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.

4. TÖRT STATISZTIKÁK, BÁRMIONOK

Kvantummechanikai és statisztikus mechanikai tanulmányaink során az azonos részecskék megkülönböztethetetlenségének elvét kizárólag *kvantum*rendszerek sajátosságaként vezettük be. Klasszikusan a részecskéket *megkülönböztethetőknek* tekintettük. A 70-es évek során azonban számos szerző [1] [2] hangsúlyozta, hogy az azonos részecskék megkülönböztethetetlenségének elvét már a klasszikus mechanika keretein belül is használnunk kellene. A fent említett szerzők a Gibbs-paradoxon [1–3] elemzése kapcsán kimutatták, hogy a fenti elv klasszikus mechanikában történő alkalmazása nélkülözhetetlen feltétele a sokrészecske rendszerek konzisztens leírásának. Ezek a munkák azonban észrevétlenek maradtak a 80-as évek derekáig, mikoris a fizikusok figyelme a kétdimenziós rendszerek statisztikus mechanikájára irányult. A fent említett és más szerzők munkáit újrafelfedezve kiderült, hogy a *kétdimenziós* kvantummechanikai sokrészecske rendszerek "egzotikus" kvantumstatisztikákkal írhatók le. Ezen rendszereket alkotó részecskék se nem fermionok (Fermi- Dirac statisztika), se nem bozonok (Bose-Einstein statisztika). Frank Wilczek [4] ezeket a különc statisztikájú részecskéket *bármionok*-nak (angolul *anyon*) nevezte el.

Ebben a fejezetben újratárgyaljuk az azonos részecskék kvantummechanikai leírásával kapcsolatos ismereteinket. Az azonos részecskék megkülönböztethetetlenségének elvét már a megfelelő *klasszikus* rendszerre alkalmazzuk. Megvizsgáljuk ezen klasszikus rendszer konfigurációs terének nemtriviális topológiai tulajdonságait. Elvégezzük a klasszikus rendszer kvantálását. Ehhez meg kell találnunk a rendszer lehetséges állapotait jellemző ψ hullámfüggvényt. Kvantummechanikai tanulmányaink alapján azt várnánk, hogy ψ a teljes Q konfigurációs téren értelmezett komplex értékű reguláris függvény lesz, azaz $\psi : Q \to \mathbf{C}$, $\psi \in \mathcal{H}$ ahol $\mathcal{H}$ a reguláris függvények alkotta Hilbert tér. Ezt az elvárásunkat a szokásos klasszikus mechanikai rendszerek (harmonikus oszcillátor, H-atom stb.) kvantálása során szerzett tapasztalatunk is sugallja. Csakhogy mindezekben a példákban a konfigurációs tér $\mathbf{R}^n$ $(n = 1, 3)$ volt, ami topológiai szempontból triviális. Q nemtriviális tulajdonságai esetén azonban a hullámfüggény naiv fogalmát általánosítanunk kell. Vizsgálataink során megmutatjuk, hogy az a tény, hogy kétdimenziós rendszerek esetén részecskéink egzotikus statisztikáknak (bármionok) is engedelmeskedhetnek, a Q-n létező nemtriviális kvantálásoknak köszönhető.

4.1. A KONFIGURÁCIÓS TÉR

Tekintsünk N darab $\mathbf{R}^d$-ben mozgó szabad klasszikus részecskét! (d a tér dimenziója.) A konfigurációs tér ekkor

$$\mathcal{M} \equiv \mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d \times \ldots \mathbf{R}^d = \mathbf{R}^{dN}. \tag{4.1}$$

Legyen x a konfigurációs tér egy pontja, azaz $x \in \mathcal{M}$, $x \equiv (\mathbf{x_1}, \ldots, \mathbf{x_N})$. Itt $\mathbf{x}_i \quad i = 1, \ldots, N$ d komponensű vektorok. A bennünket érdeklő konfigurációs tér azonban nem ez, hanem N darab R^d-ben mozgó *azonos* részecske konfigurációs tere. Azonos részek esetén a fenti részecskeindexek bevezetése zavaró, hiszen azonos részecskék esetén ezek nem megfigyelhető mennyiségek. Más szavakkal: a részecskeindexeket bárhogyan is permutáljuk, ugyanazt a konfigurációt kapjuk. Legyen p az N elem egy permutációja. Természetesen $p \in S_N$ ahol S_N az $N!$ elemű permutációs csoport. Legyen továbbá $p(x) \equiv (\mathbf{x}_{p(1)}, \ldots, \mathbf{x}_{p(N)})$, ahol $x \in \mathcal{M}$. S_N ily módon mint $\mathcal{M}$ transzformációcsoportja is hat. Matematikai szempontból azonos részek bevezetése ekvivalens azzal, hogy $\mathcal{M}$ azon x és x' pontjait azonosítjuk melyekre $x' = p(x)$.

A fenti azonosítás egy ekvivalenciareláció, képezhetjük tehát a megfelelő ekvivalenciaosztályokat melyeket az $\mathcal{M}/S_N$ szimbólummal fogunk jelölni. A konfigurációs tér Q tehát

$$Q \equiv \mathcal{M}/S_N = \mathbf{R}^{dN}/S_N. \tag{4.2}$$

Q tehát a valódi konfigurációs tér. Ezt a topológiai objektumot kell minden elméleti fejtegetésünk kiindulópontjául választani.

A konfigurációs tér szerkezetének illusztrálása céljából célszerű a tömegközéppont mozgását leválasztani. Legyen $\mathbf{X} \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_i$ a tömegközéppont koordinátája. Ez a mennyiség a részecskeindexek permutálására nézve változatlan marad s így

$$Q = \mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^{d(N-1)}/S_N \equiv \mathbf{R}^d \times Q^{rel}, \tag{4.3}$$

ahol Q^{rel} a relatív konfigurációs tér.

Tekintsük példaként két azonos részecske konfigurációs terét. Ekkor $N = 2$ és így $Q^{rel} = \mathbf{R}^d/S_2$. A tömegközéppont koordinátája $\mathbf{X} = \frac{1}{2}(\mathbf{x_1} + \mathbf{x_2})$, míg a relatív koordináta $\mathbf{x} = \mathbf{x_1} - \mathbf{x_2}$.

4.1. ábra

A permutációs csoport (S_2) hatása $\mathbf{R^d}$-n egyszerű: azonosítani kell $\mathbf{x}$-et $-\mathbf{x}$-szel. Természetesen az $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ pont speciális pont, itt a két részecske "egybeesik".

$N = 2, \quad d = 1$, *két részecske egy egyenesen.* Könnyen láthatjuk (lásd 4.1. ábra), hogy Q^{rel} nem más mint a valós félegyenes.

$N = 2, \quad d = 2$, *két részecske egy síkban.* Az átellenes pontok azonosításával beláthatjuk (4.2. ábra), hogy $Q^{rel} = \mathbf{R^2}/S_2$ egy forgáskúp 30 fokos félnyílásszöggel. Látható, hogy a kúp $\mathbf{R^2}/S_2$ globális tulajdonságai lényegesen különböznek $\mathbf{R^2}$ tulajdonságaitól.

4.2. ábra

Az előbbi megkülönböztethetetlen az utóbbi megkülönböztethető két részecske konfigurációs terét reprezentálja. Vegyük észre, hogy az $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ pont szinguláris pont a kúpon. A későbbiekben ez a tulajdonság fontos szerepet fog játszani.

$N = 2, \quad d = 3$, *két részecske egy síkban.* Könnyen belátható, hogy

$$Q^{rel} = \mathbf{R^3}/S_2 = \{\mathbf{x} \equiv (x, y, z) | z \geq 0,$$

$$(x, y, 0) \sim (-x, -y, 0)\} = \mathbf{R_0^+} \times \mathcal{P}_2, \tag{4.4}$$

ahol a $\sim$ jelölés arra utal, hogy a megfelelő pontokat azonosítanunk kell. Geometriai szempontból (lásd 4.3. ábra) $\mathbf{R^3}/S_2$ a következő módon kapható.

Mivel az átellenes pontokat ismét azonosítanunk kell, ezért elég csak a felső térrészre szorítkozni, azaz $z \geq 0$. A felső térrészt felépíthetjük koncentrikus "félgömbhéjakból". Az egyes félgömbhéjakra a $\mathbf{R_0^+} \times \mathcal{P}_2$ kifejezésben szereplő "radiális" $\mathbf{R_0^+}$ jelenléte utal. A félgömbhéj alján levő körív átellenes pontjait az $(x, y, 0) \sim (-x, -y, 0)$ szabály alapján azonosítani kell.

Így kapjuk a $\mathcal{P}_2$-vel jelölt 2 *dimenziós valós projektív teret.* A későbbiek során látni fogjuk, hogy a két- és háromdimenziós konfigurációs terekre adott fenti két példa topológiai szempontból lényegesen különbözik. Ez a különbség a megfelelő klasszikus dinamikák kvantálásában fellelhető eltérésekben is tükröződni fog.

