén (ld. Abramowitz). Esetünkre alkalmazva, a megoldás:

$$F(\xi) = {}_1F_1(-i\alpha; 1; ik\xi),$$

ahol $\alpha = \beta/2k = mZZ'e^2/\hbar^2 k = ZZ'e^2/\hbar v$ a Sommerfeld paraméter. A hipergeometrikus függvények elméletéből ismeretes, hogy F aszimptotikusan két részre bontható (ld. Abramowitz):

$$F(\xi \to \infty) = W_1 + W_2,$$

ahol

$$W_1 = \frac{e^{\frac{1}{2}\pi\alpha}}{\Gamma(1+i\alpha)}\left(1 + \frac{\alpha^2}{ik\xi}\right)e^{i\alpha\ln k\xi},$$

és

$$W_2 = \frac{e^{\frac{1}{2}\pi\alpha}}{\Gamma(-i\alpha)}\frac{e^{ik\xi}}{ik\xi}e^{-i\alpha\ln k\xi}.$$

Tehát, ha e^{ikz}-vel szorozzuk F-et, akkor W_1 a bejövő, W_2 pedig a kimenő szórt hullámot képviseli. Viszont egységnyi amplitúdójú beeső hullámra van szükségünk ahhoz, hogy az $f_c(\theta)$ szórásamplitúdót le tudjuk olvasni. Ezért a most kapott F-et még normálnunk kell (be kell szoroznunk e^{ikz}-n kívül még) az $e^{-\frac{1}{2}\pi\alpha}\Gamma(1+i\alpha)$ faktorral is. Az így nyert fizikai megoldás

$$\psi(r,\theta) = e^{-\frac{1}{2}\pi\alpha}\Gamma(1+i\alpha)\,{}_1F_1\big(-i\alpha; 1; ikr(1-\cos\theta)\big)e^{ikz}$$

a kívánt aszimptotikát fogja mutatni:

$$\psi(r \to \infty, \theta) = I + S f_c(\theta),$$

ahol

$$I = \left(1 + \frac{\alpha^2}{ik(r-z)}\right) e^{ikz + i\alpha \ln k(r-z)},$$

$$S = \frac{1}{r} e^{ikr - i\alpha \ln 2kr},$$

és

$$f_c(\theta) = \frac{ZZ'e^2}{2mv^2} \frac{e^{-i\alpha \ln \sin^2 \frac{1}{2}\theta + i\pi + 2i\eta_0}}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta} =$$

$$= -\frac{\alpha}{2k} e^{2i\eta_0} \frac{e^{-i\alpha \ln \sin^2 \frac{1}{2}\theta}}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta}. \tag{2.19}$$

Itt bevezettük a centrális ütközés okozta Coulomb fázistolást, az $\eta_0 = \arg\Gamma(1 + i\alpha)$ definícióval. (Megjegyzések a fenti átalakításokkal kapcsolatban: $\exp(2i\eta_0) = \Gamma(1 + i\alpha)/\Gamma(1 - i\alpha)$; a W_2 nevezőjében szereplő $\xi = r(1 - \cos\theta) = r\,2\sin^2\frac{\theta}{2}$ tényező elemei felismerhetők egyrészt az S, másrészt a szórásamplitúdó nevezőjében.)

A szórásamplitúdó első kifejezéséből világosan látható, hogy független a $\hbar$ Planck állandótól. Ezért lehetsége az, hogy a kvantumos és a klasszikus levezetés azonos

$$\sigma_c = |f_c(\theta)|^2 = \left(\frac{ZZ'e^2}{2mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{1}{2}\theta}$$

differenciális hatáskeresztmetszet értéket szolgáltat, amely szimmetrikus a $\theta = 90^o$ körül (ld. 2.4 ábra). Eltérést a klasszikus számolás eredményétől a (2.19)-ben megjelenő fázisfaktor jelenti, amely már függ – az α Sommerfeld paraméteren keresztül – a Planck állandótól, és azonos részecskék ütközése esetén mérésekkel kimutatható konzekvenciái vannak.

2.4. Ábra. Egyrészecske szórás esetén a kvantumos Coulomb szórási differenciális hatáskeresztmetszet megegyezik a klasszikussal.

Azonos részecskék ütközése

Azonos részecskék esetén a kvantummechanikában megkülönböztetünk feles spinű (fermion) részecskéket, illetve egész spinű (bozon) részecskéket. Két azonos fermion hullámfüggvénye antiszimmetrikus, két azonos bozon részecske hullámfüggvénye szimmetrikus a kétrészecske változók felcserélésével szemben. Ütközés esetén ez a szimmetria a szórásamplitúdóban jelentkezik. Zérus spinű bozonok (pl. alapállapotú oxigén atommagok) ütközése esetén a hatáskeresztmetszet

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_q = \left|f_c(\theta)+f_c(\pi-\theta)\right|^2 = \left|f_c(\theta)\right|^2+\left|f_c(\pi-\theta)\right|^2+2\Re\left[f_c(\theta)f_c^*(\pi-\theta)\right],$$

mivel nem tudunk különbséget tenni a direkt és a (virtuálisan = zérus energiafelhasználás mellett) kicserélődött részecskék között. A klasszikus esethez képesti különbség itt az interferencia tag megjelenésében van, mert

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{cl} = \left|f_c(\theta)\right|^2 + \left|f_c(\pi-\theta)\right|^2.$$

Colulomb szórás esetén $\theta = \pi/2$ szórási szögnél a kvantummechanika által jósolt hatáskeresztmetszet bozonokra tehát a klasszikus Rutherford érték kétszerese

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_q = 2\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{cl}, \qquad \theta = \frac{\pi}{2}$$

amit a mérések igazolnak. De nemcsak $\theta = \pi/2$ szórásszög esetén van eltérés a klasszikus formulától, hanem általánosan is kiszámolhatjuk Coulomb szórásra bozonok ütközése esetén az ún. Mott-formulát:

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{Mott} = \left(\frac{\alpha}{2k}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4\frac{1}{2}\theta} + \frac{1}{\cos^4\frac{1}{2}\theta} + \frac{2\cos\left(2\alpha\ln\tan\frac{1}{2}\theta\right)}{\sin^2\frac{1}{2}\theta\,\cos^2\frac{1}{2}\theta}\right]. \quad (2.20)$$

Ebből látjuk, hogy a klasszikushoz (első két taghoz) képesti eltérést az interferencia tag nagy α Sommerfeld paraméter (alacsony energia, nagy töltések) esetén várható. A mérések minden esetben a kvantummechanikai Mott-formulát igazolják (ld. 2.5 ábra).

2.5 Ábra. Bozon ütközések differenciális hatáskeresztmetszete a szórásszög függvényében, $\alpha = 0.5$ és 5 esetén. Folytonos vonal: klasszikus leírás. Szaggatott vonal: kvantumos leírás. A mérési értékeket pontok jelölik.

Fermionok esetén, pl. 1/2 spinű protonok üközése esetén a nempolarizált nyalábban 1/4 valószínűséggel található szinglett ($S = 0$), 3/4 valószínűséggel triplett ($S = 1$) állapot. Az előzőhöz szimmetrikus, az utóbbihoz antiszimmetrikus térszerű hullámfüggvény társul, így

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{p-p,Mott} = \frac{1}{4}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{S=0} + \frac{3}{4}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{S=1} =$$

$$= \frac{1}{4}\big|f_c(\theta) + f_c(\pi-\theta)\big|^2 + \frac{3}{4}\big|f_c(\theta) - f_c(\pi-\theta)\big|^2 =$$

$$= \big|f_c(\theta)\big|^2 + \big|f_c(\pi-\theta)\big|^2 - 2\Re\big[f_c(\theta)f_c^*(\pi-\theta) =$$

$$= \left(\frac{\alpha}{2k}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4\frac{1}{2}\theta} + \frac{1}{\cos^4\frac{1}{2}\theta} - \frac{\cos\left(2\alpha\ln\tan\frac{1}{2}\theta\right)}{\sin^2\frac{1}{2}\theta\,\cos^2\frac{1}{2}\theta}\right].$$

Fermionok ütközése esetén $\theta = \pi/2$ szórás szögre minimumot kapunk (ld. 2.6 ábra), ellentétben a bozon ütközéssel, ahol maximumot kaptunk.

2.6 Ábra. Proton ütközések differenciális hatáskeresztmetszete a szórásszög függvényében. Folytonos vonal: klasszikus leírás. Szaggatott vonal: kvantumos leírás. A mérési értékeket pontok jelölik.

Könnyen belátható, hogy S spinű azonos részecskék ütközése esetén

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right) = \left|f(\theta)\right|^2 + \left|f(\pi-\theta)\right|^2 + \frac{(-1)^S}{2S+1}\Re f(\theta) f^*(\pi-\theta).$$

A Coulomb szórás tárgyalása parciális hullámok módszerével

Mivel a Coulomb potenciál csak $|\mathbf{r}|$-től függ, a szórási hullámfüggvényt sorba fejthetjük impulzusmomentum sajátfüggvények (gömbfüggvények) szerint mind az $\hat{\mathbf{r}}$, mind a $\hat{\mathbf{k}}_i$ irányok körül. Az gömbfüggvényekre vonatkozó addíciós tétel felhasználásával kapjuk a jól ismert parciális hullámok szerinti sorfejtést:

$$\psi = \frac{1}{r}\sum_{l=0}^{\infty} w_l(k,r) P_l(\cos\theta) \equiv e^{ikz} F \to I + S f_c(\theta).$$

Ezt behelyettesítve a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2(\theta,\varphi)}{2mr^2}\right]\psi + \frac{ZZ'e^2}{r}\psi = \frac{\hbar}{2m}k^2\psi$$

Schrödinger egyenletbe, kapjuk a radiális szórási fügvényre vonatkozó másodrendű közönséges differenciál egyenletet:

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\alpha k}{r}\right) w_l(k,r) = 0.$$

Ha most a radiális szórási függvényből leválasztjuk a bejövő gömbhullámot jelentő $\exp(ikr)$ faktort, valamint az origóbeli viselkedésre jellemző $(kr)^{l+1}$ faktort,

$$w_l(k,r) = e^{ikr}(kr)^{l+1} f(\xi),$$

akkor a $\xi \equiv -2ikr$-től függő f_l függvény éppen egy Kummer-Laplace egyenletet fog kielégíteni:

$$\xi f_l'' + (2l+2-\xi)f_l' - (l+1+i\alpha)f_l = 0,$$

amelynek reguláris megoldása az alábbi hipergeometrikus függvény:

$$f_l = C_l\, {}_1F_1(l+1+i\alpha; 2l+2; -2ikr),$$

amely a C_l állandóval egyenlő az origóban.

Így a reguláris radiális szórási hullámfüggvények Coulomb szórás esetén az ún. szférikus Coulomb hullámfüggvények:

$$w_l^{reg}(k,r) \equiv F_l(kr) = C_l e^{ikr}(kr)^{l+1}\, {}_1F_1(l+1+i\alpha; 2l+2; -2ikr),$$

amelyek aszimptotikus viselkedése a hipergeometrikus függvények kézikönyveiből leolvasható:

$$w_l^{reg}(k, r \to \infty) = F_l(kr \to \infty)$$

$$= C_l \frac{e^{\frac{1}{2}\pi\alpha + i\eta_l}(2l+1)!}{2^l \Gamma(l+1+i\alpha)} \sin(kr - l\frac{\pi}{2} - \alpha \ln 2kr + \eta_l),$$

ahol bevezettük a Coulomb fázistolást az

$$\eta_l = \arg\Gamma(l+1+i\alpha)$$

definícióval.

A Kummer Lapalce egyenlet másik megoldása az origóban irreguláris. Ebből kapjuk az irreguláris Coulomb hullámfüggvényt,

$$w_l^{irreg}(k,r) \equiv G_l(kr) \to -\cos(kr - l\frac{\pi}{2} - \alpha \ln 2kr + \eta_l),$$

amely cos-os aszimptotikával rendelkezik a végtelenben.*

---

* A Coulomb hullámfüggvényeket több kézikönyv részletesen tárgyalja. Az egyik legjobb összefoglalás az "Abramowitz"-ban található.

Az aszimptotikus alakokat felhasználva, meghatározható a Coulomb szórásamplitúdó parciális hullámú kifejtése is:

$$f_c(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\eta_l}-1\right)P_l(\cos\theta),$$

ahol megjelent a Coulomb $S-$matrix:

$$S_l^c(k) \equiv e^{2i\eta_l} = \frac{\Gamma(l+1+i\alpha)}{\Gamma(l+1-i\alpha)},$$

összhangban a Coulomb fázistolás előbbi definíciójával.