4.3. ábra

4.2. GLOBÁLIS TULAJDONSÁGOK FELTÉRKÉPEZÉSE PÁRHUZAMOS ELTOLÁSSAL.

Matematikai tanulmányainkból ismeretes, hogy görbült tereken definiálnunk kell azt, hogy mit értünk vektorok "párhuzamos" eltolásán. Vegyük példaképp a kúpot, mely épp a relatív konfigurációs tér: $\mathbf{R}^2/S_2$. A kúp egy görbült felület, a szinguláris pontot megközelítő "intelligens" katicabogár számára ez egyre nyilvánvalóbb. Nem kell azonban a szinguláris pontot megközelítenünk ahhoz, hogy rájöjjünk: görbült felületen vagyunk. Ezt az alábbi módon láthatjuk be. Tudjuk már, hogy a kúp nem más mint $\mathbf{R}^2/S_2$. Maradhatunk tehát a síkon $\mathbf{R}^2$, ahol a vektorok párhuzamos eltolása a szokásos, feltéve ha észben tartjuk, hogy az "átellenes pontokat" azonosnak kell tekintenünk. Ezért az $\mathbf{x}(\mathbf{t})$ és az $\mathbf{y}(\mathbf{t}) = -\mathbf{x}(\mathbf{t})$ görbe ugyanaz a görbe. Következésképp a sebességvektor, $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}$, az $\mathbf{x}$ pontban ugyanaz lesz mint a $\mathbf{w} = \dot{\mathbf{y}} = -\mathbf{v}$ a $-\mathbf{x}$ pontban. Mindaddig, amíg nem azonosítunk pontokat, a párhuzamos eltolás szabálya egy görbe mentén a szokásos, azonosítás során azonban $\mathbf{v}$ előjelet vált. *Tehát a kúpon az $\mathbf{x}$-ből $-\mathbf{x}$ be tartó út (ez egy zárt görbe) során a párhuzamos eltolás megfordítja a $\mathbf{v}$ irányát.* Természetesen mindezek a megfontolások $\mathbf{R}^d/S_2$-re is érvényesek.

Válasszunk most a kúpon egy tetszőleges $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ vektormezőt. Mivel számításainkat mindig egy bizonyos koordinátarendszerben végezzük, szükségünk lesz a vektormező komponenseire minden $\mathbf{x}$ pontban. Bázist kell tehát választanunk. Ekkor

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{d} v_j(\mathbf{x})\mathbf{e}_j(\mathbf{x}). \tag{4.5}$$

Választhatunk például párhuzamosan eltolt bázist, ami az $\mathbf{R}^d$-n nevelkedett fizikus számára egy természetes választás. Erről azonban tudjuk, hogy nem egyértékű bázis, hiszen egy zárt görbén körbemenve az $\mathbf{e}_j$ bázisvektor a görbétől függően vagy előjelet vált, vagy nem. Ez a bázis tehát kétértékű. Mivel $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ egyértékű, ezért a $v_j(\mathbf{x})$ komponensek sem egyértékűek. Választhatunk persze egyértékű bázist is, és ekkor a komponensek is egyértékűek lesznek, ami persze fizikai szempontból kevésbé indokolt. Ennek az alternatívának fontos szerepe lesz majd a későbbiek során, amikor nem vektormezőket, hanem hullámfüggvényeket fogunk a kúpon (vagy általában Q^{rel}-en) tekinteni. Ennek a fejezetnek a lezárásaként megjegyezzük, hogy N darab részecske esetén belátható, hogy a párhuzamosan eltolt bázis $N!$ értékű bázis lesz $\mathbf{R}^{dN}/S_N$-en.

4.3. A KONFIGURÁCIÓS TÉR FUNDAMENTÁLIS CSOPORTJA.

Kvantummechanikai tanulmányainkból tudjuk, hogy az azonosság elve olyan hullámfüggvények bevezetését teszi indokolttá, melyek vagy szimmetrikusak (bozonok), vagy antiszimmetrikusak (fermionok) a részecskekoordináták felcserélésével szemben. Mivel a részecskeindexek azonos részek esetén nem megfigyelhető mennyiségek, ezért a fenti (az indexek permutálásán alapuló) leírás redundáns. Ha azonban a valódi konfigurációs teret tekintjük kiindulópontnak, akkor a részecskeindexek cserélgetése helyett a konfigurációs téren tekintett zárt görbék tulajdonságainak vizsgálatát kell elvégeznünk.

Valóban, a kúpon ($\mathbf{R}^2/S_2$) tekintett zárt görbének $\mathbf{R}^2$-n egy olyan nyílt görbe is megfelelhet, mely az $\mathbf{x}$ és a $-\mathbf{x}$ pontokat köti össze. Mivel $\mathbf{x}$ épp a két részecske, relatív koordinátája, ezért $\mathbf{x} = \mathbf{x_1} - \mathbf{x_2}$ miatt ez a nyílt görbe a két részecske folytonosan végrehajtott cseréjének felel meg. Levonhatjuk tehát a következtetést *a konfigurációs téren tekintett zárt görbék vizsgálata alapvető fontosságú szerepet játszik a részecske statisztikák értelmezésében.*

A konfigurácios tér zárt görbéi valójában a kör (S^1) $f : S^1 \to Q$ leképezései. Másszóval

$$f : [0,1] \to Q; \quad f(0) = f(1). \tag{4.6}$$

Két zárt görbét *homotópnak* hívunk ha az egyiket folytonosan át tudjuk deformálni a másikba. Először egy rögzített alapponton átmenő görbét vizsgálunk. Vegyük észre, hogy ha a zárt görbénk parametrizálását folytonosan megváltoztatjuk, akkor már egy új görbét kapunk, mely természetesen homotóp az eredetivel. A homotópia a zárt görbék halmazán egy ekvivalenciarelációt definiál. Ez a reláció páronként diszjunkt ekvialencia osztályokra bontja a görbék halmazát. Ezeket az osztályokat *rögzített $q \in Q$ alapponton átmenő zárt görbék homotópia osztályai*-nak nevezzük.

Két zárt görbe f és g szorzatát az alábbi módon definiáljuk

$$(f \cdot g)(t) = \begin{cases} f(2t), & \text{for } 0 \leq t \leq \frac{1}{2}, \\ g(2t-1), & \text{for } \frac{1}{2} \leq t \leq 1 \end{cases} , \tag{4.7}$$

azaz először f-en, majd pedig g-n megyünk végig. Görbénk inverzét az $f^{-1}(t) = f(1-t)$ egyenlőséggel definiáljuk, míg az egyetlen pontból álló triviális görbét az $e(t) \equiv q \quad \forall t$ módon értelmezzük. Azt gondolhatnánk, hogy a fent definiált szorzással egy csoport-struktúrát definiáltunk a zárt görbék halmazán. Ez azonban nem igaz, hiszen például $f \cdot f^{-1} \neq f^{-1} \cdot f$, tekintettel arra, hogy a bal és jobb oldal parametrizálása különböző. Hasonló okok miatt nem teljesül a szorzás asszociativitása sem. Könnyen beláthatjuk azonban, hogy a homotópia osztályok halmazán az $[f] \cdot [g] \equiv [f \cdot g]$ módon értelmezett osztályszorzás már egy csoport-struktúrát definiál. Itt $[f]$ az f homotópiaosztályát jelöli. Az így definiált csoportot *q-beli fundamentális csoportnak nevezzük, és a $\pi_1(Q, q)$ szimbólummal jelöljük.*

Ha Q ívszerűen összefüggő, akkor bármely két q_1 és q_2 pontra létezik egy őket összekötő $c : [0,1] \to Q, \quad c(0) = q_1, \quad c(1) = q_2$ görbe, míg c^{-1} ugyanígy összeköti őket fordított sorrendben. Ha f egy zárt görbe q_2-n át, akkor $c \cdot f \cdot c^{-1}$ egy zárt görbe q_1-n át. A fenti c görbe felhasználásával megmutatható, hogy $\forall q_1, q_2$-re $\pi_1(Q, q_1)$ izomorf $\pi_1(Q, q_2)$-vel. Létezik tehát egyetlen olyan fundamentális csoport, melynek a $\forall q \in Q$-beli fundamentális csoportok izomorf kópiái. Ezt a csoportot *Q első homotópia csoportjának, vagy fundamentális csoportjának* nevezzük, és a $\pi_1(Q)$ szimbólummal jelöljük. Azt a topologikus teret, melyre $\pi_1(Q) = 0$ (minden zárt görbe Q-n egy pontba húzható össze), *egyszeresen összefüggőnek nevezzük.* (A 0 szimbólum itt most arra utal, hogy a csoport csak az identitás elemből áll.)

Mindezek után minden készen áll arra, hogy a $Q = \mathbf{R}^{dN}/S_N$ (vagy a $Q^{rel} = \mathbf{R}^{d(N-1)}/S_N$) konfigurációs tér fundamentális csoportját megvizsgáljuk. $d = N = 2$ esetén (kúp) a 4.4. ábrán látható C_1 görbe ugyan átdeformálható a C_2 görbébe, de ennek a során a szinguláris ponton át kell mennünk. Mivel a C_1 görbe mentén történő parallel transzport során a $\mathbf{v}$ vektor nem vált előjelet, míg a C_2 mentén igen, ezért a szinguláris pontban a párhuzamos eltolás nem egyértelmű. A természetes megoldás az, hogy ezt a szinguláris pontot egyszerűen kizárjuk a konfigurációs térből.

4.4. ábra

Ezáltal Q *többszörösen összefüggővé* vált, a kúp körül különböző csavarodási számú zárt görbék ugyanis már nem deformálhatók folytonosan egymásba.