A Coulomb szórásamplitúdó parciális hullámok szerinti kifejtése birtokában most már kétféleképpen is fel tudjuk írni a Coulomb szórás végtelent adó teljes hatáskeresztmetszetét:

$$\sigma_c^{tot} = \int |f_c|^2 \mathrm{d}\Omega = \left(\frac{ZZ'e^2}{4E}\right)^2 2\pi\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\sin\theta\frac{1}{\sin^4\theta/2} =$$

$$= \frac{1}{4k^2}\sum_l(2l+1)\sin^2\eta_l = \infty.$$

A transzport hatáskeresztmetszet is végtelen Coulomb szórás esetén

$$\sigma_{tr} = 2\pi\int_{-1}^{1}\mathrm{d}x|f_c(\theta)|^2(1-x) = \frac{2}{k^2}\sum_l(l+1)\sin^2(\eta_l-\eta_{l+1}) = \infty,$$

ugyanis vegyük figyelembe, hogy

$$\arg\Gamma(z+1) = \arg\Gamma(z) + \arctan\frac{y}{x}$$

s így

$$\eta_{l+1} = \arg\Gamma(l+2+i\alpha) = \eta_l + \arctan\frac{\alpha}{l+1},$$

azaz

$$\eta_{l+1}-\eta_l = \arctan\frac{\alpha}{l+1}.$$

Vegyük továbbá figyelembe, hogy

$$\sin^2\gamma = \frac{\tan^2\gamma}{1+\tan^2\gamma}.$$

Ezért

$$\sigma_{tr}^{c} = \frac{2}{k^2} \sum_l (l+1) \frac{\left(\frac{\alpha}{(l+1)}\right)^2}{\left(1 + \frac{\alpha^2}{(l+1)^2}\right)} =$$

$$= \frac{2}{k^2} \sum_l (l+1) \frac{\alpha^2}{(l+1)^2 + \alpha^2} \to \sum_l \frac{1}{l} = \infty.$$

Megjegyzendő, hogy zérus töltés (zérus Sommerfeld paraméter) esetén a Coulomb hullámfüggvények átmennek a megfelelő Bessel, ill. Neumann hullámfüggvényekbe:

$$F_l(\alpha = 0, kr) = krj_l(kr),$$

$$G_l(\alpha = 0, kr) = krn_l(kr).$$

Módosított Coulomb szórás

Módosítsuk a Coulomb potenciált az r_0 sugáron belüli tartományban $\hat{V}(r)$ potenciállal:

$$V = \hat{V} + V_c, \qquad \hat{V} = 0, \quad r > r_0.$$

Ilyen módosított Coulomb potenciállal találkozunk tipikusan atommagok, vagy nehéz ionok ütközése esetén.

Legyen a módosító potenciálunk olyan, ami kiküszöböli a Coulomb potenciál origóbeli szingularitását:

$$\hat{V} = -\frac{ZZ'e^2}{r} + \frac{ZZ'e^2}{r_0}, \qquad r \leq r_0.$$

Az aszimptotikus hullámfüggvényben most meg fog jelenni a módosító potenciál hatása is az $\hat{f}$ szórásamplitúdón keresztül:

$$\psi = \frac{1}{r} \sum_l w_l P_l \to I + S\big(f_c(\theta) + \hat{f}(\theta)\big).$$

Az $r > r_0$ tartományban az általános megoldás kifejezhető a reguláris és irreguláris Coulomb hullámfüggvények szuperpozíciójaként:

$$w_l(k, r > r_0) = F_l(kr) + \tan\hat{\delta}_l G_l(kr),$$

ahol $\hat{\delta}_l$ a nukleáris potenciálból eredő fázistolás (a Coulomb potenciál jelenléte mellett!). A teljes fázistolás

$$\delta_l^{tot} = \hat{\delta}_l + \eta_l.$$

Feladatunk a teljes szórásamplitúdó azon részének meghatározása, amely a módosító potenciálból ered.

$$f(\theta) = f_c(\theta) + \hat{f}(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)\left(e^{2i(\eta_l+\hat{\delta}_l)} - 1\right) P_l(\cos\theta) =$$

$$= \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)\left(e^{2i\eta_l} - 1\right) P_l(\cos\theta) +$$

$$+\frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)e^{2i\eta_l}\left(e^{2i\hat{\delta}_l} - 1\right) P_l(\cos\theta) =$$

$$= f_c(\theta) + \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)e^{2i\eta_l}\left(e^{2i\hat{\delta}_l} - 1\right) P_l(\cos\theta).$$

Tehát

$$\hat{f}(\theta) = +\frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)e^{2i\eta_l}\left(e^{2i\hat{\delta}_l} - 1\right) P_l(\cos\theta).$$

Összefüggés a fázistolások és a kötött állapoti energiák között

Ismeretes az, hogy az $S-$matrix pólusai a komplex $k-$sík pozitív imaginárius tengelyén a potenciál kötött állapoti energiáit adják meg. Potenciálszórásra $S = \exp 2i\delta_l(k)$, ahol $\delta_l(k)$ a potenciál okozta fázistolás az l-edik parciális hullámban. Coulomb szórás esetén a fázistolás $\delta_l^c = \arg\Gamma(l+1+i\alpha)$, ahol α a Sommerfeld paraméter: $\alpha = ZZ'e^2/\hbar v = (ZZ'e^2/\hbar)\sqrt{m/2E}$. A Coulomb $S-$matrixnak, *

$$S_l^{(c)} = e^{2i\delta_l^c} = \frac{\Gamma(l+1+i\alpha)}{\Gamma(l+1-i\alpha)},$$

* a Coulomb $S-$matrix kiszámításánál figyelembe vesszük, hogy egy komplex szám és adjungáltja a következőképpen írható: $a = |a|e^{i\arg a}$, $a^* = |a|e^{-i\arg a}$ s így

$$\frac{a}{a^*} = e^{2i\arg a}.$$

a gamma függvények tulajdonságai alapján ott van pólusa, ahol

$$l - i\alpha = -n, \qquad n = 1, 2, ...$$

Tehát $E = -|E|$-t írva $n + l = i\alpha = (ZZ'e^2/\hbar)\sqrt{m/2|E|}$, s ebből

$$E_{nl} = -|E| = -\frac{1}{2}\left(\frac{ZZ'\sqrt{m}e^2}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{(n+l)^2},$$

ami éppen a Rydberg sorozattal egyezik meg.

Ez az eredmény az S-matrix analitikus tulajdonságát tükrözi, és felhívja a figyelmet az S-matrix centrális szerepére.

2.5. KÉTDIMENZIÓS POTENCIÁLSZÓRÁS

Jóllehet környező világunk háromdimenziós, azonban a kísérleti szilártestfizika fejlődése, vékony rétegek, speciális mágneses felületek előállítása manapság szükségessé teszik az elmélet számára, hogy foglalkozzon a kétdimenziós szórással, és leszármaztassa a kísérletek kiértékeléséhez szükséges szóráselméleti alapformulákat.

A Schrödinger egyenlet kétdimenzióban:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E\psi, \qquad \psi = \psi(x,y) \to e^{ikx} + f(\theta)\frac{e^{ikx}}{\sqrt{r}}.$$

Csak gömbszimmetrikus potenciál esetére szorítkozunk, ami két dimenzióban "körszimmetrikus" potenciálnak felel meg (a potenciál csak az r körsugártól függ): $V = V(r)$.

Ilyen esetben, csakúgy mint három dimenzióban, célszerű áttérni a (kétdimenziós) polár koordináta rendszerre ($x = r\cos\theta$, $y = r\sin\theta$), mert a hullámfüggvény ezekben a változókban szeparálható:

$$\psi(x,y) = R(r)T(\theta), \qquad \Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 = \frac{1}{r}\partial_r r \partial_r + \frac{1}{r^2}\partial_\theta^2.$$

Átírva a Schrödinger egyenletet polár koordinátás alakra és osztva ψ-vel, kapjuk:

$$\frac{r^2}{R}(R'' + \frac{1}{r}R') + r^2(k^2 - U(r)) = -\frac{1}{T}\frac{\partial^2 T}{\partial\theta^2} = m^2 = \acute{a}ll.$$

Itt a szokásos $E = \hbar^2 k^2/2m$ és $U = 2mV/\hbar^2$ jelölést alkalmaztuk.

A jobboldali egyenlőségből a szögmozgást jellemző T-re kapunk egyenletet:

$$\frac{\mathrm{d}^2 T}{\mathrm{d}\theta^2} + m^2 T = 0,$$

amelynek megoldása

$$T = Ce^{im\theta},$$

ahol C és m meghatározandó állandók. Mivel $T(\theta) = T(\theta + 2\pi)$ azonos állapotokat kell jellemezzen, $m = 0, 1, 2....$ Másrészt a megoldás vagy páros vagy páratlan $\theta = 0$-ra való tükrözés szempontjából. De a megoldásnak θ-ban szimmetrikusnak kell lennie, mivel $\psi \neq 0$ $\theta = 0$ esetén. Azaz

$$T(\theta) = C \cos m\theta = T(-\theta).$$

Kétdimenzióban a Jacobi determináns r, így a C normálási állandó

$$1 = |C|^2 \int_0^{2\pi} \cos^2\theta \mathrm{d}\theta$$

egyenletből $C = 1/\sqrt{\pi}$-nek adódik. Tehát a kvantált szögmozgást leíró normált egyértékű megoldás:

$$T_m = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos m\theta, \quad m = 0, 1, 2, ..., \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi.$$

Így azt kaptuk, hogy akárcsak a háromdimenziós esetben, a kétdimenziós potenciálszórás probléma is sorbafejthető "parciális hullámok" szerint:

$$\psi = \sum_{m=0}^{\infty} R_m(r) T_m(\theta).$$

A radiális mozgást az

$$R_m'' + \frac{1}{r} R_m' + \left(k^2 - U(r) - \frac{m^2}{r^2} \right) R_m = 0$$

differenciálegyenlet megoldásai szolgáltatják. Zérus potenciál, $U = 0$ esetén ezen egyenlet megoldása a Bessel és Neumann-féle henger függvények, $J_m(kr)$ és $N_m(kr)$.

Mármost a szórási hullámfüggvény kétdimenzióban is egy beeső síkhullám és egy a szórócentrumról radiálisan kifelé haladó "körhullám" szuperpozíciójából tevődik össze

$$\psi(r,\theta) \to e^{ikx} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}, \tag{2.21}$$

ahol az $f(\theta)$ szórásamplitúdóból kaphatjuk meg a potenciálra jellemző differenciális szórási "hatáshosszt":

$$\lambda(\theta) = |f(\theta)|^2,$$

ami hosszúság jellegű mennyiség.

A differenciális szóráshossz származtatása

Hasonlóan a háromdimenziós potenciálszórás esetéhez, itt is ki kell fejteni a síkhullámot Bessel függvények szerint, majd fel kell használni ezek aszimptotikus tulajdonságait.

Az "Abramowitz" 9.1.44-45 egyenlete szerint

$$\cos(z\cos\theta) = J_0(z) + 2\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^m J_{2m}(z)\cos(2m\theta)$$

és

$$\sin(z\cos\theta) = 2\sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m J_{2m+1}(z)\cos([2m+1]\theta).$$

Ezekből könnyen meghatározzuk a bejövő síkhullám Bessel függvények szerinti kifejtését $(z = kr)$:

$$e^{ikx} = e^{ikr\cos\theta} = \cos(z\cos\theta) + i\sin(z\cos\theta) =$$

$$= \sum_{m=0} \epsilon_m i^m \cos(m\theta) J_m(kr), \quad \text{ahol} \quad \epsilon_m = 2, \quad ha \quad m \neq 0, \quad \epsilon_0 = 1.$$

Szintén az Abramowitzból (vagy más kézikönyvből) kinézhetők az alábbi aszimptotikus alakok:

$$J_m(kr) \to \left(\frac{2}{\pi kr}\right)^{1/2} \cos\left(kr - \pi\frac{m+1/2}{2}\right)$$

és

$$N_m(kr) \to \left(\frac{2}{\pi kr}\right)^{1/2} \sin\left(kr - \pi\frac{m+1/2}{2}\right).$$

Abban a térrészben (síkrészben), ahol a potenciál már zérus, a radiális egyenlet legáltalánosabb megoldása a Bessel és Neumann-függvények lineárkombinációja:

$$R_m(kr) = A'_m J_m(kr) + B'_m N_m(kr) \to$$

$$\to A_m \frac{1}{(kr)^{1/2}} \cos\left(kr - \pi\frac{m+1/2}{2} + \delta_m\right),$$

ahol már vettük a végtelenbeli aszimptotikus alakot, és bevezettük az ismeretlen A'_m és B'_m normálási együtthatókkal kifejezhető, de végső soron a potenciállal kapcsolatos szórási alapmennyiséget, a δ_m fázistolást. (A fázistolás zérus $V = 0$ esetén, mivel ekkor $R_m = J_m$.) Tehát a teljes hullámfüggvény aszimptotikus alakja:

$$\psi(r \to \infty, \theta) = \sum_{m=0}^{\infty} A_m \frac{1}{(\pi kr)^{1/2}} \cos\left(kr - \pi\frac{m+1/2}{2} + \delta_m\right) \cos(m\theta),$$

amit összevetve a (2.21) alatt felírt kanonikus alakkal, meghatározhatjuk (egyenlővé téve az e^{ikr}, illetve az e^{-ikr} együtthatóit) az A_m normálási állandót:

$$A_m = 2\epsilon_m i^m \frac{1}{(kr)^{1/2}} e^{i\delta_m}$$

és a szórásamplitúdó kifejezését:

$$f(\theta)^{(2d)} = \frac{1}{(2\pi ik)^{1/2}} \sum_{m=0}^{\infty} \epsilon_m \cos(m\theta)\left(e^{2i\delta_m} - 1\right).$$

(Ez a képlet nagyon emlékeztet a háromdimenziós szórásamplitúdó

$$f^{(3d)}(\theta) = \frac{1}{(2ik)} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta)\left(e^{2i\delta_l} - 1\right)$$

kifejezésére.)