Hasonló érvelés mutatja, hogy $\mathbf{R}^{dN}/S_N$ a szinguláris pontok kizárása után többszörösen összefüggő lesz. Tekintsük ugyanis $\mathbf{R}^{dN}$-et. Szinguláris pontok akkor keletkeznek, ha két részecske koordinátái megegyeznek. Jelöljük ezen pontok halmazát $\mathcal{D}$-vel! Ezeket a pontokat célszerű már az azonosítás előtt kivágnunk $\mathbf{R}^{dN}$-ből. Az így kapott tér $\mathbf{R}^{dN}-\mathcal{D}$. Ha S_N segítségével elvégezzük az azonosításokat $\mathcal{Q}\equiv(\mathbf{R}^{dN}-\mathcal{D})/S_N$-et kapjuk, mely épp a konfigurációs tér a szinguláris pontok kizárása után. Meg kell tehát mutatnunk, hogy $\pi_1(\mathcal{Q})\neq 0$, illetve meg szeretnénk tudni azt is, hogy mi ez a csoport. Látni fogjuk, hogy $\pi_1(\mathcal{Q})$, lényegesen más ha $d=2$, illetve ha $d>2$. Ez az a tulajdonság mely lehetővé teszi azt, hogy két dimenzióban egzotikus statisztikák is létezhessenek. Visszatérve $\mathbf{R}^{dN}-\mathcal{D}$-re, könnyen beláthatjuk, hogy az $d>2$-re egyszeresen összefüggő, míg $d=2$-re nem az! Ehhez csak azt kell meggondolnunk, hogy $\mathbf{R}^{dN}-\mathcal{D}$ létrehozásakor csak pontokat hagytunk ki $\mathbf{R}^{dN}$-ből. Kétdimenzióban ezen pontok körüli zárt görbék nem, ennél nagyobb dimenziókban viszont már összehúzhatók egy pontba folytonos deformációval. Tekintsük először a $d>2$ esetet. Minden $\mathcal{Q}$-beli zárt görbét $\mathbf{R}^{dN}-\mathcal{D}$-beli görbékből kaphatunk meg. Ezek lehetnek nyíltak és zártak. (Gondoljunk $\mathbf{R}^2-\mathcal{D}$-re és a "csúcsától megfosztott" kúpra $(\mathbf{R^2}-\mathcal{D})/S_2$-re. Itt egy adott $\mathbf{x}$ ponton átmenő zárt görbe és az ebből $-\mathbf{x}$ be tartó nyílt görbe a kúpon zárt görbéknek felel meg.) Nézzük először azon $\mathcal{Q}$-beli zárt görbéket, melyek $\mathbf{R}^{dN}-\mathcal{D}$-beli zárt görbékből kaphatók meg. Mivel $d>2$ esetén ezek egy pontba folytonos deformációval összehúzhatók, ezért a megfelelő $\mathcal{Q}$-beli zárt görbék úgyszintén. Ezért $\mathcal{Q}$-n minden nemtriviális homotópiaosztályba tartozó zárt görbét már csak $\mathbf{R}^{dN}-\mathcal{D}$-beli nyílt görbékből kaphatunk meg. Vegyük észre továbbá, hogy

S_N $\mathbf{R}^{dN} - \mathcal{D}$-en effektíven hat (ez azt jelenti, hogy az egység elemen kívül nincsen olyan S_N-beli elem, mely $\mathbf{R}^{dN} - \mathcal{D}$ minden pontját békén hagyja). Ebből az következik, hogy $\mathbf{R}^{dN} - \mathcal{D}$ azon pontjai, melyek $\mathcal{Q}$ *ugyanazon pontjainak* felelnek meg, egy-egy értelmű megfeleltetésben vannak S_N elemeivel. Ez azt jelenti, hogy azon különböző végpontú nyílt görbék, melyek ugyanazon kezdőpontból indulnak ki, $\mathcal{Q}$-ban különböző homotópiaosztályokba tartozó zárt görbéknek felelnek meg. Ezeket az osztályokat továbbá egy-egy értelműen megfeleltethetjük S_N elemeinek. Azt kaptuk tehát, hogy

$$\pi_1(\mathcal{Q}) \equiv \pi_1((\mathbf{R}^{dN} - \mathcal{D})/S_N) = S_N, \quad \text{ha} \quad d > 2, \tag{4.8}$$

tehát $\pi_1(\mathcal{Q})$ egy véges ($N!$ elemű) diszkrét csoport. Például a 3. ábrán látható C és C' görbék különböző homotópiaosztályokba tartoznak. Több osztály nincs is, hiszen C^2 homotópiaosztálya triviális, ez a görbe ugyanis folytonosan egy pontba összehúzható. (Az egy pontba történő folytonos deformáció egy közbülső állomását a C^2-vel homotóp C_3 görbe szemlélteti.) Azt kaptuk tehát, hogy $\pi_1(\mathbf{R}^3/S_2) = \mathbf{Z}_2 \equiv S_2$, ahogy ennek lennie is kell. ($\mathbf{Z}_2$ a másodrendű ciklikus csoport.)

Mi a helyzet kétdimenzióban? Ekkor $\mathbf{R}^{dN} - \mathcal{D}$ nem egyszeresen összefüggő és $\pi_1(\mathcal{Q})$ egy végtelen elemű diszkrét csoport, melyet az irodalomban *fonatcsoportnak* nevezünk. Ezt a csoportot az alábbi módon jellemezhetjük. N darab részecske esetén tekintsünk N görbét a háromdimenziós térben (két térdimenzió egy pedig a görbék parametrizálásával kapcsolatos, gondolhatunk például az időre melynek során a részecskék cseréje megtörténik). Elképzelhetünk például egy olyan N rugóból álló expandert, melynek rugói nem feltétlenül párhuzamosak, hanem "összekuszáltak" is lehetnek (4. 5. ábra). Ha az időt szimbolizáló paraméter az ábra aljától a felső része "irányába" telik, akkor a végállapot a részecskék egy lehetséges permutációjának felel meg. Egy ilyen "expander"-t a továbbiakban fonatnak fogunk nevezni.

A fonatokat azonosaknak tekintjük, ha őket egymásba folytonos deformációval átvihetjük. (Az expander rugóit addig rendezgetjük, amíg a másik expanderrel tökéletesen azonos elrendezést nem kapunk.) Két fonatot össze is szorozhatunk, az alábbi módon.

4. 5. ábra

Az első fonat végpontját a másik kezdőpontjához illesztve a két fonatot "összevarrjuk" (4. 6. ábra).

(A két expanderből egyet csinálunk olymódon, hogy a megfelelő rugókat összecsatlakoztatjuk.) A csoport-struktúra definiálásához szükséges egységelem az a fonat, mely a közönséges expanderre emlékeztet, párhuzamosan álló rugókkal (4. 7. ábra).

4. 6. ábra

Az inverz definíciója is kézenfekvő, ez ugyanis az a fonat melyet az eredeti

fonattal történő összevarrás után folytonosan az egységelembe deformálhatunk. Nyilván a fentiekben értelmezett szorzás asszociatív is (teljesen mindegy, milyen sorrendben kombinálunk össze három expandert),

4. 7. ábra

tehát tényleg egy csoport-struktúrát kaptunk.

A fentiekben bevezetett fonatcsoport egy hasznos és rövid jellemzését kaphatjuk a σ_i, $i = 1, 2 \ldots N - 1$ szomszédcserék fogalmának bevezetésével.

σ_i az expander i-edik rugójának végpontját megcseréli az $i + 1$-dik végpontjával olymódon, hogy az i-edik rugó az $i + 1$-dik *fölött* marad (4. 8. ábra).

4. 8. ábra

${\sigma_i}^{-1}$ ugyanezt a cserét végzi el, de úgy, hogy az i-edik rugó most az $i+1$-dik *alatt* marad (4 9. ábra). Minden fonat előállítható szomszédcserék egymást követő sorozataként.

4. 9. ábra

Tekintsük a $\sigma_i\sigma_{i+1}\sigma_i$ és a $\sigma_{i+1}\sigma_i\sigma_{i+1}$ fonatokat (4. 10. ábra). Könnyen belátható, hogy ez a két fonat egymásba deformálható, tehát $\sigma_i\sigma_{i+1}\sigma_i = \sigma_{i+1}\sigma_i\sigma_{i+1}$. Megmutatható [5], hogy a fonatcsoportot az $e, \sigma_1, \sigma_2, \ldots \sigma_{N-1}$ *generátorok* megadásával (e az egységelem), és az azok közötti

4. 10. ábra

$$\sigma_i\sigma_{i+1}\sigma_i = \sigma_{i+1}\sigma_i\sigma_{i+1}, \tag{4.9a}$$

$$\sigma_i\sigma_j = \sigma_j\sigma_i, \quad |i-j| \geq 2 \tag{4.9b}$$

relációkkal kimerítően jellemezhetjük. A továbbiakban az N ”rugóból” álló fonatcsoportot B_N-nel fogjuk jelölni.

Hátra van még a fonatcsoport (B_N) és a permutációcsoport (S_N) közötti különbség tisztázása. Könnyen belátható ugyanis, hogy ha most $e, \sigma_1, \sigma_2, \ldots \sigma_{N-1}$ N egymást követő elem közönséges szomszédcseréit jelenti, akkor a (4.9a,b) relációk ismét teljesülnek. Mivel minden permutáció felírható egymást követő szomszédcserék szorzataként, azt várnánk, hogy a (4.9a,b) relációk S_N-et is jellemzik. Természetesen nem ez a helyzet, ugyanis a permutációkra tudjuk, hogy két egymást követő σ_i szomszédcsere az egységelemet adja, azaz

$${\sigma_i}^2 = e. \tag{4.10}$$

Ez a reláció fonatokra természetesen nem teljesül amint ezt a 4. 11. ábra is mutatja. (Az egymásba gubancolódott rugókat nem tudjuk a rugók elszakítása nélkül kibogózni!)

Összefoglalva: B_N-t a (4.9a,b), S_N-t a (4.9a,b) *és* a (4.10) relációk jellemzik. Ez az "apró" eltérés drámai különbségekre vezet. S_N egy *véges* ($N!$) míg B_N egy *végtelen* elemű diszkrét csoport.

4. 11. ábra

Tisztáztuk már, hogy a részecskeindexek permutálásán alapuló szemlélet helyett célszerű a Q konfigurációs tér homotópiacsoportjának a vizsgálatán alapuló szemléletet elsajátítanunk. Ez a szemlélet arra tanított meg bennünket, hogy kétdimenzióban $\pi_1(Q)$ szerkezete gyökeresen más. Nevezetesen

$$\pi_1(Q) = \begin{cases} B_N, & \text{ha } d = 2, \\ S_N, & \text{ha } d > 2. \end{cases} \tag{4.11}$$

Láttuk azt is, hogy a B_N és S_N közötti különbség a (4.10) relációban rejlik. Ha a részecskék cseréjén alapuló képben gondolkodunk akkor σ_i az i-dik és az $i+1$-dik részecske az óramutató járásával ellentétes, ${\sigma_i}^{-1}$ pedig az óramutató járásával azonos körüljárási irányú cseréjének, felel meg. A megfelelő két zárt görbét a 4. 12. ábrán láthatjuk. Ha $D > 2$, akkor nyilván

${\sigma_i}^{-1} \sim \sigma_i$ (${\sigma_i}^2 \sim e$), hiszen a két görbét egymásba tudjuk deformálni azáltal, hogy az egyiket a lap síkjából 180 fokkal kifordítjuk, és ezzel a körüljárási irányt megváltoztatjuk. Ha $D = 2$ akkor az "extra" harmadik dimenzió híján ezt a kiforgatást nem tudjuk megtenni, ezért a (4.10) reláció nem teljesül.

4. 12. ábra

4.4. KVANTÁLÁS

Az előző fejezetek során láttuk, hogy Q nemtriviális globális tulajdonságokkal rendelkező (nem egyszeresen összefüggő) görbült tér. Az ilyen tulajdonságú tereken a fizikai rendszer állapotait leíró hullámfüggvények definiálása nem triviális feladat. Ahhoz, hogy ezt belássuk szeretnénk emlékeztetni arra, hogy a fizikai információ nem a hullámfüggvényben, hanem annak abszolútérték négyzetében $|\psi(q)|^2 \quad (q \in Q)$ van elrejtve. Más szóval ψ-t módosíthatjuk egy helytől függő fázisfaktorral anélkül, hogy a fizikai leírást megváltoztatnánk,

$$\psi(q) \to \psi(q)e^{i\alpha(q)}, \quad q \in Q. \tag{4.12}$$

(Ne keverjük azonban ezt a fázist össze a lineáris szuperpozícióban szereplő hullámfüggvények *relatív* fázisával.) A ψ komplex hullámfüggvény tehát redundáns módon írja le a Q konfigurációs térrel rendelkező fizikai rendszer állapotait. Felmerül azonban a kérdés: nem lehet-e a "lötyögő" fázisfaktort egyszer s mindenkorra globálisan (Q minden pontjában) lerögzíteni? Ezt a problémát a kvantumelmélet megszületése óta vizsgálják. A kérdésre adott válasz a következő: *mindaddig, amíg a Q egyszeresen összefüggő ($\pi_1(Q) = 0$), addig a fázis globális definíciója lehetséges* [6]. Esetünkben azonban (4.11) alapján tudjuk, hogy Q *nem* egyszeresen összefüggő. Ennek a következménye az lesz, hogy a hullámfüggvény fázisát nem értelmezhetjük úgy, mint egy Q-n értelmezett jól definiált (egyértékű) függvényt.

A helyzet emlékeztet a Q-n értelmezett vektorok komponenseinek definiálásakor fellépő problémára. (Lásd a (4.5) egyenlettel kapcsolatos fejtegetéseket.) A komponenseket egy bizonyos bázisra kell vonatkoztatnunk, a fizikai szempontból természetes bázis azonban nem mindig egyértékű, következésképp a vektormező komponensei sem egyértékűek. A fizikai állapotokat reprezentáló geometriai mennyiség (a vektormező) azonban már egyértékű.

Hasonlóan, definiáljuk a fizikai állapotokat reprezentáló geometriai mennyiséget (jelöljük ezt $\Psi(q)$-val) az alábbi módon

$$\Psi(q) = \psi(q)e(q), \quad q \in Q. \tag{4.13}$$

Nyilván (4.13) a (4.5) egyenlet megfelelője $j = 1$ esetén, továbbá most $\psi(q)$ és $e(q)$, $|e(q)| = 1$, komplex értékű függvények. Ha ψ-t a (4.12) módon transzformáljuk, akkor $\Psi(q)$ a bázis

$$e(q) \to e(q)e^{-i\alpha(q)}, \quad q \in Q \tag{4.14}$$

transzformációja esetén nem változik. Most megismételhetjük mindazokat a fejtegetéseket, amelyeket a (4.2) fejezetben a vektorok párhuzamos eltolása kapcsán már megtettünk. Nevezetesen, nem meglepő, hogy a fizikai szempontból indokolt párhuzamosan eltolt bázis választása esetén $\psi(q)$ nem lesz egyértékű. Próbáljuk meg a párhuzamos eltolás fogalmát egy kicsit precízebben megfogalmazni! Válasszunk Q-n egy *egyértékű* $e(q)$ bázist! Infinitezimális párhuzamos eltolás esetén megköveteljük, hogy a q-ból $q + dq$-ba $e(q)$-t eltoló $P(q + dq, q)$ operátor elégítse ki a

$$P(q + dq, q)e(q) = (1 + idq^{\mu} a_{\mu}(q))e(q + dq) \tag{4.15}$$

egyenletet, ahol

$$f_{\mu\nu} \equiv \partial_{\mu} a_{\nu} - \partial_{\nu} a_{\mu} = 0. \tag{4.16}$$

Itt q^{μ} $(\mu, \nu = 1, 2, \dots dN)$ lokális koordináták Q-n. Bevezettük továbbá az $a_{\mu}(q)$ vektormezőt, ez fogja nekünk jellemezni a párhuzamos eltolást Q-n. Vegyük észre, hogy a (4.15) szabály egy lineáris unitér transzformáció infinitezimális változata. Azaz egy C görbe menti párhuzamos eltolásra

$$P_C(q_2, q_1)e(q_1) = e^{i \int_C dq^{\mu} a_{\mu}} e(q_2). \tag{4.17}$$

Fontos arra is felfigyelnünk, hogy a bevezetett $a_{\mu}(q)$ igen speciális. A (4.16) egyenlet bevezetésének szükségességét az alábbiakban részletesen tárgyaljuk. Elöljáróban elégedjünk meg annyival, hogy a részecskék cseréjével kapcsolatos (a statisztikát tükröző), a hullámfüggvényben történő változásokat egy vektormező (a_{μ}) segítségével szeretnénk leírni. Ez a vektorpotenciál-szerű mennyiség (az ún. *statisztikus vektorpotenciál*) lehetővé teszi majd számunkra, hogy az egzotikus statisztikákat dinamikai módon tudjuk tárgyalni. (a_{μ} a Hamilton operátorban fog szerepelni.) Ahhoz, hogy ezt a feladatot megvalósíthassuk szükségünk van a (4.16) feltételre.

Most pedig mélyedjünk el kicsit jobban a (4.16) egyenlet jelentésében! Először is emlékeztetünk arra, hogy $f_{\mu\nu} \equiv 0$ akkor és csak akkor, ha $a_{\mu} = \partial_{\mu}\alpha$ valamilyen α függvényre. Fontos azt is felidéznünk, hogy az α függvény csak akkor egyértékű, ha Q egyszeresen összefüggő. Esetünkben tehát α nem egyértékű. Ha $\mu, \nu = 1, 2, 3$ akkor (4.16) azt mondja, hogy $\mathbf{a}$ rotációja zérus. Ekkor a fenti állítás épp az I. gradienstétel nem egyszeresen összefüggő tartományok esetén! (Lásd Jánossy-Gnädig-Tasnádi: Vektorszámítás III. 56. oldal.)

Kicsit precízebbé tehetjük ezt az állítást, ha tekintjük adott a_μ esetén az $a_\mu = \partial_\mu \alpha$ egyenlet

$$\alpha(q_2) = \alpha(q_1) + \int_C dq^\mu a_\mu(q) \tag{4.18}$$

formális megoldását. Itt C egy a q_1 és q_2 pontokat összekötő görbe. $\alpha(q_1)$-et tetszőlegesen lerögzítve (4.18) alapján $\alpha(q_2)$-t is megkaphatjuk tetszőleges q_2 esetén. Mivel $f_{\mu\nu} = 0$ ezért a vonalintegrál értéke nem fog változni mindazon $C_1, C_2, \ldots$ görbékre melyeket C-ből folytonos deformációval megkaphatunk. $\alpha(q_2)$ értéke tehát csak a C homotópiaosztályától fog függeni. Ha Q egyszeresen összefüggő, akkor csak egy homotópiaosztály van (a triviális osztály), ekkor α egyértékű.

Válasszunk most Q-n egy egyértékű $e(q)$ bázist! Ez azt jelenti, hogy minden $q \in Q$ pontban egy bázisvektort állítunk. Másrészt, korábban megtanultuk már, hogy a párhuzamosan eltolt bázis nem egyértékű bázis. Valóban, (4.17) alapján látjuk, hogy amennyiben $e(q)$ egyértékű, $P(q_2, q_1)e(q_1)$ már függ az úttól s így nem egyértékű. Ha $e(q)$ egyértékű akkor (4.13) alapján $\psi(q)$ is az. Az előző bekezdés alapján tudjuk azonban azt, hogy létezik olyan mértéktranszformáció, hogy a transzformált mértékpotenciál zérus, azaz $a'_\mu = a_\mu - \partial_\mu \alpha \equiv 0$. Ez a mértéktranszformáció (4.12) alakú, és most már azt is tudjuk, hogy a kapott $\psi'(q) \equiv \psi(q)e^{i\alpha(q)}$ már nem egyértékű, ha $\pi_1(Q) \neq 0$.