A teljes hatáshosszt megkapjuk abszolút érték képzéssel és a szögre vonatkozó integrál elvégzésével:

$$\lambda = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta |f(\theta|^2 =$$

$$= \frac{1}{2\pi k} \sum_{m,m'} \epsilon_m \epsilon_{m'} \left(e^{2i\delta_m} - 1\right)^* \left(e^{2i\delta_{m'}} - 1\right) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \cos(m\theta) \cos(m'\theta).$$

Most kihasználjuk, hogy

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \cos(m\theta) \cos(m'\theta) = \begin{cases} \pi\delta_{mm'} & \text{ha} \quad m \neq 0 \\ 2\pi\delta_{mm'} & \text{ha} \quad m = 0 \end{cases},$$

és

$$\left(e^{2i\delta_m} - 1\right)^* \left(e^{2i\delta_m} - 1\right) = 4\sin^2\delta_m.$$

Így a hatáshossz kifejezése a következőképpen alakítható tovább:

$$\lambda = \frac{4}{k}\epsilon_0^2 \sin^2\delta_0 + \frac{2}{k}\sum_{m=1}\epsilon_m^2 \sin^2\delta_m = \frac{4}{k}\sum_{m=0}\epsilon_m \sin^2\delta_m.$$

(Ez a képlet összevetendő a háromdimenziós esetre kapott

$$\sigma_{tot}^{(3d)} = \frac{1}{4k^2}\sum_{l=0}(2l+1)\sin^2\delta_l$$

kifejezéssel.)

Példa. Szóródás merev körön. Merev kör esetén a potenciál:

$$V(r < a) = \infty,$$

$$V(r \geq a) = 0.$$

Megoldás $r > a$ térrészben:

$$R_m(kr) = A_m J_m(kr) + B_m N_m(kr).$$

A folytonosság miatt $r = a$ határon a hullámfüggvény eltűnik:

$$0 = A_m J_m(ka) + B_m N_m(ka),$$

amiből

$$B_m/A_m = -J_m(ka)/N_m(ka).$$

A fázistolás az aszimptotikus radiális hullámfüggvényből olvasható le:

$$R(kr \to \infty) = A_m \left(\frac{2}{\pi kr}\right)^{1/2} \cos\left(kr - \pi\frac{m+1/2}{2}\right) +$$

$$+B_m\left(\frac{2}{\pi kr}\right)^{1/2}\sin\left(kr-\pi\frac{m+1/2}{2}\right)$$

$$=C_m\left(\frac{2}{\pi kr}\right)^{1/2}\cos\left(kr-\pi\frac{m+1/2}{2}+\delta_m\right),$$

ahol $C_m^2=A_m^2+B_m^2$, és

$$\tan\delta_m=-\frac{B_m}{A_m}=\frac{J_m(ka)}{N_m(ka)}.$$

Háromdimenziós esetben

$$\tan\delta_l=\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}.$$

Born közelítés kétdimenziós szórás esetén.

Az alábbiakban **r**-en az (x,y) koordinátákat értjük.

A ψ hullámfüggvény felírható, mint a $V=0$ esetén érvényes (beeső) szabad hullámfüggvény, ψ_0, valamint a kifutó aszimptotikát tartalmazó, a kölcsönhatás által modifikált Φ hullámfüggvény szuperpozíciója:

$$\psi(\mathbf{r})=\psi_0(\mathbf{r})+\Phi(\mathbf{r})\to\psi_0+\frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}f(\theta).$$

Ez a hullámfüggvény valóban kielégíti a

$$\left(\nabla^2+k^2-U\right)\psi=0,$$

Schrödinger egyenletet, ugyanis

$$\left(\nabla^2+k^2\right)\psi(\mathbf{r})=\left(\nabla^2+k^2\right)\Phi(\mathbf{r})=U(\psi_0+\Phi).$$

Bevezetve a kétdimenziós Green függvényt,

$$\left(\nabla^2+k^2\right)G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$

a háromdimenziós eljárásoknál hasonló módon, kontúr integrálási technikával meghatározhatjuk analitikusan a kifutó aszimptotikát biztosító szabad Green függvényt:

$$G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}')=i\pi H_0^{(1)}(k\rho)\to\left(\frac{2\pi}{k\rho}\right)^{1/2}e^{ik\rho+i\pi/4},$$

ahol $\rho^2 = (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2$ és az első fajú Hankel függvény kifejezhető a Bessel, illetve Neumann függvényekkel: $H_0^{(1)} = J_0 + iN_0$. G_0 valóban kifutó aszimptotikát biztosít, ugyanis

$$e^{ik\rho} = e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = e^{ik\sqrt{r^2+r'^2-2rr'\cos\theta}} = e^{ikr\sqrt{1+(r'/r)^2-2(r'/r)\cos\theta}}$$

$$\to e^{ikr}e^{-ikr'\cos\theta} = e^{ikr}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}.$$

A Green függvény segítségével a Schrödinger egyenletet felírhatjuk a határfeltételeket is magába foglaló Lippmann-Schwinger integrálegyenlet formájában:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\mathrm{d}\mathbf{r}',$$

amely formailag teljesen azonos a háromdimenziós LS egyenlettel, és belőle ezért hasonló módon minden közelítés, illetve integrális szórást jellemző mennyiség leszármaztatható. Például, a szórásamplitúdó integrális alakja:

$$f(\theta) = -\left(\frac{2\pi}{k}\right)^{1/2} e^{\frac{i\pi}{4}} \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\mathrm{d}\mathbf{r}',$$

Az elsőrendű Born közelítés formulák szintén hasonlóak a háromdimenziós esetéhez. Például

$$f_{B1}(\theta) = -\left(\frac{2\pi}{k}\right)^{1/2} e^{\frac{i\pi}{4}} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}')\mathrm{d}\mathbf{r}',$$

ahol $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ az impulzus megváltozás.

Gömb(kör)szimmetrikus potenciál esetén,

$$f(\theta)_{B1} = -\left(\frac{(2\pi)^3}{k}\right)^{1/2} e^{\frac{i\pi}{4}} \int J_0(qr')U(r')r'\mathrm{d}r'.$$

Coulomb szórás kétdimenzióban.

Ezek után könnyen el tudjuk képzelni, hogy sok matematikával hasonló formulák nyerhetők a kvantummechanikai kétdimenziós Coulomb szórásra is, mint amiket levezettünk háromdimenziós esetben. A számítások menete hasonló a háromdimenziós tárgyaláséhoz, ezért itt most csak a főbb képleteket közöljük levezetés nélkül, mindig összehasonlítva a háromdimenziós eset megfelelő formulájával.

A Coulomb szórásamplitúdók:

$$f_c^{(2d)} = \frac{\alpha}{\sqrt{2k}}\sqrt{i}\frac{\Gamma(\frac{1}{2}+i\alpha)}{\Gamma(1-i\alpha)}\frac{e^{-i\alpha\ln\sin\frac{1}{2}\theta}}{\sin^2\frac{1}{2}\theta},$$

$$f_c^{(3d)} = \frac{\alpha}{2k}(-1)\frac{\Gamma(1+i\alpha)}{\Gamma(1-i\alpha)}\frac{e^{-i\alpha\ln\sin^2\frac{1}{2}\theta}}{\sin^2\frac{1}{2}\theta},$$

ahol korábban $e^{2i\eta_0}$ formában írtunk fel az $S_0 = \frac{\Gamma(1+i\alpha)}{\Gamma(1-i\alpha)}$ (háromdimenziós) Coulomb S-matrixot.

A Coulomb szórás differenciális hatáskeresztmetszetei:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_c^{(2d)}}{\mathrm{d}\Omega} = \left|f_c^{(2d)}\right|^2 = \frac{1}{2}\frac{\alpha}{k}\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}}\tanh\pi\alpha \rightarrow \sigma_{tot}^{c,2d} = \infty,$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_c^{(3d)}}{\mathrm{d}\Omega} = \left|f_c^{(3d)}\right|^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{\alpha}{k}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}} \rightarrow \sigma_{tot}^{c,3d} = \infty.$$

Tehát kétdimenzióban is végtelen a hatáskeresztmetszet (hatáshossz).

A momentum transzfer hatáskeresztmetszet kétdimenziós Coulomb szórásra:

$$\sigma_m^{c,2d} = \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta(1-\cos\theta)\left|f_c^{(2d)}\right|^2 = \frac{1}{2}\frac{\alpha}{k}\tanh\pi\alpha\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta\frac{(1-\cos\theta)}{\sin^2\frac{\theta}{2}} =$$

$$= \frac{1}{2}\frac{\alpha}{k}\tanh\pi\alpha\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta\, 2 = \frac{2\pi\alpha}{k}\tanh\pi\alpha < \infty.$$

Látjuk, hogy itt lényeges különbség adódik a háromdimenziós szórás esetéhez képest, ahol a momentum transzport hatáskeresztmetszet végtelennek adódott. Ez mindenképpen rávilágít arra, hogy a jelenleg előtérbe kerülő kétdimenziós rendszerek vizsgálatában még több meglepetésre számíthatunk.

felhasználjuk a $|\Gamma(\frac{1}{2}+i\alpha)|^2 = \pi/\cosh\pi\alpha$ és $|\Gamma(1+i\alpha)|^2 = \pi\alpha/\sinh\pi\alpha$ összefüggéseket

2.6. Függelék.

A transzport hatáskeresztmetszet kiszámítása fázistolások segítségével.

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \left(e^{2i\delta_n} - 1 \right) P_n(x)$$

jelöléssel a szórásamplitúdóra, a transzport hatáskeresztmetszet a következő:

$$\sigma_{tr} = 2\pi \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x |f(\theta)|^2 (1-x)$$

$$= 2\pi \frac{1}{4k^2} \int_{-1}^{1} (1-x) \Big[\Big(\sum_n (2n+1)(\cos 2\delta_n - 1) P_n(x) \Big)^2$$

$$+ \Big(\sum_m (2m+1)(\sin 2\delta_m) P_m(x) \Big)^2 \Big] \mathrm{d}x$$

$$= 2\pi \frac{1}{4k^2} \int_{-1}^{1} (1-x) \sum_n (2n+1)^2 \left[(\cos 2\delta_n - 1)^2 + \sin^2 2\delta_n \right] P_n^2(x) \mathrm{d}x$$

$$+ \frac{1}{4k^2} \int_{-1}^{1} (1-x) \sum_{n \neq m} (2n+1)(2m+1) \big[(\cos 2\delta_n - 1)(\cos 2\delta_m - 1)$$

$$+ \sin 2\delta_n \sin 2\delta_m] P_n(x) P_m(x) \mathrm{d}x$$

$$= 2\pi \frac{1}{4k^2} \int_{-1}^{1} \sum_n (2n+1)^2 \left[(\cos 2\delta_n - 1)^2 + \sin^2 2\delta_n \right] P_n^2(x) \mathrm{d}x$$

$$+ 2\pi \frac{1}{4k^2} \int_{-1}^{1} (-x) \sum_{n \neq m} (2n+1)(2m+1) \big[(\cos 2\delta_n - 1)(\cos 2\delta_m - 1)$$

$$+ \sin 2\delta_n \sin 2\delta_m] P_n(x) P_m(x) \mathrm{d}x,$$

mivel az első tagban az x-re vonatkozó integrálás az integrandus páratlan volta miatt, a második tagban az '1'-re vonatkozó integrálás a Legendre-polinomok ortogonalitása miatt zérust ad. Most a szögletes zárójelekben álló kifejezéseket egyszerüsítjük, illetve átalakítjuk.

$$\left[(\cos 2\delta_n - 1)^2 + \sin^2 2\delta_n \right] = 2 - 2\cos 2\delta_n = 4 \sin^2 \delta_n,$$

és

$$\left[(\cos 2\delta_n - 1)(\cos 2\delta_m - 1) + \sin 2\delta_n \sin 2\delta_m \right] =$$

$$= 4\sin^2\delta_n \sin^2\delta_m + 4\sin\delta_n \sin\delta_m \cos\delta_n \cos\delta_m.$$

Behelyettesítve és az egyszerűsítéseket elvégezve:

$$\sigma_{tr} = \frac{2\pi}{k^2}\sum_n (2n+1)\sin^2\delta_n \int_{-1}^{1} P_n^2(x)\mathrm{d}x$$

$$-\frac{2\pi}{k^2} 2\sum_{n<m}(2n+1)(2m+1)\big[\sin^2\delta_n\sin^2\delta_m + \sin\delta_n\sin\delta_m\cos\delta_n\cos\delta_m\big]$$

$$\times\int_{-1}^{1} xP_{n<m}(x)P_m(x)\mathrm{d}x.$$

Felhasználva a Legendre polinomokra vonatkozó ismert összefüggéseket,

$$\int P_n P_m = \frac{2}{2n+1}\delta_{nm},$$

$$xP_n = \frac{1}{2n+1}(nP_{n-1} + (n+1)P_{n+1}),$$

$$\int xP_{n<m}P_m\mathrm{d}x = \frac{1}{2n+1}\Big(n\delta_{n-1,m} + (n+1)\delta_{n+1,m}\Big)\frac{2}{2m+1}$$

$$= \frac{1}{2n+1}\Big(0 + (n+1)\delta_{n+1,m}\Big)\frac{2}{2m+1},$$

elvégezzük az integrálásokat, és a második tagban összegzünk m-re:

$$\sigma_{tr} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_n (2n+1)\sin^2\delta_n$$

$$-\frac{4\pi}{k^2}\sum_n 2(n+1)\big[\sin^2\delta_n\sin^2\delta_{n+1} + \sin\delta_n\sin\delta_{n+1}\cos\delta_n\cos\delta_{n+1}\big].$$