Mindezek alapján a következő választási lehetőségeink vannak $f_{\mu\nu} \equiv 0$ esetén: *vagy egyértékű hullámfüggvénnyel dolgozunk s ekkor $a_\mu \neq 0$, vagy többértékű hullámfüggvénnyel dolgozunk s ekkor $a_\mu = 0$.*

Ha (4.17)-ben $q_1 = q_2 \equiv q$ (azaz a C görbe egy zárt görbe), akkor kapjuk, hogy

$$P_C(q, q) = e^{i \oint_C dq^\mu a_\mu(q)}. \tag{4.19}$$

Ez a fázisfaktor nyilván mértékinvariáns, hiszen a körintegrál értéke nem változik az $a_\mu(q) \mapsto a_\mu(q) - \partial_\mu f(q)$ *egyértékű* mértéktranszformáció során. Igaz továbbá az is, hogy az ismételt párhuzamos eltolás a C_1, majd a C_2 zárt görbék mentén eleget tesz a

$$P_{C_1C_2}(q, q) = P_{C_1}(q, q)P_{C_2}(q, q), \tag{4.20}$$

tulajdonságnak. Tekintsünk most egy olyan C' zárt görbét mely ugyanabba a homotópiaosztályba esik mint C! A CC'^{-1} görbére (4.20) alapján kapjuk, hogy

$$P_{CC'^{-1}}(q, q) = P_C(q, q)P_{C'^{-1}}(q, q). \tag{4.21}$$

Az egyenlet baloldalán álló $\oint_{CC'^{-1}} dq^\mu a_\mu(q)$ körintegrált a Stokes tétel segítségével átírhatjuk az $f_{\mu\nu}$-nek a CC'^{-1} által határolt területre való felületi integráljává. Mivel azonban $f_{\mu\nu}(q) \equiv 0$ ezért a baloldal is zérus. Azt kaptuk tehát, hogy

$$P_C(q,q) = P_{C'}(q,q), \quad \text{ha} \quad C \sim C'. \tag{4.22}$$

Könnyen belátható az is, hogy a $P(q,q)$ fázisfaktor értéke nem változik akkor sem, ha C-t folytonosan úgy deformáljuk, hogy q-t is mozgatjuk. Levonhatjuk tehát a következtetést: *a mértékinvariáns fázisfaktor csak a C görbe homotópiaosztályától függ, azaz $P_{[C]}$.* (Itt $[C]$ a C görbe homotópiaosztályát jelöli.) Tekintettel arra, hogy komplex fázisfaktorunk egy 1×1-es unitér mátrix, (4.20) alapján triviálisan következik, hogy *a hullámfüggvény párhuzamos eltolását definiáló fázisfaktor egy egydimenziós unitér ábrázolását adja a $\pi_1(Q)$ fundamentális csoportnak.*

Tekintsük most a Q konfigurációs teret ha $d > 2$. Ekkor (4.11) alapján tudjuk, hogy $\pi_1(Q) = S_N$. Kíváncsiak vagyunk arra, hogy két részecske *valódi* megcserélése esetén a hullámfüggvénnyel mi történik. Tudjuk már, hogy a részecskék cseréjének a Q konfigurációs térben egy zárt C görbe fog megfelelni. Továbbá $[C] \in S_N$. A fentiekben azt is beláttuk, hogy a hullámfüggvény egy fázisfaktort fog felszedni, mely S_N egydimenziós unitér ábrázolását fogja adni. Mivel S_N-t az e egységelem és a $\sigma_j, \quad j = 1, 2, \ldots N-1$ szomszédcserék generálják, ezért elég, ha ezekhez a generátorokhoz rendelünk fázisfaktorokat. Legyen ez a hozzárendelés $\mathcal{D}$ (ábrázolás) az alábbi alakú

$$\mathcal{D} : e \mapsto 1, \quad \mathcal{D} : \sigma_j \mapsto e^{i\theta_j}, \quad j = 1, 2, \ldots N-1. \tag{4.23}$$

Most kihasználjuk az S_N-t definiáló (4.9a,b) és (4.10) relációkat. Mivel a fázisfaktorok felcserélhetők egymással, ezért (4.9b) triviálisan teljesül (ráadásul most minden i, j-re), (4.9a)-ból pedig a $\theta_j = \theta_{j+1}$ összefüggést kapjuk. Marad még a (4.10) reláció, ebből kapjuk, hogy $e^{2i\theta} = 1$ azaz $\theta \equiv 0, \pi \mod 2\pi$. Az ábrázolás tehát $\sigma_j \mapsto \pm 1$ minden j-re. A részecskék valódi fizikai felcserélésekor tehát a hullámfüggvény vagy előjelet vált (fermionok), vagy nem vált előjelet (bozonok).

Kétdimenzióban a helyzet sokkal izgalmasabb. Ekkor $\pi_1(Q) = B_N$, tehát a részecskék statisztikájának megállapításához a fonatcsoport egydimenziós unitér ábrázolásai kellenek. Ekkor (4.10) teljesülését már nem kell megkövetelnünk s így a szomszédcserékhez tetszőleges θ *statisztikus paraméterrel* jellemzett fázisfaktorokat rendelhetünk, azaz

$$\mathcal{D} : \sigma_j \mapsto e^{i\theta}. \tag{4.24}$$

A θ statisztikus paraméter minden értéke (mod 2π) egy lehetséges ábrázolását adja $\pi_1(Q)$-nak. Ezek a statisztikus paraméterek a bozonok ($\theta = 0$) és a fermionok ($\theta = \pi$) között interpoláló statisztikájú részecskéket írnak le. $\theta \neq \{0, \pi\}$ esetén a megfelelő részecskék se nem fermionok, se nem bozonok. Frank Wilczek szavaival élve **bármionok**, vagy az angol kifejezést a magyar nyelvbe ültetve **anyonok**. Szokásos még a (kicsit félrevezető) *tört statisztikák* elnevezés is, tekintettel arra, hogy a θ statisztikus paraméter π-nek nemcsak egész, hanem tetszőleges valós (így például racionális) többszöröse is lehet.

4.5. TÖRT STATISZTIKÁJÚ RÉSZECSKÉK DINAMIKÁJA

Miután beláttuk, hogy kétdimenzióban egzotikus statisztikáknak engedelmeskedő részecskék is létezhetnek, megvizsgáljuk ezeknek a részecskéknek a dinamikáját. Első lépésként N darab szabad anyon dinamikáját tanulmányozzuk. A Hamilton operátor N darab m tömegű szabad részecske esetén $\frac{-\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{N} \triangle_j$, ahol $\triangle_j$ a j-dik részecske Laplace operátora d dimenzióban. Itt d a Q konfigurációs tér dimenziója. Az első probléma természetesen az, hogy hogyan definiáljuk a Laplace operátort egy nemtriviális topológiai tulajdonságokkal rendelkező téren. Azaz: hogyan kvantáljunk Q-n? Az előző fejezet alapján ezt a kérdést megválaszolhatjuk. Vegyük először is észre, hogy Q lényegében a dN dimenziós Euklideszi tér, melyben bizonyos pontokat azonosítottunk. Használjuk tehát a továbbiakban a $q^\mu \in Q$ lokális koordináták helyett az x^μ euklideszi koordinátákat, és ugyanakkor tartsuk észben, hogy bizonyos pontokat azonosítottunk. A Laplace operátor tehát a szokásos $\sum_{\mu=1}^{dN} \frac{\partial^2}{\partial x^{\mu\,2}}$ marad, de az azonosítások miatt a hullámfüggvénynek speciális határfeltételeket kell majd kielégítenie. Mik ezek a határfeltételek? Két nem azonos $\mathbf{R}^{dN}$-beli pontot akkor azonosítunk, ha az őket összekötő nyílt görbének Q-ban egy $\pi_1(Q)$-beli zárt görbe felel meg. Tudjuk továbbá azt is, hogy ha a hullámfüggvényt egy Q-beli zárt görbén körbevisszük, akkor az egy olyan fázisfaktort szed fel, ami épp $\pi_1(Q)$ egydimenziós unitér ábrázolása. Ha tehát $g \in \pi_1(Q)$, akkor a határfeltétel $\mathbf{R}^{dN}$-en

$$\psi(gx) = \mathcal{D}(g)\psi(x). \tag{4.25}$$

Itt a gx szimbólum azt jelöli, hogy g x-et abba a $gx \equiv x'$ pontba viszi, melyet $\mathbf{R}^{dN}$-ben x-vel olyan nyílt görbékkel köthetünk össze, hogy azok Q-ban a g által meghatározott $g \equiv [C]$ zárt görbék homotópiaosztályának feleljenek meg. (x és gx nyilván az a két pont, amit azonosítanunk kell.) Fontos azt is látnunk, hogy a (4.25) egyenletben megjelenő fázisfaktor éppen a párhuzamos eltolás kapcsán bevezetett

$$\mathcal{D}(g) = e^{-i\int_\Gamma dx^\mu a_\mu(x)} \tag{4.26}$$

fázisfaktor, ahol Γ az a nyílt $\mathbf{R}^{dN}$ görbe, ami a g osztálybeli zárt görbének felel meg.

Példaképp tekintsük a $d = 2$ $N = 2$ esetet. Ekkor a tömegközéppont leválasztása után kapott Q^{rel} konfigurációs tér nem más mint, a jólismert "csúcsától megfosztott kúp" 30 fokos fél nyílásszöggel. Másrészt tudjuk azt is, hogy $Q^{rel} = (\mathbf{R^2} - \{0\})/S_2$. Könnyen látható az is, hogy $\pi_1(Q) = \mathbf{Z}$. ($\mathbf{Z}$ az egész számok additív csoportját jelöli.) Valóban a kúp csúcsa körüli különböző csavarodási számú görbék nem deformálhatók folytonosan egymásba. Az egy pontba összehúzható görbének a 0, a pozitív kürüljárású görbéknek a pozitív, a negatív körüljárásúaknak a negatív egészek felelnek meg. Vezessük be az $(x_1, x_2) \equiv (r\cos\phi, r\sin\phi)$ polárkoordinátákat $\mathbf{R^2}$-n. r, és ϕ a két részecske relatív koordinátáit jellemzi. Ha a ϕ koordinátát π-vel *folytonosan* megváltoztatjuk, akkor egy olyan görbét kapunk, melynek a kúpon egy olyan zárt görbe felel meg, melyre a csavarodási szám egy. A párhuzamos eltolás ezen görbe mentén az $e(r,\phi)$ bázisvektort az $e^{-i\theta}e(r,\phi)$ bázisvektorba viszi. Mivel $\Psi(r,\phi)$ egyértékű, ezért $\psi(r,\phi+\pi) = e^{i\theta}\psi(r,\phi)$. Tetszőleges $Q \in \mathbf{Z} \equiv \pi_1(Q^{rel})$ csavarodási számú görbére pedig kapjuk, hogy

$$\psi(r, \phi + Q\pi) = e^{iQ\theta}\psi(r,\phi). \tag{4.27}$$

Ez az egyenlet az általános (4.25) egyenlet speciális esete. A (4.27) egyenletet Q-n értelmezve látjuk, hogy a párhuzamosan eltolt ψ nem egyértékű. Ekkor választhatunk olyan mértéket (lásd a (4.19) előtti vastag betűs részt), ahol $a_\mu = 0$, $\mu = 1, 2$. Összefoglalva: *a Hamilton operátor a szokásos, az egzotikus statisztikák csak a határfeltétel (4.27) alakjában jelennek meg.*

Választhatjuk azonban a másik alternatívát is. Ekkor tekintsük az alábbi egyértékű hullámfüggvényt

$$\psi'(r,\phi) = e^{-i\frac{\theta}{\pi}\phi}\psi(r,\phi). \tag{4.28}$$

Ez a transzformáció azonban megváltoztatja a parciális deriváltakat

$$\partial_r \mapsto \partial_r, \quad \partial_\phi \mapsto \partial_\phi + i\frac{\theta}{\pi}. \tag{4.29}$$

Eredményünk: *ha a Hamilton operátorba bevezetjük az* $a_r = 0 \quad a_\phi = -\frac{\theta}{\pi}$ *statisztikus vektorpotenciált, akkor egyértékű hullámfüggvényt használhatunk.*

Most meghatározzuk a Hamilton operátor alakját derékszögű koordinátákban. Ehhez szükségünk van a $\frac{\partial}{\partial x}$ és a $\frac{\partial}{\partial y}$ parciális deriváltakra. Mivel

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \phi}\frac{\partial \phi}{\partial x} \qquad \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial \phi}\frac{\partial \phi}{\partial y}$$

és $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\phi = \arctan \frac{y}{x}$, ezért

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos\phi\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial \phi} \qquad \frac{\partial}{\partial y} = \sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial \phi}. \tag{4.30}$$

Vezessük be a kovariáns derivált komponenseit az alábbi módon

$$D_x \equiv \partial_x - ia_x, \qquad D_y \equiv \partial_y - ia_y. \tag{4.31}$$

(4.29) alapján tudjuk, hogy $D_r = \partial_r$ és $D_\phi = \partial_\phi + i\frac{\theta}{\pi}$. (4.30-31) felhasználásával tehát

$$a_x = \frac{\theta/\pi}{r^2}y, \qquad a_y = -\frac{\theta/\pi}{r^2}x. \tag{4.32}$$

Ezek tehát a statisztikus vektorpotenciál relatív koordináták szerinti komponensei. Nyilván (4.3) alapján az X és Y tömegközépponti koordináták szerinti komponensek zérusok. Figyelembe véve, hogy

$$x = x_1 - x_2, \quad y = y_1 - y_2, \quad X = \frac{1}{2}(x_1 + x_2) \quad Y = \frac{1}{2}(y_1 + y_2), \tag{4.33}$$

és

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_1} + \frac{\partial f}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x_1} \qquad \frac{\partial f}{\partial x_2} = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_2} + \frac{\partial f}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x_2},$$

illetve hasonlóan eljárva az y_1 y_2 szerinti parciális deriváltakra is kapjuk, hogy

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial X} + \frac{\partial f}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y_1} = \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial Y} + \frac{\partial f}{\partial y}, \tag{4.34}$$

az első részecskére. A másodikra pedig

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial X} - \frac{\partial f}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y_2} = \frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial Y} - \frac{\partial f}{\partial y}. \tag{4.35}$$

Tekintettel arra, hogy $a_X = 0$ és $a_Y = 0$ a végeredmény,

$$a_{x_1} = -a_{x_2} = a_x = k\frac{y_1 - y_2}{r^2}, \quad a_{y_1} = -a_{y_2} = a_y = -k\frac{x_1 - x_2}{r^2}, \tag{4.36}$$

ahol $r^2 = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$ és

$$k \equiv \frac{\theta}{\pi}. \tag{4.37}$$

A következő feladatunk a (4.36) statisztikus vektorpotenciál fizikai jelentésének tisztázása. Tekintsünk egy részecskét a tetszőleges $x \in \mathbf{R^2}$ pontban! Természetes feltételeznünk, hogy ez a részecske egy bizonyos $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ vektorpotenciált észlel. Ez a részecske nem érzékeli a saját maga által keltett teret, hanem csak a másik részecske által keltettet. Tehát az $\mathbf{x_1} \equiv (x_1, y_1)$ pontban lévő 1. részecske olyan vektorpotenciált generál, melynek komponensei

$$A_x(\mathbf{x}) = k\frac{y - y_1}{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2},$$

$$A_y(\mathbf{x}) = -k\frac{x - x_1}{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2}. \tag{4.38}$$

Az $\mathbf{x_2} \equiv (x_2, y_2)$ pontban lévő 2. részecske tehát az $\mathbf{a_2} = \mathbf{A}(\mathbf{x_2})$ vektorpotenciált észleli. A fent definiált $\mathbf{A}$ vektorpotenciálhoz természetesen a $B = \partial_x A_y - \partial_y A_x$ térerősség tartozik. [Kétdimenzióban ez egy (pszeudo)skalártér.] Számítsuk ki a fenti térerősség fluxusát egy olyan Ω felületen keresztül, melyet egy Γ zárt görbe határol. Nyilván két esetet kell megkülönböztetni aszerint, hogy $x_1 \in \Omega$, vagy pedig $x_1 \notin \Omega$. Feladatunk tehát a

$$\int_\Omega d^2x B = \oint_\Gamma d\mathbf{x}\mathbf{A}(\mathbf{x}), \tag{4.39}$$

körintegrál kiszámítása. Az integrálási kontúrt folytonosan deformálhatjuk mindaddig, amíg az $\mathbf{x_1}$ ponton át nem megyünk. Legyen Γ először egy $\mathbf{x_1}$ középpontú kör! Mivel $\mathbf{A}(\mathbf{x})d\mathbf{x} = A_\phi d\phi = -kd\phi$, és a $z = re^{i\phi}$, $dz = ird\phi e^{i\phi}$ komplex jelöléssel ez az $ik\frac{dz}{z}$ alakba írható át, Cauchy formulája alapján ($\oint_\Gamma \frac{dz}{z} = 2\pi i$) kapjuk, hogy az integrál értéke $-2\pi k$. Ha Ω nem tartalmazza $\mathbf{x_1}$-et akkor Cauchy tétele miatt az integrál zérust ad. Végeredményül tehát azt kaptuk, hogy

$$\int_\Omega d^2xB = \begin{cases} -2\pi k, & \text{ha } \mathbf{x_1} \in \Omega \\ 0, & \text{különben.} \end{cases} \tag{4.40}$$

A (4.40) formula alapján látjuk, hogy az 1. részecske által létesített tér alakja

$$B = -2\pi k\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x_1}), \tag{4.41}$$

azaz a fluxus az 1. részecske tartózkodási helyére lokalizált. A bármionokra tehát úgy is gondolhatunk, mint olyan részecskékre, melyeket töltésükön és tömegükön kívül a -2θ fluxus értéke is jellemez. A (4.16) egyenlet jelentése (4.41) segítségével most már tisztázható. Mivel a részecskék nem hatolhatnak egymásba (az ezeknek megfelelő pontok a vektorpotenciál szinguláris pontjai, ráadásul ezeket a pontokat ki is vágtuk a konfigurációs térből), ezért rájuk Lorentz erő nem hat ($B \equiv 0$). A részecskék közötti kölcsönhatás, akárcsak az Aharonov-Bohm effektus esetén, kizárólag a statisztikus vektorpotenciálnak köszönhető. (Pontosabban az ebből képzett $e^{i\oint_\Gamma \mathbf{A}(\mathbf{x})d\mathbf{x}}$ fázisfaktornak.) Ezek a részecskék ha úgy tetszik egy-egy Aharonov-Bohm "fluxusfonalat" is cipelnek magukkal. Ezeknek a fluxusfonalaknak a kölcsönhatása nemtriviális "fonatstatisztika" megjelenésére vezet.