Most az első tagot kétfelé bontjuk, a második tagot pedig háromfelé:

$$\sigma_{tr} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_n n\sin^2\delta_n + \frac{4\pi}{k^2}\sum_n (n+1)\sin^2\delta_n$$

$$-\frac{4\pi}{k^2}\sum_n (n+1)(1-\cos^2\delta_n)\sin^2\delta_{n+1} - \frac{4\pi}{k^2}\sum_n (n+1)\sin^2\delta_n\sin^2\delta_{n+1}$$

$$-\frac{4\pi}{k^2}\sum_n 2(n+1)\sin\delta_n\sin\delta_{n+1}\cos\delta_n\cos\delta_{n+1}.$$

Itt az első tag kiesik a második sor első kifejezésének első tagjával, ugyanis

$$\sum_n n\sin^2\delta_n - \sum_n (n+1)\sin^2\delta_{n+1} = 0.$$

Marad összesen négy tagunk:

$$\sigma_{tr} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_n (n+1)\sin^2\delta_n + \frac{4\pi}{k^2}\sum_n (n+1)\cos^2\delta_n \sin^2\delta_{n+1}$$

$$-\frac{4\pi}{k^2}\sum_n (n+1)\sin^2\delta_n \sin^2\delta_{n+1}$$

$$-\frac{4\pi}{k^2}\sum_n 2(n+1)\sin\delta_n \sin\delta_{n+1}\cos\delta_n\cos\delta_{n+1},$$

amiből az első és a harmadik összevonható,

$$\sigma_{tr} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_n (n+1)\sin^2\delta_n\cos^2\delta_{n+1} + \frac{4\pi}{k^2}\sum_n (n+1)\cos^2\delta_n \sin^2\delta_{n+1}$$

$$-\frac{4\pi}{k^2}\sum_n 2(n+1)\sin\delta_n \sin\delta_{n+1}\cos\delta_n\cos\delta_{n+1},$$

és a maradék három tag egy teljes négyzetet ad:

$$\sigma_{tr} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_n (n+1)\big[\sin\delta_n\cos\delta_{n+1} - \cos\delta_n\sin\delta_{n+1}\big]^2$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\sum_n (n+1)\sin^2(\delta_n - \delta_{n+1})$$

.

3. INVERZ SZÓRÁSELMÉLET

Az előző fejezetben megismerkedtünk a kvantummechanikai szóráselmélet alapjaival. Láttuk, hogy a centrális potenciál ismeretében a Schrödinger egyenlet egyértelműen meghatározza a szórásamplitúdót,

$$V(r) \Longrightarrow f(E,\vartheta) = \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)\Big[S_l(E) - 1\Big]P_l(\cos\vartheta),$$

amelynek abszolút érték négyzete a mérhető hatáskeresztmetszet:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(E,\vartheta)|^2.$$

Jelen fejezetben a fordított, az inverz folyamat lehetőségét tanulmányozzuk. Feltételezzük hogy a szórásamplitúdó, vagy az $S-$matrix elem (s így a fázistolás is), kísérleti adatokból már ismert, s azt vizsgáljuk, miként lehet ezen információból egy centrális kölcsönhatásra következtetni:

$$f(E,\vartheta) \Longrightarrow S_l(E) \Longrightarrow V(r). \tag{3.1}$$

Rögtön észrevesszük, hogy az inverz probléma fizikailag túlhatározott. Az input információ *két* folytonos változótól függ, az E szórási energiától és a ϑ szórási szögtől (illetve, amennyiben $S_l(E)-$t használjuk input adatként, egy folytonos változótól és egy megszámlálhatóan végtelen sok diszkrét változótól), míg a keresett output csupán *egy* folytonos változót tartalmaz. Ezért kétféle inverz problémát ismerünk: rögzített energia melletti inverziót, amikor az input adat az összes $S_{l=0,1,2,\dots}(E = fix)$, valamint a rögzített l melletti inverziót, amikor az input adat az $S_{l=fix}(E = 0-\infty)$ függvény (plusz a kötött állapoti energák és normálási állandók). Az első esetben egy $V_{E=fix}(r)$, a másodikban pedig egy $V_{l=fix}(r)$ potenciált határozhatunk meg az adatokból. Az E és l független $V(r)$ potenciál meghatározásához a háromdimenziós inverz szórás elméletre lenne szükség, amely egyelőre nem ismeretes.

3.1. AZ INVERZ PROBLÉMA MEGOLDÁSA VÉGES ELEM MÓDSZERREL

A differenciálegyenletek nagy osztályának, így a Schrödinger egyenletnek is, általában nem ismeretes az egzakt analitikus megoldása. Numerikus eljárások esetén a megoldásokat a térváltozók diszkrét pontjaiban állítjuk elő véges elem módszerrel, azaz a differenciál egyenlet helyett a megfelelő differencia egyenletet oldjuk meg a folytonos változó $x_n = n\Delta$ diszkrét pontjaiban.

Tekintsük az egydimenziós differencia Schrödinger egyenletet a féltengelyen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{\Delta^2} + \Big[V_n - E\Big]\psi_n = 0, \qquad n = 0, 1, ...,$$

amely $\Delta \to 0$ esetén megy át a Schrödinger egyenletbe. (Itt az $f_n \equiv f(x_n)$ szokásos jelölést alkalmaztuk és Δ jelenti a lépésköz nagyságát.)

$k^2 = \varepsilon = E/\hbar^2/2m$ és $U_n = V_n/\hbar^2/2m$ új jelölések bevezetésével, átrendezés után kapjuk a megoldás alapjául szolgáló rekurziós képletet

$$\psi_{n-1} = \psi_n\big[2 + (U_n - \varepsilon)\Delta^2\big] - \psi_{n+1}. \tag{3.2}$$

Direkt probléma esetén ismerjük a potenciált, azaz az

$$U_n, U_{n-1}, ..., U_0 \qquad \text{(input)}$$

számsorozatot.

Tekintsük az $x_n > N\Delta$ rácspontokban eltűnő potenciál esetét

$$U_n = 0,\ n > N.$$

Ekkor az aszimptotikus határfeltétel a

$$\psi_n \sim e^{-ikn\Delta} - S(k)e^{ikn\Delta}, \qquad n > N \tag{3.3}$$

jól ismert módon írható, ahol $S(k)$ a meghatározandó (output) mennyiség [neve: $S-$matrix; $S = \exp(2i\delta)$, δ a fázistolás].

Direkt megoldásnál tehát a következő iterációs sémát alkalmazhatjuk:

$$\begin{array}{ll} U_n,\, \psi_n,\, \psi_{n+1}, & \Rightarrow \psi_{n-1}, \\ U_{n-1},\, \psi_{n-1},\, \psi_n, & \Rightarrow \psi_{n-2}, \\ \ldots \quad .. \quad \ldots & \\ U_1,\, \psi_1\, \psi_2, & \Rightarrow \psi_0. \end{array}$$

A keresendő $S-$matrix elemet a megoldás origóbeli regularitása határozza meg:

$$\psi_0 = 0.$$

Inverz probléma esetén az $S-$matrix (valamint az ε_λ sajátérték) ismert, és keressük az

$$U_n, U_{n-1}, ..., U_0 \qquad \text{(output)}$$

potenciál számsorozatot. Minthogy a (3.2) alatti iterációs egyenletben a ψ_n-ek is ismeretlenek, további információra, még egy egyenletre van szükségünk az inverz probléma megoldásához. A plusz információt a *teljességi* összefüggés szolgáltatja, amely az ε_λ, $\lambda = 1, 2, ...$ sajátértékekhez tartozó $\psi(\varepsilon_\lambda)$ sajátfüggvényekre vonatkozik és differencia formában a következőképpen írható:

$$\sum_\lambda \psi_n(\varepsilon_\lambda)\psi^*_m(\varepsilon_\lambda) = \delta_{nm}/\Delta. \tag{3.4}$$

(Amennyiben folytonos spektrumrész is van, a baloldalhoz még hozzá kell adni az

$$\int_0^{Emax} \psi_n(E)\psi^*_m(E)\mathrm{d}E$$

integrált.[1])

$\sum_\lambda \psi_n-$nel balról beszorozva a (3.2) alatti differencia Schrödinger egyenlet komplex konjugáltját, kapjuk a következő egyenletet ($U_n = U^*_n$) :

$$\sum_\lambda \psi_n(\varepsilon_\lambda)\psi^*_{n-1}(\varepsilon_\lambda) = \sum_\lambda \psi_n(\varepsilon_\lambda)\psi^*_n(\varepsilon_\lambda)\big[2 + (U_n - \varepsilon_\lambda)\Delta^2\big]$$

[1] A véges elem módszer érdekessége, hogy a folytonos spektrum korlátos: $E_{max} = 2\hbar^2/m\Delta^2$. Ez az eredmény a $\psi_n = \exp(i\theta n)$ szabad megoldás (3.2)-be való helyettesítésével kapható meg. A (3.4) alatti teljességi formula szintén (3.2) felhasználásával vezethető le, először az ortogonalitási összzefüggés bizonyítására, majd ebből a (3.4)-es formula származtatására.

$$-\sum_\lambda \psi_n(\varepsilon_\lambda)\psi^*_{n+1}(\varepsilon_\lambda).$$

A (3.4) teljességi összefüggés miatt a baloldal és a jobboldal második tagja eltűnik:

$$0=\sum_\lambda \psi_n(\varepsilon_\lambda)\psi^*_n(\varepsilon_\lambda)\left[2+(U_n-\varepsilon_\lambda)\Delta^2\right]$$

és ebből kapjuk a potenciált az összes $\psi_n(\varepsilon_\lambda)$ megoldás függvényeként az $x_n = n\Delta$ helyen:

$$U_n=\Delta\sum_\lambda \varepsilon_\lambda|\psi_n(\varepsilon_\lambda)|^2-\frac{2}{\Delta^2}. \tag{3.5}$$

(Folytonos spektrumrész esetén ehhez kell még hozzáadni a $\Delta\int_0^{Emax} E|\psi_n(E)|^2 \mathrm{d}E$ tagot.)

Tehát az energiafüggetlen U_n potenciál csak az összes $\psi_n(\epsilon_\lambda)$ megoldás ismeretében határozható meg. De ezek előállíthatók, hiszen $\psi_n(\varepsilon_\lambda)$ ismert $n > N$ esetén a rendelkezésre álló input $S(k)$ adatok miatt.[1] Ezért U_n kiszámolható és a fenti iterációs séma szerint ψ_{n-1} meghatározható (3.2)−ből minden egyes ϵ_λ energiaértékre. Ebből viszont U_{n-1} számolható ki (3.5) felhasználásával, majd újból a (3.2)-es iterációs Schrödinger egyenletből ψ_{n-2} határozható meg minden energiára. Ebből az U_{n-2} potenciál (3.5) segítségével, és így tovább, egészen U_0−ig.

3.2. FIX-L ESETE: GEL'FAND-LEVITAN-MARCHENKO EGYELETEK

Ebben a fejezetben Gel'fand és Levitan által az 50-es években, majd Marchenko által 1962-ben felállított integrálegyenletekhez fogunk eljutni az előző fejezetben már bevált véges elem módszer segítségével. [2]

---

[1] [egy c_λ normálási állandótól eltekintve, ami meghatározható, vagy szintén bemenő adatként szerepel.]

[2] Az említett szerzők orosz matematikusok, jelenleg többnyire az Egyesült Államokban, ill. Franciaországban dolgoznak. Marchenko és Levitan professzor részt vett a jegyzetírók által szervezett inverz szórás konferencián 1996-ban [ld. B. Apagyi, G. Endrédi, and P. Lévay (eds): Inverse and Algebraic Quantum Scattering Theory, Lecture Notes in Physics, Springer, Vol 488, (1997)].

A módszer referencia potenciál módszernek is nevezhető. Tekintsük ugyanis a (3.2) differencia Schrödinger egyenletet a $0 \leq r \leq \infty$ féltengelyen két potenciál, egy ismert $\breve{U}$ és a keresendő U potenciál esetén* $(n = 0, 1, 2, ...)$:

$$\varphi_{n+1} = \varphi_n[2+(U_n-\varepsilon)\Delta^2]-\varphi_{n-1} \qquad \breve{\varphi}_{n+1} = \breve{\varphi}_n[2+(\breve{U}_n-\varepsilon)\Delta^2]-\breve{\varphi}_{n-1},$$

ahol a φ ill. $\breve{\varphi}$ hullámfüggvények nemnormáltak.

Vegyük észre, hogy mindkét egyenletben azonos ε energia szerepel, amelyről feltesszük, hogy az U, tehát a megoldandó problémához tartozó sajátenergia (amely lehet diszkrét, vagy folytonos, vagy mindkettő; egy a lényeg, ez bemenő spektrális adatként fog szerepelni). Az általánosság megszorítása nélkül, az egyszerűség kedvéért vegyük a referencia potenciált zérusnak:

$$\varphi_{n+1} = \varphi_n[2+(U_n-\varepsilon)\Delta^2]-\varphi_{n-1} \qquad \breve{\varphi}_{n+1} = \breve{\varphi}_n[2+(0-\varepsilon)\Delta^2]-\breve{\varphi}_{n-1}.$$

A módszer lényegét könnyen észrevehetjük: $\varphi_0 = \breve{\varphi}_0 = 0, \varphi_1 = \breve{\varphi}_1 = \Delta$ kezdeti feltételekből kiindulva a megoldás az $n-$dik helyen az energia $(n-1)-$dik hatványaként áll elő,

$$\varphi_0 = 0, \varphi_1 = \Delta\varepsilon^0, \varphi_2 = c_0^{(2)}\varepsilon^0 + c_1^{(2)}\varepsilon^1, \varphi_3 = c_0^{(3)}\varepsilon^0 + c_1^{(3)}\varepsilon^1 + c_2^{(3)}\varepsilon^2, ...$$

$$\breve{\varphi}_0 = 0, \breve{\varphi}_1 = \Delta\varepsilon^0, \breve{\varphi}_2 = \breve{c}_0^{(2)}\varepsilon^0 + \breve{c}_1^{(2)}\varepsilon^1, \breve{\varphi}_3 = \breve{c}_0^{(3)}\varepsilon^0 + \breve{c}_1^{(3)}\varepsilon^1 + \breve{c}_2^{(3)}\varepsilon^2, ...,$$

azaz

$$\varphi_n = \sum_{i=0}^{n-1} c_i^{(n)}\varepsilon^i \qquad (n = 1, 2, ...) \qquad \breve{\varphi}_n = \sum_{i=0}^{n-1} \breve{c}_i^{(n)}\varepsilon^i$$

s ezért az ismeretlen $\underline{\varphi}$ megoldás az ismert $\underline{\breve{\varphi}}$ megoldás sorozattal kifejezhető:

$$\underline{\varphi} = c\breve{c}^{-1}\underline{\breve{\varphi}} \equiv \Delta \cdot K \cdot \underline{\breve{\varphi}}.$$

Itt mind c, mind $\breve{c}$ (ill. az utóbbi inverze) $N \times N-$es háromszög matrix, amelyek diagonális alatti része különbözik nullától. Szorzatuk, amely a $K-$matrixot definiálja, szintén háromszög matrix. A $K-$matrix a

* amelyekbe beleérthetjük az $l(l+1)/r^2$ centrifugális tagot

potenciált bonyolult módon tartalmazza, de energiafüggetlen. Általa az ismeretlen megoldás kifejezhető. Az $n-$ik pontban a megoldás nyilván a

$$\varphi_n(\varepsilon) = \Delta\Big(K_{nn}\breve{\varphi}_n(\varepsilon)+K_{n,n-1}\breve{\varphi}_{n-1}(\varepsilon)+K_{n,n-2}\breve{\varphi}_{n-2}(\varepsilon)+...+K_{n,1}\breve{\varphi}_1(\varepsilon)\Big)$$

összegként áll elő.

$\Delta \to 0$ határátmenetben kapjuk a megoldás *Povzner-Levitan reprezentáció*ját,

$$\varphi(\varepsilon, r) = \breve{\varphi}(\varepsilon, r) + \int_0^r \mathrm{d}r' K(r, r')\breve{\varphi}(\varepsilon, r'), \tag{3.6}$$

ahol K tehát egy energiafüggetlen, de az U potenciáltól nagyon is függő nemlokális operátor, amely a referencia hullámfüggvényre hat (amit viszont a 'valódi', tehát nem a referencia sajátenergiáknál kell ismernünk, ill. előállítanunk).

A K_{nm} matrix elemek potenciálfüggését tanulmányozva, egy igen egyszerű reláció állapítható meg:

$$U_n = \frac{1}{\Delta}\Big[K_{n+1,n} - K_{n,n-1}\Big]. \tag{3.7a}$$

$\Delta \to 0$ esetben ez az összefüggés átmegy az

$$U(r) = 2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}K(r, r) \tag{3.7}$$

alakba, azaz a potenciál meghatározható lenne, ha valamilyen független forrásból (egyenletből) ismernénk a K operátort.

* * *

Mielőtt továbbmennénk, lássunk az eddigiekre egy példát. A hullámfüggvényt $N = 4$ pontban fogjuk előállítani ($n = 0, 1, 2, 3$) s ezekre végezzük el a fenti műveleteket. Először a $c_i^{(n)}$ $(i = 0, 1, .., n-1)$ együtthatókat állítjuk elő:

$$\varphi_0 = 0$$

$$\varphi_1 = \Delta \cdot \varepsilon^0 \equiv c_0^{(1)}\varepsilon^0$$

$$\varphi_2 = \Delta(2 + U_1\Delta^2) \cdot \varepsilon^0 - \Delta^3\varepsilon^1 \equiv c_0^{(2)}\varepsilon^0 + c_1^{(2)}\varepsilon^1$$

$$\varphi_3 = [\Delta(2+U_1\Delta^2)(2+U_2\Delta^2)-3]\cdot\varepsilon^0 - \Delta^3[(2+U_2\Delta^2)+(2+U_1\Delta^2)]\varepsilon^1 + \Delta^5\varepsilon^2$$

$$\equiv c_0^{(3)}\varepsilon^0 + c_1^{(3)}\varepsilon^1 + c_2^{(3)}\varepsilon^2$$

A kifejezések rohamosan bonyolódnak, továbbszámolni csak formula manipulációs program segítségével érdemes.

A hullámfüggvényt vektor alakban írva:

$$\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_0^{(1)} & & & \\ c_0^{(2)} & c_1^{(2)} & & \\ c_0^{(3)} & c_1^{(3)} & c_2^{(3)} & \\ & . & . & . \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon^0 \\ \varepsilon^1 \\ \varepsilon^2 \\ \dots \end{pmatrix},$$

ahol a c matrix az előbbiek szerint

$$c = \Delta\times$$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2+U_1\Delta^2 & -\Delta^2 & & \\ (2+U_1\Delta^2)(2+U_2\Delta^2)-1 & -\Delta^2[(2+U_2\Delta^2)+(2+U_1\Delta^2)] & \Delta^4 & \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Ebből a $\breve{c}$ matrix könnyen felírható ($\breve{U}_n = 0$):

$$\breve{c} = \Delta \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & -\Delta^2 & & \\ 3 & -4\Delta^2 & \Delta^4 & \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Inverze:

$$\breve{c}^{-1} = \Delta^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2\Delta^{-2} & -\Delta^{-2} & & \\ 5\Delta^{-4} & -4\Delta^{-4} & \Delta^{-4} & \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Így a K matrix

$$K = \frac{1}{\Delta} c\breve{c}^{-1} = \Delta^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ \Delta^2 U_1 & 1 & & \\ \Delta^4 U_1 U2 & \Delta^2(U_1+U_2) & 1 & \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Most ellenőrizhetjük, hogy (7a) teljesül-e:

$$U_2 = \Delta^{-1}(K_{32} - K_{21}) = \Delta^{-1}(\Delta(U_1+U_2) - \Delta U_1) = U_2.$$

* * *

Ezen kis példa után továbbfolytatjuk az inverz szórás alapegyenletének származtatását, de nem a részletekbe menően.* Az alapegyenlet a $K-$ra vonatkozik s csupán spektrális információ (S, ε) szükséges a megoldáshoz.

Ahhoz, hogy egy $K-$t meghatározó egyenletet nyerjünk, nyilvánvalóan plusz információra van szükség. Ez a plusz információ megint a teljesség összefüggése:

$$\sum_\lambda c_\lambda^2 \varphi_m(\varepsilon_\lambda)\varphi_n(\varepsilon_\lambda) = \delta_{mn}/\Delta,$$

és

$$\sum_\lambda \breve{c}_\lambda^2 \breve{\varphi}_m(\breve{\varepsilon}_\lambda)\breve{\varphi}_n(\breve{\varepsilon}_\lambda) = \delta_{mn}/\Delta,$$

ahol c_λ és $\breve{c}_\lambda$ normálási állandókat jelölnek (nem tévesztendők össze az előző c kifejtési együtthatókkal). Felhasználva ezt a két egyeneletet és a két fenti iterációs egyenletet, az előző fejezetben ismertetett módszerrel (beszorzással és összegzéssel) kaphatunk egy meghatározó differencia egyenletet $K_{n,m}-$re.

Ebből $\Delta \to 0$ határátmenetben kapjuk a híres *Gel'fand-Levitan integráelgyenlet*et:

$$K(r,r') + g(r,r') + \int_0^r K(r,r'')g(r'',r')\mathrm{d}r'' = 0, \tag{3.8}$$

ahol az ún. szimmetrikus (input) kernel definíciója:

$$g(r,r') = \sum_\lambda c_\lambda^2 \breve{\varphi}(\varepsilon_\lambda, r)\breve{\varphi}(\varepsilon_\lambda, r') - \sum_\lambda \breve{c}_\lambda^2 \breve{\varphi}(\breve{\varepsilon}_\lambda, r)\breve{\varphi}(\breve{\varepsilon}_\lambda, r') = g(r', r).$$

(Folytonos spektrum esetén ehhez jön még egy járulék, ami az $S(E)-$matrixot tartalmazza.)

A szimmetrikus kernel csak spektrális (megfigyelési) adatokat $(\varepsilon_\lambda, c_\lambda)$ tartalmaz inputként. Ismeretében megoldhatjuk a (3.8) alatti Gel'fand-Levitan egyenletet K-ra, amelynek diagonális elemének deriváltja adja (3.7) szerint a keresett inverz potenciált.

Marchenko egyenlete (3.8)-hoz teljesen hasonló, azzal ekvivalens. A különbség abból adódik, hogy Marchenko az iterációs megoldást

* A részletek megtalálhatók B. Zakhariev és A. Suzko, Direct and inverse problems (Springer, 1990) c. könyvben

az origóbeli kezdeti feltételek helyett az aszimptotikus információk figyelembevételével kezdte felépíteni, $\varphi_N, \varphi_{N-1}, \ldots$ Ezért egyenlete

$$K(r,r') + g(r,r') + \int_r^\infty K(r,r'')g(r'',r')\mathrm{d}r'' = 0, \tag{3.9}$$

és a Marchenko-féle input szimmetrikus kernel is kicsit más.

Megjegyzendő, hogy a Gel'fand-Levitan egyenlet, ill. a Marchenko egyenlet szigorú bizonyításokon alapul és a Sturm-Liouville operátor spektrál elméletéből nőtt ki.

3.3. FIX-E ESETE: A NEWTON-SABATIER MÓDSZER

1962-ben R. G. Newton gondolt arra, hogy ha az integrálegyenletes inverz módszer sikeres volt fix impulzusmomentum esetére a félegyenesen ($0 \le r \le \infty$), akkor megoldható a fix-energia melletti inverz probléma is valamilyen Gel'fand-Levitan-Marchenko egyenlethez hasonló integrálegyenlet segítségével. Míg a fix-l inverzió esetén a bemenő spektrális adatok a kötött és/vagy folytonos sajátenergiák (plusz a normálási állandók), addig a fix$-E$ melletti inverzió input adata $E > 0$ esetén az összes fázistolás $\{\delta_l\}$, vagy az összes $S-$matrix elem, $\{S_l\}$ lesz.

A Newton által felállított Gel'fand-Levitan típusú egyenlet a következő:

$$K(\rho,\rho') = g(\rho,\rho') - \int_0^\rho \mathrm{d}\rho''\, \rho''^{-2} K(\rho,\rho'')g(\rho'',\rho'), \tag{3.10}$$

ahol a szimmetrikus input kernel egy ismert $\breve{U}$ referencia potenciálhoz tartozó összes sajátfüggvény szerinti kifejtéssel konstruálható meg:

$$g(\rho,\rho') = \sum_{l=0}^\infty c_l \breve{\varphi}_l(\rho)\breve{\varphi}_l(\rho') = g(\rho',\rho). \tag{3.11}$$

A fenti egyenletekben ρ a szokásos dimenziótlan távolságot jelenti, $\rho = kr$, ahol k a hullámszám.

(3.10)-ben K az output kernel, amelyből az inverz potenciál kiszámolható a később megadott módon. (3.11)-ben az egyelőre ismeretlen c_l kifejtési együtthatókat majd a bemenő fázistolások határozzák meg, mint látni fogjuk.

A $\breve{\varphi}_l$ radiális hullámfüggvények egy referencia Schrödinger egyenletnek tesznek eleget, amelyet most célszerű módon a következő dimenziótlan formában írunk fel:

$$\breve{D}(\rho)\breve{\varphi}_l(\rho) = l(l+1)\breve{\varphi}_l(\rho), \tag{3.12}$$

ahol

$$\breve{D}(\rho) \equiv \rho^2 \left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + 1 - \breve{U}(\rho)\right], \tag{3.13}$$

és $\breve{U} = \breve{V}/E$, $E = \hbar^2 k^2/2\mu$, $\rho = kr$.

A szimmetrikus kernelnek nyilvánvalóak a következő tulajdonságai:

$$\breve{D}(\rho)g(\rho,\rho') = \breve{D}(\rho')g(\rho,\rho')$$

és

$$g(0,\rho') = g(\rho,0) = 0,$$

mivel a referencia hullámfüggvények regulárisak az origóban ($\breve{\varphi}(0) = 0$).