A fenti két részecskén alapuló fejtegetés könnyen általánosítható N részecskére. A statisztikus vektorpotenciál ekkor

$$a_{x_j} = k\sum_{i\neq j}^{N} \frac{y_j - y_i}{\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}},$$

$$a_{y_j} = -k\sum_{i\neq j}^{N} \frac{x_j - x_i}{\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}}, \tag{4.42}$$

ahol $j = 1, 2, \ldots N$. Vegyük észre, hogy $\mathbf{a}$ komponensei *többértékűek* $\mathbf{R^{dN}}$-en, de *egyértékűek* $\mathbf{R^{dN}}/S_N$-en. Az $\mathbf{a}$-ból képezett

$$A_x(\mathbf{x}) = k\sum_{i\neq j}^{N} \frac{y - y_i}{\sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}},$$

$$A_y(\mathbf{y}) = -k\sum_{i\neq j}^{N}\frac{x-x_i}{\sqrt{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}}, \tag{4.43}$$

vektormező jelentése világos: ez az $\mathbf{x_i}\in\mathbf{R^2}$-ben lévő $j\neq i$ részecskék által létrehozott statisztikus vektorpotenciál. A j-edik részecske természetesen az $\mathbf{a}_j\equiv\mathbf{A}(\mathbf{x_j})$ potenciált érzi. $\mathbf{A}$ az alábbi téregyenletnek tesz eleget

$$\partial_x A_y - \partial_y A_x = -2\pi k\varrho, \tag{4.44}$$

ahol

$$\varrho(\mathbf{x}) = \sum_{i\neq j}^{N}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x_i}). \tag{4.45}$$

Látjuk tehát, hogy a nemtriviális fonatstatisztikát a (4.42) statisztikus vektorpotenciál bevezetésével írhatjuk le. A Hamilton operátor alakja

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{a})^2 = \frac{1}{2m}\sum_{j=1}^{N}(\mathbf{p}_j-\hbar\mathbf{a}_j)^2, \tag{4.46}$$

ahol $\mathbf{p}_j=\frac{\hbar}{i}(\partial_{x_j},\partial_{y_j})$. Vegyük észre, hogy ez N darab szabad bármion Hamilton operátora. A kölcsönhatás a bármionok között tisztán topológiai természetű. Érdemes még megjegyezni, hogy a Hamiltoniban jelenlévő $\mathbf{a}^2=\sum_j\mathbf{a}_j^2$ tag háromrészecske tagok megjelenésére vezet. H-hoz természetesen további $V(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N)$ kölcsönhatási tagot is adhatunk.

4.6. ÖSSZEFOGLALÁS

Ebben a fejezetben felülvizsgáltuk az azonos részecskék kvantummechanikájával kapcsolatos ismereteinket. A részecskéket már klasszikusan is azonosaknak tekintettük. Megmutattuk, hogy N darab d dimenzióban lévő részecske Q konfigurációs tere topológiai szempontból lényegesen eltér $\mathbf{R}^{dN}$-től. A részecskeindexek permutálásán alapuló régi szemlélet helyett egy új topológiai szemléletet vezettünk be. Ennek a lényege: a Q-n tekintett zárt görbék tulajdonságainak vizsgálata. A részecskék $\mathbf{R}^{dN}$-ben történő valódi megcserélését ugyanis Q-beli zárt görbékkel reprezentálhatjuk. A Q-beli zárt görbék ekvivalenciaosztályokba sorolhatók, ezen osztályok egy alkalmasan választott szorzásra nézve csoportot alkotnak. Ez a csoport, $\pi_1(Q)$, Q első homotópia, vagy fundamentális csoportja. Megmutattuk, hogy

$\pi_1(Q)$ szerkezete N részecske esetén lényegesen más kettő, illetve három (vagy ennél nagyobb) dimenzióban. Kétdimenzióban $\pi_1(Q)$ egy végtelen elemű diszkrét csoport, az úgynevezett fonatcsoport, míg ennél nagyobb dimenziókban ez a véges ($N!$ elemű) diszkrét permutációs csoport. A klasszikus konfigurációs tér tanulmányozása után figyelmünket a megfelelő klasszikus dinamika kvantálásának problémája felé fordítottuk. Célunk a kvantumrendszer állapotait reprezentáló $\psi : Q \to \mathbf{C}$ hullámfüggvény, és az N darab szabad, azonos részecske dinamikáját leíró H Hamilton operátor megtalálása volt. A fenti probléma megoldására eredményül az alábbi alternatívát kaptuk.

1. A dinamikát jellemző Hamilton operátor nem más mint, a szokásos N szabad részecskéket leíró $\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{p_i}^2$, a ψ hullámfüggvény azonban $\mathbf{R}^{dN}$-en nemtriviális határfeltételnek kell, hogy eleget tegyen. Ez a határfeltétel Q-n értelmezett nem egyértékű hullámfüggvény bevezetésének felel meg. Ha ψ-t egy Q-beli zárt görbén körbevisszük (ez a részecskék $\mathbf{R}^{dN}$-beli folytonos cseréjének felel meg), az egy statisztikus fázisfaktort szed fel. Ez a fázisfaktor $\pi_1(Q)$ egydimenziós unitér ábrázolását adja. Három vagy ennél magasabb dimenzióban ez a fázisfaktor $+1$ (Bose-Einstein statisztika), vagy ± 1 (Fermi-Dirac statisztika) lehet. Kétdimenzióban egzotikus fonat-statisztikákat (tört statisztikákat) is kaphatunk. Ezekre a fázisfaktor $e^{i\theta}$ ahol $\theta \in [0, 2\pi)$ az úgynevezett statisztikus paraméter.

2. A ψ hullámfüggvény Q-n egyértékű úgy, ahogy ezt korábbi kvantummechanikai tanulmányaink alapján megszoktuk, viszont a Hamilton operátor alakja $\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{N}(\mathbf{p_i} - \hbar\mathbf{a_i})^2$ lesz. Itt $\mathbf{a}_i$ két dimenzióban a (4.42) *statisztikus vektorpotenciál*. Ebben a képben a nemtriviális fonat-statisztikák megjelenését az $\mathbf{a}$ speciális tulajdonságaira vezettük vissza. Ennek alapján a részecskékhez Aharonov-Bohm fluxusfonalakat rendelhetünk -2θ fluxussal, a statisztikát tükröző kölcsönhatás topológiai természetű.

Befejezésül kitérünk annak a fontos kérdésnek a rövid megvitatására, hogy milyen kísérleti bizonyítékaink vannak arra nézve, hogy fonat-statisztikáknak engedelmeskedő részecskék valóban léteznek a természetben. Az első felmerülő kérdés az, hogy mi értelme van két dimenziós kísérleti fizikáról beszélni a mi három dimenziós világunkban? Fowler, Fang, Howard és Stiles 1966-os kísérlete óta tudjuk, hogy az elektronok mozgását valóban korlátozhatjuk egy két dimenziós felületre [7]. Az elektronok mozgását ők egy erős mágneses térbe helyezett félvezető felületére korlátozták. A felületen az elektronok szabadon mozogtak, míg erre merőlegesen a $\triangle E$ gerjesztési energia néhány meV volt. $T = 1K$ hőmérsékleten $kT \sim 0.1meV$, így például $\triangle E = 10meV$ esetén $e^{-\frac{\triangle E}{kT}} = e^{-100} \sim 10^{-44}$, ami gyakorlatilag zérus. Elektrongázunk tehát valóban kétdimenziós. A kétdimenziós kísérleti fizika 1980-óta már egyáltalán nem számít egzotikus területnek. Kitzling, Dorda és Pepper [8] ekkor fedezte fel ugyanis a kvantált Hall-effektust. Eszerint a Hall ellenállása egy kétdimenziós elektron gáznak az alábbi módon kvantált

$$R_H = \frac{h}{\nu e^2} = \frac{25812.807\Omega}{\nu},$$

ahol ν egy egész szám. 1982-ben Tsui, Stormer and Gossard [9] felfedezte a tört kvantum Hall-effektust. Ezek a szerzők megmutatták, hogy ν már bizonyos racionális értékeket is felvehet. A tört kvantum Hall-effektus Laughlin [10], Halperin [11], Arovas, Schrieffer és Wilczek [12] által kidolgozott elmélete alapján tudjuk, hogy az effektus az anyag egy új állapotának, az összenyomhatatlan kvantumfolyadék megjelenésének köszönhető. Ennek a "folyadéknak" az elemi gerjesztéseit olyan kvázirészecskékkel írhatjuk le, melyek tört töltésűek, és fonat-statisztikáknak engedelmeskednek. Három lényegesen különböző [13-15] kísérlet igazolta azt, hogy bármionokat valóban megfigyelhetünk a természetben.

Az 1986-ban felfedezett magas hőmérsékletű szupravezetők képviselik a kísérletileg elérhető kétdimenziós rendszerek másik izgalmas családját. Az effektus bármionok segítségével történő elméleti magyarázatára tett erőfeszítések mindezidáig kísérleti szempontból megalapozatlanok.

4.7 REFERENCIÁK A 4. FEJEZETHEZ

[1] R. Mirman: Nuovo Cimento, **B18**, 110 (1973)

[2] J. M. Leinaas and J. Myrheim: Nuovo Cimento, **B37**, 1 (1977)

[3] T. H. Boyer: Am. J. Phys, **38**, 840 (1970)

[4] F. Wilczek: Phys. Rev. Lett.**48**, 1144 (1982)

[5] E. Artin: Ann. Math. **48**, 101, 643 (1947)

[6] G. Morandi: "The role of topology in classical and quantum physics" Springer-Verlag 1992.

[7] A. B. Fowler, F. F. Fang, W. E. Howard, and P. J. Stiles: Phys. Rev. Lett. **16**, 901 (1966).

[8] K. von Kitzling, G. Dorda, and M. Pepper: Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).

[9] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard: Phys. Rev. Lett. **48**, 1559 (1982).