Newton 1962-ben bebizonyította*, hogy (3.10) egyértelműen megoldható $K(\rho,\rho')$–ra, és a keresett inverz potenciál

$$U = \breve{U} - \frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\frac{K(\rho,\rho)}{\rho}. \tag{3.14}$$

[Az inverz probléma egzisztencia és egyértelműségi tételének bizonyítását a következő alfejezetben találhatjuk meg. Itt lényeges szerepet fog játszani a

$$\xi(\rho,\rho') = D(\rho)K(\rho,\rho') - \breve{D}(\rho')K(\rho,\rho')$$

függvény, amelyről kimutatható, hogy kielégíti (10) homogén változatát. Mivel (3.10)-nek egyértelmű a megoldása K–ra, így a Fredholm alternatíva értelmében szükségképpen $\xi \equiv 0$ kell legyen, azaz

$$D(\rho)K(\rho,\rho') = \breve{D}(\rho')K(\rho,\rho').$$

A $D(\rho)$ differenciáloperátor

$$D(\rho) = \breve{D}(\rho) - \rho^2\big(U(\rho) - \breve{U}(\rho)\big)$$

---

* R. G. Newton, J. Math. Phys. 3, 75 (1962)

definíciójában szereplő ismeretlen $U(\rho)$ azon feltételből határozható meg a (3.14) alatti módon, hogy ξ kielégíti a homogén integrálegyenletet.] A (3.14) alatti inverz potenciál 'mellesleg' kielégíti a szórást leíró Schrödinger egyenletet,

$$D(\rho)\varphi_l(\rho) = l(l+1)\varphi_l(\rho), \tag{3.15}$$

$$D(\rho) \equiv \rho^2 \left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + 1 - U(\rho) \right], \tag{3.16}$$

amely reguláris megoldásai a

$$\varphi_l(0) = 0, \qquad \varphi_l(\rho \to \infty) = A_l(k) \sin(\rho - l\pi/2 + \delta_l(k)) \tag{3.17}$$

határfeltételek által tartalmazza a kísérleti (spektrális) információt. Ez a mérhető hatáskeresztmetszetből kivonható információ, a $\{\delta_l\}$ fázistolás sorozat határozza meg a szimmetrikus input kernelben előforduló c_l kifejtési együtthatókat is, amit a következőképpen láthatunk be. Helyettesítsük (3.11)-et (3.10)-be és végezzük el a kínálkozó összevonásokat:

$$\begin{aligned} K(\rho,\rho') &= \sum_l c_l \breve{\varphi}_l(\rho)\breve{\varphi}_l(\rho') - \int_0^\rho \mathrm{d}\rho'' \rho''^{-2} K(\rho,\rho'') \sum_l c_l \breve{\varphi}_l(\rho'')\breve{\varphi}_l(\rho') \\ &= \sum_l c_l \breve{\varphi}_l(\rho') \left[\breve{\varphi}_l(\rho) - \int_0^\rho \mathrm{d}\rho'' \rho''^{-2} K(\rho,\rho'')\breve{\varphi}_l(\rho'') \right] \\ &\equiv \sum_l c_l \breve{\varphi}_l(\rho')\varphi_l(\rho). \end{aligned}$$

Itt bevezettük a megoldási hullámfüggvények Povzner-Levitan reprezentációját,

$$\varphi_l(\rho) = \breve{\varphi}_l(\rho) - \int_0^\rho \mathrm{d}\rho' \rho'^{-2} K(\rho,\rho')\breve{\varphi}_l(\rho'), \tag{3.18}$$

amelyről még meg kell mutatni, hogy kielégíti (3.15)-öt (ld. következő fejezet).

Az átalakítások révén tehát megkaptuk a potenciált megadó $K(\rho,\rho')$ output kernel spektrális előállítását:

$$K(\rho,\rho') = \sum_l c_l \varphi_l(\rho)\breve{\varphi}_l(\rho'), \tag{3.19}$$

amit a Povzner-Levitan előállításba visszahelyettesítve, kapjuk a fix-energás inverz szórás probléma alapegyenletét, a *Newton-Regge egyenletet*:

$$\varphi_l(\rho) = \breve{\varphi}_l(\rho) - \sum_{l'} c_{l'} L_{ll'}(\rho)\varphi_{l'}(\rho), \tag{3.20}$$

ahol $L(\rho)$ a referencia függvényekből előállítható ismert matrix:

$$L_{ll'}(\rho) \equiv \int_0^\rho \mathrm{d}\rho' \rho'^{-2} \breve{\varphi}_l(\rho')\breve{\varphi}_{l'}(\rho').$$

Mármost az inverz probléma megoldási menete a következő.

(i) Az aszimptotikus tartományban ($\rho \to \infty$) a bemenő kísérleti információ felhasználásával megoldjuk a Newton-Regge egyenleteket c_l–re. (Valójában c_l és A_l meghatározása történik az egyenletek valós és imaginárius részének szétválasztása segítségével);

(ii) c_l–ek ismeretében, újra a Newton-Regge egyenleteket használva, kiszámítjuk a megoldási függvényeket, $\varphi_l(\rho)$–ket, a kívánt tetszőleges ρ pontban;

(iii) $K(\rho, \rho')$ spektrális előállításából kiszámítjuk a transzformációs kernel diagonális részét, amelyből (14) szerint deriválással megkapjuk a keresett inverz potenciált.

Numerikus szempontból az inverz feladatok tipikusan rosszul kondícionáltak. Ezért fontos a kapott inverz potenciálok tesztelése oly módon, hogy elvégezzük velük a direkt szórás számolást is, azaz megoldjuk (15)-öt, s a kapott output fázistolásokat összehasonlítjuk az input fázistolásokkal. Ha egyezést kapunk, megnyugodhatunk: inverz potenciálunk valódi megoldása a feladatnak, és más potenciál nem létezik az egyértelműség miatt. Amennyiben nem kapunk egyezést, a megoldás numerikus pontosságán kell javítanunk, illetve meg kell vizsgálnunk, hogy a bemenő adatsorozatunk eleget tesz-e az egyértelműségi és egzisztencia kritériumoknak (pl. $\delta_l < Cl^{-3-\epsilon}$ ld. később).

Megjegyzendő továbbá, hogy a 80-as évekig valós problémára nem volt használható a módszer. Scheid-nek* és munkatársainak köszönhető az, hogy manapság már rutinszerűen alkalmazható a (módosított) Newton-Sabatier módszer kísérleti adatok felhasználásával, pl. nehézion ütközésre, elektron atom/molekula ütközésre, s a szórást

* M. Münchow and W. Scheid, Phys.Rev. Letters 44,1299 (1980)

létrehozó effektív kölcsönhatási potenciál nagy biztonsággal történő meghatározására és elemzésére.

3.4. EGZISZTENCIA ÉS EGYÉRTELMŰSÉG

1) megoldás létezése:

A (10)-es integrálegyenlet kernelje, $\rho''^{-2}g(\rho'',\rho')$ Fredholm osztályba tartozik (folytonos és korlátos), így, ha nincs nemtriviális megoldása a homogén egyenletnek, akkor (10)-nek *van* megoldása. A korlátosságra elegendő feltétel az, hogy a kernel a Hilbert-Schmidt osztályba tartozzon, azaz

$$\int_0^R \mathrm{d}r\, r^{-2} \int_0^R \mathrm{d}r'\, r'^{-2} [g(r,r')]^2 = \sum_{ll'} c_l c_{l'} \left[L_{ll'}(R)\right]^2 < \infty.$$

2) egyértelműség:

Sabatier 1966-ben bebizonyította, hogy a Newton módszer egyértelmű megoldást ad, ha a fázistolásokra $\delta_l < Cl^{-3-\epsilon}$ érvényes. (P.C. Sabatier további alapvető vizsgálatokat is végzett Newton fix-energiás inverz módszerével kapcsolatban, ezért nevezik a módszert az irodalomban Newton-Sabatier módszernek.)

A Fredholm alternatíva alkalmazható (vagy egy megoldás van csak és ekkor a homogén egyenletnek csak triviális megoldása van, vagy van több megoldás, de ilyenkor a homogén egyenletnek van nemtriviális megoldása is).

Elegendő tehát bizonyítani, hogy a homogén egyenletnek csak triviális megoldása van. A bizonyítás indirekt: feltesszük, hogy a homogén egyenletnek van nemtriviális megoldása $\rightarrow$ ellentmondásra jutunk.

Legyen tehát a

$$\xi(\rho,\rho') = -\int_0^\rho \mathrm{d}\rho''\rho''^{-2}\xi(\rho,\rho'')g(\rho'',\rho') \qquad (HGL)$$

egyenletnek $\xi(\rho,\rho') \neq 0$ nemtriviális megoldása. Ekkor

$$\xi(\rho,\rho') = -\int_0^\rho \mathrm{d}\rho''\rho''^{-2}\xi(\rho,\rho'')\sum_l c_l\breve{\varphi}_l(\rho'')\breve{\varphi}_l(\rho')$$

$$= \sum_l c_l \Big[- \int_0^\rho \mathrm{d}\rho'' \rho''^{-2} \xi(\rho,\rho'') \breve{\varphi}_l(\rho'') \Big] \breve{\varphi}_l(\rho') = \sum_l c_l \varphi_l(\rho) \breve{\varphi}_l(\rho'),$$

ahol

$$\varphi_l(\rho) = - \int_0^\rho \mathrm{d}\rho' \rho'^{-2} \xi(\rho,\rho') \breve{\varphi}_l(\rho') \qquad (*)$$

a hullámfüggvény homogén egyenletnek megfelelő PL reprezentációja. Szorozzuk (*)-ot balról $\sum_l c_l \varphi_l(\rho)$−val:

$$\sum_l c_l \varphi_l^2(\rho) = - \int_0^\rho \mathrm{d}\rho' \rho'^{-2} \xi(\rho,\rho') \sum_l c_l \varphi_l(\rho) \breve{\varphi}_l(\rho')$$

$$= - \int_0^\rho \mathrm{d}\rho' \rho'^{-2} \xi^2(\rho,\rho')$$

Deriváljuk ezt az összefüggést ρ szerint.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} \sum_l c_l \varphi_l^2(\rho) = 2 \sum_l c_l \varphi_l(\rho) \varphi_l{}'(\rho)$$

$$= -\rho^{-2} \xi^2(\rho,\rho) - 2 \int_0^\rho \mathrm{d}\rho' \rho'^{-2} \xi(\rho,\rho') \frac{\partial \xi(\rho,\rho')}{\partial \rho}. \qquad (')$$

Másrészt deriváljuk (*)-ot, szorozzuk be $2c_l\varphi_l$−lel és összegezzünk:

$$\varphi_l{}'(\rho) = -\rho^{-2} \xi(\rho,\rho) \breve{\varphi}_l(\rho)$$

$$- \int_0^\rho \mathrm{d}\rho' \rho'^{-2} \frac{\partial \xi(\rho,\rho')}{\partial \rho} \breve{\varphi}_l(\rho'),$$

$$2 \sum_l c_l \varphi_l(\rho) \varphi_l{}'(\rho) = -2 \sum_l c_l \varphi_l(\rho) \breve{\varphi}_l(\rho) \rho^{-2} \xi(\rho,\rho)$$

$$-2 \int_0^\rho \mathrm{d}\rho' \rho'^{-2} \frac{\partial \xi(\rho,\rho')}{\partial \rho} \sum_l c_l \varphi_l(\rho) \breve{\varphi}_l(\rho')$$

$$= -2\rho^{-2} \xi^2(\rho,\rho) - 2 \int_0^\rho \mathrm{d}\rho' \rho'^{-2} \xi(\rho,\rho') \frac{\partial \xi(\rho,\rho')}{\partial \rho}. \qquad ('')$$

($'$) és ($''$) akkor lehet csak egyenlő, ha

$$\xi(\rho,\rho) \equiv 0.$$

Bizonyítottuk, hogy a megoldás a diagonális $K(\rho,\rho)$−ra egyértelmű.

Nemdiagonálisra való bizonyításhoz differenciáljuk (HGL)–t ρ szerint:

$$\frac{\partial\xi(\rho,\rho')}{\partial\rho} = -\int_0^\rho \mathrm{d}\rho''\rho''^{-2}\frac{\partial\xi(\rho,\rho'')}{\partial\rho}g(\rho'',\rho'), \qquad (HGL)$$

azaz

$$\frac{\partial\xi(\rho,\rho')}{\partial\rho}$$

is megoldása (HGL)–nek, amely $\rho\to\rho'$ limeszben eltűnik az előzőek szerint:

$$\lim_{\rho\to\rho'}\frac{\partial\xi(\rho,\rho')}{\partial\rho} = 0.$$

Újbóli deriválások segítségével belátjuk, hogy az n–edik parciális deriváltja is eltűnik $\xi(\rho,\rho')$–nak,

$$\lim_{\rho\to\rho'}\frac{\partial^n\xi(\rho,\rho')}{\partial\rho^n} = 0,$$

amelyből következik a nemdiagonális homogén megoldás eltűnése,

$$\xi(\rho,\rho')\equiv 0.$$

3) Az inverz potenciálra vonatkozó

$$U = \breve{U} - \frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\frac{K(\rho,\rho)}{\rho}$$

kifejezés bizonyítása azon alapul, hogy a

$$\xi(\rho,\rho')\equiv D(\rho)K(\rho,\rho') - \breve{D}(\rho')K(\rho,\rho')$$

összefüggés kielégíti (10) homogén változatát, tehát a $\xi\equiv 0$ kell legyen, azaz

$$D(\rho)K(\rho,\rho') = \breve{D}(\rho')K(\rho,\rho')$$

összefüggés érvényes, amelyet ki kell használni a következő pontbeli bizonyításhoz is.

4) A (18) alatti Povzner-Levitan reprezentáció eleget tesz a Schrödinger egyenletnek.

Alkalmazzuk (16)-ot (18)-ra, differenciáljunk, és integráljunk parciálisan, valamint használjuk ki az előző összefüggést. Viszonylagosan egyszerű számolással belátható a tétel. (Részletek megtalálhatók Murányi Ferenc: ^{12}C – ^{12}C rugalmas ütközést leíró nehézion potenciál meghatározása kvantummechanikai inverz szórással c. TDK dolgozatában [BME, 1997].)

3.5. INVERZ KVANTUM SZÓRÁS ÉS A NEMLINEÁRIS EVOLÚCIÓS EGYENLETEK MEGOLDÁSA.

Ebben a fejezetben a *nemlineáris* parciális differenciálegyenletek egzakt megoldását lehetővé tevő *inverz szórás transzformációval* (IST) fogunk megismerkedni, amely a Fourier-transzformáció általánosításaként fogható fel.

A nemlineáris evolúciós (elsőrendű parciális idNew deriváltat tartalmazó) egyenletek analitikus megoldásainak nagy szerepe van a fizikai alkalmazásokban a fizika szinte minden területén. Míg az előző fejezetekben ismertetett inverz kvantum szórás elméletek 'csupán' a kvantumos rendszerek tulajdonságainak megismeréséhez (ti. a működő effektív kölcsönhatások felderítéséhez) jelentenek eszközt, addig az IST a fizika, biofizika, optika, hidrofizika, hírközlés, távérzékelés, geológia, légkörfizika stb. területén tesz lehetővé fontos alkalmazásokat, ill. különleges jelenségek megértését. Teszi ezt azáltal, hogy segítségével a nemlineáris evolúciós parciális differenciálegyenleteknek olyan megoldásai kereshetők meg, amelyek részecskeszerű tulajdonságokkal rendelkeznek: térben és időben állandó az alakjuk, egyenletes sebességgel terjednek és ütközés után ezt a két tulajdonságukat megőrzik. Az ilyen típusú megoldásokat hívjuk *szolitonok*nak. A szolitonokat kiválóan lehet használni információ nagy távolsagokra történő gyors továbbítására (üvegszálas technika). Az árapályok által kiváltott, óriási energiát képviselő magányos tengerhullámok keletkezésének, természetének tanulmányozása nemcsak biztonsági szempontból, de gazdasági vonatkozásban is fontos lehet. Ezen hatalmas, akár száz méter magasságot is elérő magányos vízoszlopok erős mélytengeri áramlásokat okoznak, amelyek káros befolyással lehetnek pl. a mélytengeri olajfúrásokra.

Bár ebben a kis összefoglalóban nincs hely az IST alapján kiépíthető szisztematikus eljárás, az Ablowitz-Kaup-Newel-Segur (AKNS) séma ismertetésére, megjegyezzük, hogy ennek segítségével a nemlineáris evolúciós differenciálegyenletek nagy családjának szerkeszthető meg az állandó amplitúdójú haladóhullám megoldása (nemlineáris Schrödinger egyenlet, sine-Gordon egyenlet, Korteweg-deVries egyenlet, ld. fejezetvégi összefoglaló).

3.5.1. Felületi gravitációs (víz)hullámok felfedezése.

1834-ben J. Scott Russel skót hajómérnök érdekes megfigyelést tett. Egy sekély csatornán vontatott hajó hirtelen megállása után a hajó orránál keletkezett vízörvényből egy különös, mintegy 30 láb hosszúságú és 1 - 1 1/2 láb magas vízhullám vált ki és mintegy 8-9 mérföld/óra sebességgel mozgott tovább. Russel lovon követte a vízhullámot több mérföldön át, s annyira lenyűgözte az addig még soha meg nem figyelt jelenség, hogy saját kísérletezésbe kezdett. Több hasonló, állandó alakú hullámot sikerült előállítania. Kísérletezései során megállapította, hogy a vízhullám c sebessége a következő képletből számolható ki: $c^2 = g(h + \eta)$, ahol g a gravitációs gyorsulás, h a csatorna mélysége és η a hullám amplitúdója. A magasabb hullámok tehát gyorsabban haladnak.

Bár sokan próbálkoztak a jelenség megértésével (Airy 1845, Stokes 1847, Boussinesq 1871,1876, Rayleigh 1876), a magyarázó egyenlet felállítása csak 1895-ben sikerült D. J. Korteweg és G. de Vries fizikusoknak. Hosszadalmas levezetés után az $\eta = \eta(x, t)$ amplitúdó tér és időfüggését illetően a következő parciális differenciálegyenletre jutottak (KdV egyenlet):

$$\frac{\partial \eta}{\mathrm{d}\tau} = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{g}{h}}\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{1}{2}\eta^2 + \frac{2}{3}\alpha\eta + \frac{1}{3}\sigma\frac{\partial^2 \eta}{\partial \xi^2}\right),$$

ahol α egy egynél jóval kisebb állandó, σ pedig magába sűríti a fizikai állandókat: $\sigma = h^3/3 - Th/(\rho g)$, ahol h a csatorna mélysége, T a víz felületi feszültsége, ρ a víz sűrűsége. A fenti evolúciós egyenletben τ jelenti az időt, ξ pedig a helyváltozót. Korteweg és de Vries megmutatta, hogy egyenletüknek létezik haladó hullám (magányos hullám, solitary wave) megoldása, amely csak $\xi - c\tau$ kombinációban függ az időtől és helytől. Mielőtt ezt a megoldást felírnánk, célszerű a fenti evolúciós egyenletet dimenzió nélküli alakba átírni, ami a következő transzformációkkal érhető el: $t = \tau\sqrt{g/(h\sigma)}/2$, $x = -\xi/\sqrt{\sigma}$, és $u = \eta/2 + \alpha/3$. Ezen transzformációkat használva, kapjuk a KdV egyenletek kanonikus alakját,

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0, \tag{3.21}$$

amely a legegyszerűbb nemlineáris parciális differenciálegyenlet. Az első tag az időfejlődéssel kapcsolatos, a középső tag felelős a nemlinearitásért, az utolsó tag pedig a diszperziót okozza.

A KdV egyenlet haladóhullámú megoldása a következőképpen írható fel:

$$u(x,t) = 2\kappa^2 \mathrm{sech}^2\{\kappa(x - 4\kappa^2 t - x_0)\}, \tag{3.22}$$

ahol κ és x_0 állandók.[1] Ez tényleg egy állandó alakú, állandó sebességgel tovaterjedő megoldás, és a terjedés sebessége az amplitúdó nagyságával arányos.

A KdV egyenlet a 60-as években került újra előtérbe, amikor vele kapcsolatosan fontos új alkalmazások láttak napvilágot. Így például a réteges hullámok leírására, az ion-akusztikus hullámok természetének felderítésére, a magnetohidrodinamikai hullámok tanulmányozására, vagy a plazmafizika és a rácsdinamika területén alkalmazható a KdV egyenlet.

Réteges folyadékokban létrejövő hullámok leírására több egyenlet is született, s mindegyiknek van stacionárius hullám megoldása. Így ma már jól érthetők a tengereken létrejövő, s a műholdas felvételeken is jól kimutatható 'magányos' felületi vízhullámok létrejötte, haladása és nagyfokú stabilitása. Apel és Holbrook 1980-ban két napon át mintegy 250 tengeri mérföldön követett egy száz méter magas hullámot a szöuli tengeren. Osborn és Burch a Science tudományos magazin 258-as kötetének 1980-as évfolyamában a 451-460. oldalakon leír száz kilométer hosszú, 5-10 km széles, barázdászerű, félnaponként megjelenő vízhullámokat a szumátrai beltengeren, amelyek kiváltó oka az árapályra vezethető vissza.

E fejezet összefoglalásaként elmondható tehát, hogy a KdV egyenlet alapján értjük ezen magányos hullámképződmények stabilitásának az okát: a nemlinearitási tag amplitúdó erősítő hatását ellensúlyozza a szétfolyást, diszperziót okozó harmadik tag.

3.5.2. Szolitonok felfedezése.

A nemlineáris egyenletek különlegesen stabil megoldásainak felfedezése visszanyúlik az ún. Fermi-Pasta-Ulum (FPU) probléma vizsgálatára. Fermiék 1955-ben szilárdtestek gerjesztéseinek tanulmányozására egy N

[1] Arról, hogy (3.22) kielégíti (3.21)-et, behelyettesítéssel könnyen meggyőződhetünk. Vegyük figyelembe, hogy $S \equiv \mathrm{sech}(x) = 1/\cosh(x)$, $S' = -\tanh(x) S$, $\tanh'(x) = S^2$.

tömegpontból álló egydimenziós rácsot vettek, amelyben az egymástól h egyensúlyi távolságra levő m tömegű pontok kölcsönhatását az

$$F(\Delta) = -K(\Delta + \alpha\Delta^2)$$

anharmonikus erőtörvény szabja meg (K a rugóállandó, α egy kis szám, megfelelő dimenzióval, Δ a kitérés). Fermiék azt vizsgálták, miként oszlik el az energia az N darab, végpontokban rögzített ($y_0 = 0$, $y_N = 0$) tömegpont között, ha az $y(t)$ amplitúdókra (kitérésekre) vonatkozó kezdeti feltételek

$$y_n(0) = \sin\frac{n\pi}{N}, \qquad y_{n,\tau}(0) = 0, \qquad n = 0, 1, 2, ..., N.$$

Ez a kezdeti feltétel a potenciális energia ($m\omega^2 y^2/2$) egy sima, de nem egyenletes elosztásnak felel meg. Azt várták, hogy az

$$m\ddot{y}_n = F(y_{n+1} - y_n) - F(y_n - y_{n-1}) =$$

$$= -K(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1})(1 + \alpha(y_{n+1} - y_{n-1})), \qquad n = 1, 2, ...N \quad (3.23)$$

csatolt nemlineáris dinamikai egyenleteket megoldva a tömegpontok $m\dot{y}^2/2 + m\omega^2 y^2/2$ energiája egyenletesen oszlik el egy bizonyos idő után a nemlinearitást behozó anharmonicitási tag jelenléte miatt ($\omega = \sqrt{K/m}$ a sajátfrekvencia). Az $N = 32$ csatolt nemlineáris másodrendű közönséges differenciálegyenletet megoldva (amely feladathoz külön számítógépet építettek számukra) azonban azt találták, hogy nem osztódott szét az energia a tömegpontok között. Ellenkezőleg, időnként a teljes energia egy-egy rácspontra koncentrálódott, s ez a jelenség végigterjedt a teljes rácson.

A dolog tíz évig pihent, míg a sorozatban gyártott elektronikus számítógépek megjelenésével lehetőség nyílott a modell újraszámolására 1965-ben. Zabusky és Kruskal a FPU modell kontinuum változatát vizsgálta, amelyben a megoldást az $y(x,t)$ amplitúdóra keressük. Dimenziótlan mennyiségekben az FPU probléma a következőképpen írható fel:

$$y_{tt} = y_{xx} + \varepsilon y_x y_{xx} + \frac{1}{12}h^2 y_{xxxx} + \mathcal{O}(\varepsilon h^2, h^4), \qquad (3.24)$$

ahol $\varepsilon = 2\alpha h$ és $x = n$ (most folytonos), $t = t'\omega$ (t' a (3.23)-beli időváltozó, amely szerint a két ponttal jelölt deriválást végeztük). Mivel aszimptotikusan (nagy $t-$kre) egyirányba haladó hullámokat akartak kapni, megoldásként olyan $\phi(\xi,\tau)$ hullámfüggvényt kerestek, amely csupán $\xi = x - t$ és $\tau = \varepsilon t/2$ változóktól függ. A megfelelő egyenlet:

$$\phi_{\xi\tau} + \phi_\xi \phi_{\xi\xi} + \delta^2 \phi_{\xi\xi\xi\xi} + \mathcal{O}(h^2, h^4\epsilon^{-1}) = 0,$$

ahol $\delta^2 = \frac{1}{12}h^2\varepsilon^{-1}$.

Ez a differenciálegyenlet az $u = \phi_\xi$ transzformációval átmegy az

$$u_\tau + uu_\xi + \delta^2 u_{\xi\xi\xi} = 0 \tag{3.25}$$

differenciálegyenletbe, amely ekvivalens a KdV egyenlettel. A kezdeti feltétel most $u(\xi,0) = \cos(\pi\xi)$. A megoldás során azt tapasztalták, hogy $\delta = 0.022$ esetén a $u(\xi,\tau)$ már majdnem (Dirac-δ–szerű) szingularitásba fejlődik, amikor a diszperziót okozó δ^2-es tag felerősödik és ez megakadályozza a szingularitás kifejlődését. Ehelyett u nyolc különálló magányos hullámra bomlik, melyek amplitúdója különböző. Amikor a gyorsabb haladású nagyobb amplitúdójú hullám utoléri a kisebb amplitúdójú hullámot, az áthaladás (ütközés) nem viseli meg a hullámokat, azok változatlan alakban jelennek meg az ütközés lefolyása után, legfeljebb egymástól való távolságukban különbözhetnek (fázistolás). Ezért, az ilyen egyedi, alakjukat megőrző hullámok megjelölésére vezette be Zabusky és Kruskal a *szoliton* megjelölést, emlékeztetve a részecskék rugalmas ütközéséhez hasonló jellegzetességekre.

A szolitonok tehát nemlineáris evolúciós parciális differenciálegyenletek olyan megoldásai, amelyek térben és időben stabilak, részecske tulajdonságokat mutatnak. Ezen első, meglepő szoliton megoldást követően a fizika számos területén sikerült a nemlineáris parciális differenciálegyenleteknek hasonló megoldásait megtalálni. Az a sejtés, hogy létezik egy ős (master) nemlineáris evolúciós egyenlet, amelyből az összes nemlineáris egyenlet ismert (és még nem ismert) szoliton típusú analitikus megoldása leszármaztatható. Jelenleg az önduális Yang-Mills egyenleteket sejtik az ősegyenlet reprezentánsának, amelyből tehát minden nemlineáris evolúciós differenciálegyenlet szoliton megoldása leszármaztatható lenne.

3.5.3. Fourier transzformáció.

Említettük, hogy a nemlineáris evolúciós differenciálegyenletek szoliton típusú megoldásait lehetővé tevő inverz szórás transzformáció (IST) a

Fourier transzformáció nem triviális általánosításának tekinthető. Ezért előbb röviden összefoglaljuk a Fourier transzformáció lényegét, amely a *lineáris* evolúciós egyenletek kezdeti érték feladat típusú általános megoldási sémája.

Legyen ugyanis egy tetszőleges lineáris evolúciós egyenlet a következő formában megadva:

$$u_t = \mathcal{L}(x, t, u(x,t), u_x(x,t), ...), \tag{3.26}$$

ahol az $\mathcal{L}$ lineáris operátor a független változóktól az u megoldástól és ezek deriváltjaitól függhet. A feladat az, hogy keressük meg a (3.26)-ot kielégítő $u(x,t)$ megoldást, ha az $u(x,0) = f(x)$ kezdeti feltétel adott (feltesszük, hogy $f(|x| \to \infty) = 0$).

A Fourier transzformációs módszer alapját az adja meg, hogy tetszőleges függvény Fourier sorba fejthető,

$$u(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}(k,\omega)e^{i(kx-\omega t)}\mathrm{d}k\mathrm{d}\omega, \tag{3.27}$$

ahol a kifejtési együtthatókat az

$$\hat{u}(k,\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} u(x,t)e^{-i(kx-\omega t)}\mathrm{d}x\mathrm{d}t$$

képletekből számolhatjuk ki. Egymásba helyettesítéssel, és az integrálások felcserélésével Dirac-delta függvényeket kapunk, amelyekre a maradék integrálásokat elvégezve, azonosságot nyerünk.

Tekintsük most a keresett $u(x,t)$ megoldás Fourier transzformáltját a következő formában

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}(k,t)e^{ikx}\mathrm{d}k, \tag{3.28}$$

ahol

$$\hat{u}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} u(x,t)e^{-ikx}\mathrm{d}x.$$

Vegyük most (3.26) Fourier transzformáltját:

$$\hat{u}_t(k,t) = -i\omega(k)\hat{u}(k,t), \tag{3.29}$$

ahol a jobboldalon felhasználtuk a diszperziós összefüggést, amely a lineáris differenciálegyenletet jellemzi (s megkaphatjuk (3.27) (3.26)-ba való helyettesítésével). Ez az egyenlet adja meg a transzformált térben (k-térben) a megoldás időfüggését:

$$\hat{u}(k,t) = \hat{u}(k,0)e^{-i\omega(k)t}, \tag{3.30}$$

ahol $\hat{u}(k,0)$-at a kezdeti feltétel egyértelműen meghatározza,

$$\hat{u}(k,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx}\mathrm{d}x \equiv \hat{f}(k). \tag{3.31}$$

(30) és (31) (28)-ba való helyettesítésével kapjuk az általános megoldást:

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(k)e^{i(kx-\omega(k)t)}\mathrm{d}k. \tag{3.32}$$

Láthatjuk tehát, hogy a megoldás menete a következő:

$$\begin{tikzcd} u(x,0)=f(x) \arrow[r, "FT"] & \hat{u}(k,0)=\hat{f}(k) \arrow[d, "\hat{u}_t = -i\omega(k)\hat{u}"] \\ u(x,t) & \hat{u}(k,t) \arrow[l, "(FT)^{-1}"'] \end{tikzcd}$$

Fourier transzformáció: Lineáris evolúciós egyenletek megoldási sémája.

Lineáris probléma esetén a megoldást a diszperziós reláció egyértelműen meghatározza, ezért az $\omega = \omega(k)$ összefüggés a lineáris evolúciós egyenletek legfontosabb jellemzője. Ennek segítségével definiáljuk a fázis sebességet: $v_{ph} = \frac{\omega(k)}{k}$, valamint a csoport sebességet: $v_{gr} = \omega'(k)$. Amennyiben $v_{ph} \neq v_{gr}$, a lineáris rendszer *diszperzív*, benne különböző sebességű elemi módusok léteznek. Ekkor a kezdetben lokalizált megoldás idővel szétfolyik, elenyészik, diszpergálódik.

Általános esetben a diszperziós reláció lehet komplex is: $\omega = \omega_R + i\omega_I$. Amennyiben $\omega_I = 0$, a lineáris rendszer *stabil* (konzervatív). Amennyiben $\omega_I > 0$, a lineáris rendszer *instabil*. Ha $\omega_I < 0$, a lineáris rendszer *disszipatív*.

A hullámegyenlet

$$u_{tt} - u_{xx} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad -\omega^2 + k^2 = 0 \quad \to \omega = \pm k,\ v_{ph} = v_{gr} = \pm 1,$$

stabil, nem diszperzív.

A Schrödinger egyenlet, szabad mozgás esetén,

$$iu_t = -u_{xx} \quad \Longleftrightarrow \quad \omega = k^2 \quad \to v_{ph} = k,\ v_{gr} = 2k,$$

stabil, diszperzív.

A diffúzió (hővezetés) egyenlete

$$u_t = u_{xx} \quad \Longleftrightarrow \quad -i\omega = -k^2 \quad \to \omega = -ik^2,\ v_{ph} \neq v_{gr},$$

diszperzív, disszipatív.

A linearizált KdV egyenlet

$$u_t + u_{xxx} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad -i\omega + (ik)^3 \quad \to \omega = -k^3,\ v_{ph} \neq v_{gr},$$

diszperzív, stabil.

3.5.4. Inverz szórás transzformáció.

Miután Kruskal és Zabusky oly szépen visszavezette a rácsrezgések problémáját a nemlineáris felületi hullámjelenségek problémájára, és a numerikus megoldás közben különlegesen stabil megoldás sorozatokat (szolitonokat) talált, szükségesnek mutatkozott eredményeik analitikus oldalról való alátámasztása is.

Ezt a munkát Gardner, Green, Kruskal és Miura végezte el 1967-ben (Phys. Rev. Letters **19**, p.1095). Eredményük egy olyan összefüggésen alapult, amely két differenciálegyenlet megoldásai között állt fenn. Ahhoz, hogy a két nemlineáris differenciálegyenlet a $\psi(x,t)$ közös megoldással rendelkezzen, a közös megoldásnak kompatibilitási feltételnek kell eleget tenni, amely a parciális deriváltak felcserélhetőségét jelenti: $\psi_{xxt} = \psi_{txx}$. E feltétel kielégítése azt eredményezte, hogy a KdV egyenlet szétesett két lineáris differenciál egyenletre. Az egyik egyenlet az időfüggetlen Schrödinger sajátérték problémának felelt meg, a másik egyenlet az időfejlődést tartalmazta. Az első egyenletben, az időfüggetlen Schrödinger egyenletben az adott kezdeti feltétel, $u(x,0)$ játssza a potenciál szerepét, fix időparaméter mellett, a dinamikai változó az x koordináta. Ennek a 'potenciál' problémának egyértelműen megfelelnek a sajátértékek, csak meg kell oldani a Schrödinger egyenletet (direkt szórás) a diszkrét és folytonos sajátértékekre. Ezt a spektrumot $S(\lambda,0)-$val jelölve, felhasználhatjuk a másik egyenletet az $x \to \pm\infty$ limitben arra, hogy időfejlődést adjunk a spektrál paramétereknek. Az így kapott $S(\lambda,t)$ spektrál adatokat pedig a Gel'fand-Levitan-Marchenko egyenlettel inverz transzformáljuk az $u(x,t)$ potenciállá, ami a keresett megoldás. Az egész eljárás hasonlít a Fourier transzformációs módszerre, de lényeges szerepe van a kvantummechanikai direkt és inverz szórás problémának, ezért nevezték Kruskalék eljárásukat inverz szórás transzformációnak (IST).

Láthatjuk tehát, hogy a nemlineáris evolúciós differenciálegyenletek megoldási menete a következő:

$$
\begin{array}{ccc}
u(x,0) & \xrightarrow{DS \quad (\text{Schr.egyenlet})} & S(\lambda,0) \\
 & & \Big\downarrow {\scriptstyle t - fejleszt\acute{e}s} \\
u(x,t) & \xleftarrow{IS \quad (\text{GLM egyenlet})} & S(\lambda,t)
\end{array}
$$

IST: nemlineáris evolúciós egyenletek megoldási sémája ($S \equiv \{E_n, R_n = 0, T_n\}$).

Mivel a spektrál adatok időfejlesztését szolgáló egyenlet általában egyszerű, traszparens potenciál (reflexiós együttható=0) esetén a GLM egyenlet egyszerűvé válik, az IST probléma analitikusan is megoldható. A KdV egyenlet esetén azon megoldások, amelyekben a reflexiós együtthatót zérusnak választjuk, N szoliton megoldást mutatnak, amint $t \to \pm\infty$:

$$u_n(x,t) = 2\kappa_n^2 \mathrm{sech}^2\{\kappa_n(x - 4\kappa_n^2 t - x_n)\}, \tag{3.33}$$

ahol κ_n a kötött állapotokkal van kapcsolatban, x_n pedig a kötött állapotok normálási állandóinak felelnek meg.

A szolitonok tehát olyan kezdeti feltétellel kapcsolatosak, amelyeket potenciálként betéve a Schrődinger egyenletbe, átlátszónak, transzparensnek bizonyulnak szórás szempontjából (zérus fázistolást produkálnak). A szolitonok száma egyértelmű kapcsolatban áll az $u(x,0)$ kezdeti feltétel (potenciál) által meghatározott kötött állapotok számával, az amplitúdó és sebesség pedig a kötött állapotok energiaértékével.

Pl. az általános két szoliton megoldása a KdV egyenletnek a következő:

$$u(x,t) = 12\left\{\frac{3+4\cosh(2x-8t)+\cosh(4x-64t)}{[3\cosh(x-28t)+\cosh(3x-36t)]^2}\right\}.$$

Véve a $t \to \pm\infty$ határátmenetet, kapjuk:

$$u(x,t) \sim 2\mathrm{sech}^2(\eta \pm \frac{1}{2}\ln 3) + 8\mathrm{sech}^2(2\xi \mp \frac{1}{2}\ln 3),$$

ahol $\xi = x - 16t$ és $\eta = x - 4t$.

Az IST matematikai tartalmát teljes mélységben Lax Péter tárta fel 1968-ban. Általánosítása utat mutatott egy későbbi séma felállítására (AKNS-eljárás, ld. fejezet eleje), amely segítségével végtelen sok nemlineáris evolúciós egyenlet megoldható analitikusan.

Lax Péter formalizmusa a következő (P. Lax, Comm. Pure and Appl. Math. 21,467 (1968)). Tekintsük az L és M lineáris operátorokat, amelyek közül L a spektrál probléma operátora, M pedig a sajátfüggvény időfejlődését irányítja:

$$Lv = \lambda v, \tag{3.34}$$

$$v_t = Mv. \tag{3.35}$$

Vegyük (34) időderiváltját:

$$L_t v + L v_t = \lambda_t v + \lambda v_t.$$

Felhasználva (35)-öt, majd (34)-et, ez a következőképpen is írható:

$$\begin{aligned} L_t v + LMv &= \lambda_t v + \lambda M v \\ &= \lambda_t v + M\lambda v \\ &= \lambda_t v + MLv. \end{aligned}$$

Azt kaptuk, hogy

$$[L_t + (LM - ML)]v = \lambda_t v,$$

s ezért, ahhoz, hogy nemtriviális $v(x,t)$ sajátfüggvényt kapjunk megoldásként, szükséges az, hogy $\lambda_t = 0$ legyen, azaz

$$L_t = [M, L]. \tag{3.36}$$

Ez a *Lax egyenlet*, az L és M operátorokat *Lax-pár*nak hívjuk.

Az

$$L = \partial_{xx} + u, \qquad M = u_x - (4\lambda + 2u)\partial_x$$

választással (36) a KdV egyenletre vezet. (Kihasználandó a $v_{xxt} = v_{txx}$ kompatibilitási feltétel.) L és M más választásával más parciális differenciálegyenletre jutunk, amit az IST-vel megoldhatunk.

A fizikában alkalmazást nyert és IST-vel megoldható legfontosabb nemlineáris egyenletek a következők:

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0,$$

a KdV egyenlet, amit a hidrodinamikában és plazmafizikában használnak (ld. Phys.Rev. Letters **17**, 996 (1966));

$$u_{tt} - u_{xx} + \kappa \sin(u) = 0, \qquad \kappa = \text{konst.}$$

a sine-Gordon egyenlet, amit az optikában [önindukált veszteség nélküli terjedés (ld. J.Math. Phys **9**,1202 (1969), J. Quan. EI.IEEE, QE1, 169 (1965)), a szilárdtest fizikában és kvantumtérelméletben használnak (ld. Phys.Rev D 10, 4114; 11, 3424; 12, 2443 (1974,1975), Theoret. Mat.Phys 25, 1039 (1975)) használnak; és

$$iu_t + u_{xx} + \kappa u^2 u^* = 0,$$

a nemlineáris Schrödinger egyenlet, amit az optikában (hullámvezető, ld. Hasegawa: Optical solitons in fibers (Springer, Berlin, 1989)), plazmafizikában (Zakharov, Zsetf. 62, 1745 (1972)), biológiában (Davydov-szolitonok, Physica 3D 1 & 2 , 1 (1981)), valamint a hidrodinamikában (Sov. Phys. J. Appl. Mech. Tech. Phys. 4, 190 (1968)) alkalmaznak.