[10] R. B. Laughlin: Phys. Rev. Lett. **50**, 1395 (1983)

[11] B. I. Halperin: Phys. Rev. Lett. **52**, 1583 (1984)

[12] D. Arovas, J. R. Schrieffer and F. Wilczek:Phys. Rev. Lett. **53**, 722 (1984)

[13] R. G. Clark, J. R. Mallett, S. R. Haynes, J. J. Harris and C. T.Foxon Phys. Rev. Lett. **60**, 1747 (1988)

[14] J. A. Simmons, H. P. Wei, L. W. Engel, D. C. Tsui, and M. Shayegan: Phys. Rev. Lett. **63**, 1731 (1989)

[15] A. M. Chang and J. E. Cunninghamn: Solid State Commun. **72**, 651 (1989)

5. GEOMETRIAI FÁZISFAKTOROK.

A XX. század fizikájának két kiemelkedő alkotása az Einstein nevével fémjelzett *általános relativitáselmélet*, és a Heisenberg, Schrödinger, Dirac és mások által kifejlesztett *kvantumelmélet*. Az egyik elmélet a makroszkópikus objektumokkal (csillagok, galaxisok, és az Univerzum egésze), a másik (főként)⋆ a mikroszkópikus objektumokkal (atomok, molekulák, elemi részecskék) kapcsolatos jelenségek leírását teszi lehetővé. Az általános relativitáselmélet a téridő geometriájával és az abban történő (geodetikus) mozgással foglalkozik. Ez a gravitációs kölcsönhatás elmélete. Kulcsfogalma a *geometria*, az elmélet matematikai szerkezetét pedig a differenciálgeometria illetve a topológia segítségével lehet megragadni. A kvantumelmélet véges vagy végtelen szabadsági fokokkal rendelkező mikrofizikai⋆ rendszerek időfejlődésével, vagy stacionárius állapotok esetén a rendszerek lehetséges állapotainak meghatározásával foglalkozik. Kulcsfogalma a *"határozatlanság"* melyet a Heisenberg-féle határozatlansági reláció fogalmaz meg. Az elmélet matematikai szerkezetét a funkcionálanalízis, a matematikai logika, az algebra és a csoportelmélet tárja fel.

Megszületésük óta a fizikai és a matematikai kutatások homlokterében olyan próbálkozások állnak melyek a fenti két elmélet egyesítését tűzik ki célul. A kvantumgravitáció elméletére az első konzisztens jelölt napjaink un. szuperhúr elmélete. Ez az elmélet a téridő geometriai, és a kvantálás határozatlansági reláción alapuló tulajdonságainak egyesítését kínálja. A húrelmélet a matematika teljes fegyvertárát felvonultatja a számelmélettől az algebrai geometriáig. Az elmélet hallatlanul bonyolult matematikai szerkezetének tisztázása, vagy ami még fontosabb alapvető elvek segítségével történő megfogalmazása még várat magára. A húrelmélet nagy érdeme az, hogy a kvantálás geometriai vonatkozásaira irányította a figyelmet. Nagyon fontos feladat az, hogy a kvantálás és a geometria összefüggéseit minnél egyszerűbb modellrendszerekre tisztázzuk.

Ebben a fejezetben egyszerű kvantummechanikai rendszerek időfejlődésének geometriai és topológiai vonatkozásait tárgyaljuk. Vizsgálataink tárgyát képező rendszerek ideális "gyakorlóterül" szolgálnak mindazok számára akik a kvantumelméletet alaposabban meg szeretnék érteni.

⋆ Itt jegyezzük meg azt, hogy léteznek makroszkópikus kvantumjelenségek is. Lásd például: mezoszkópikus effektusok a szilárdtestfizikában.

Az itt ismertetett módszerek csak tört részét képezik mindazoknak az eljárásoknak melyeket a matematikusok és a fizikusok a végtelen szabadsági fokú kvantumrendszerek (kvantumtérelméletek) tanulmányozására kifejlesztettek. Fontos hangsulyoznunk, hogy az egzotikusnak tűnő topológiai elvek működése már a kvantummechanika keretein belül is tetten érhető. Ami azonban még ennél is fontosabb az az, hogy a tanulmányozandó rendszerek kísérletileg is megvalósíthatóknak bizonyultak. Ezek a kísérletek egyértelműen bebizonyították a geometriai módszerek hatékonyságát. Ezekkel a fizikai rendszerekkel kapcsolatos jelenségek: a kvantum Hall-effektus, a Berry-féle fázis és ezek általánosításai, az egzotikus statisztikák megjelenése két dimenziós rendszerekben, indukált mértékterek felbukkanása effektív molekulafizikai rendszerekben, az Aharonov-Bohm effektus.

Ebben a fejezetben a Berry-féle fázisfaktorral és ennek különféle általánosításaival fogunk foglalkozni.

5.1. A KVANTUM ADIABATIKUS TÉTEL ÉS A BERRY-FÁZIS

Ebben a fejezetben olyan kvantummechanikai rendszereket fogunk vizsgálni melyek Hamilton operátora időfüggő: $H(t)$. Feltesszük továbbá azt is, hogy ez az időfüggés bizonyos $\mathbf{X} \in \mathcal{M}$ paraméterek **lassú** időbeli változásával kapcsolatos, ahol $\mathcal{M}$-vel jelöltük a paraméterek terét. Hamilton operátorunk alakja tehát $H(\mathbf{X}(t))$. Legyen $\mathcal{H}$ a fizikai állapotok Hilbert tere. $\mathcal{H}$ minden rögzített $\mathbf{X} \in \mathcal{M}$-re a $\psi : Q \to \mathbf{C}$ hullámfüggvényekből áll, ahol Q a vizsgált kvantummechanikai rendszer konfigurációs tere, $q \in Q$ pedig annak egy pontja. $\mathbf{X}$ időbeli változásával $\psi(t) \equiv \psi(q, \mathbf{X}(t))$ hullámfüggvények seregét kapjuk. Hangsúlyozzuk, hogy a továbbiakban $\langle\phi(t)|\psi(t)\rangle$ alatt mindig a

$$\langle\phi(t)|\psi(t)\rangle = \int dq\overline{\phi(q, \mathbf{X}(t))}\psi(q, \mathbf{X}(t)), \tag{5.1}$$

integrált fogjuk érteni.

Természetesen meg kellene tudnunk fogalmazni azt, hogy mit is értünk a paraméterek lassú időbeli változásán. A továbbiakban megállapodunk abban, hogy ebben az alfejezetben olyan rendszerekkel foglalkozunk melyekre $H(t/\tau)$ ahol $\tau \to \infty$. A változás tehát végtelenül lassú. Az ilyen **adiabatikus** időfejlődést leíró időtől függő Schrödinger egyenlet alakja

$$i\hbar\partial_t\psi(t) = H(t/\tau)\psi(t) \tag{5.2}$$

ahol $|\psi(0)\rangle$ megadása lerögzíti a kezdőfeltételeket.

Tekintsük most a $H(\mathbf{X}(t))$ Hamilton operátor sajátértékproblémáját minden lehetséges $\mathbf{X}(t)$ paraméterértékre

$$H(\mathbf{X}(t))|n,\mathbf{X}(t)\rangle = E_n(\mathbf{X}(t))|n,\mathbf{X}(t)\rangle, \tag{5.3}$$

ahol $E_n(\mathbf{X}(t))$ jelöli az energiasajátértékeket illetve $|n,\mathbf{X}(t)\rangle$ a megfelelő sajátfüggvényeket. Feltesszük, hogy a sajátértékek nem degeneráltak. Figyeljük meg, hogy így sajátértékek és sajátfüggvények (egydimenziós sajátalterek) parametrizált seregét kapjuk. $E_n(\mathbf{X})$ minden n-re egy vektorváltozós skalárfüggvény $\mathcal{M}$-en, $|n,\mathbf{X}\rangle$ pedig minden n-re egy $\mathcal{M} \to \mathcal{H}$ leképezés. Feltesszük továbbá azt is, hogy $|n,\mathbf{X}\rangle$ **egyértékű** függvénye $\mathbf{X}$-nek. Nyílván $\mathbf{X}$ változtatásával a sajátfüggvények egydimenziós alterei $\mathcal{H}$-ban nemtriviális módon elfordulhatnak. Előfordulhat az is, hogy az $E_n(\mathbf{X})$ "potenciálfelületek" bizonyos $\mathbf{X}^\star$ értékeknél metszik egymást. Az ilyen esetek hatását később fogjuk megvizsgálni, egyenlőre feltesszük azt is, hogy a vizsgálataink tárgyát képező $E_n(\mathbf{X})$ potenciálfelületek a vizsgált időfejlődés során jól elkülönülnek a spektrum többi részétől (**gap-feltétel**). Ezt a feltételt úgy is megfogalmazhatjuk, hogy a külső $\mathbf{X}(t)$ paraméterek változása olyan lassú, hogy a változási sebességgel kapcsolatos kinetikus energia jóval kisebb a vizsgált $E_n(\mathbf{X})$-et a spektrum többi részétől elkülönítő energiakülönbségnél. Az $n \to m, n \neq m$ kvantumátmenetek valószínűségét tehát a vizsgált adiabatikus evolúció során zérusnak vesszük.

A kvantum adiabatikus tétel azt mondja ki [1], hogy amenynyiben $t = 0$-ban (5.3)-nak egy a fenti feltételeknek eleget tevő $|n,\mathbf{X}(0)\rangle$ sajátfüggvényéből indulunk ki, akkor az (5.2) időfüggő Schrödinger egyenlet ezt **egy fázisfaktor erejéig** (5.3) ugyanahhoz az n-hez tartozó $|n,\mathbf{X}(t)\rangle$ sajátfüggvényébe fogja vinni. Röviden: (5.2) adiabatikus evolúció esetén sajátállapotot sajátállapotba visz. Feladatunk tehát: a tételben felbukkanó misztikus "fázisfaktor" mibenlétének tisztázása.

Az (5.2) egyenletet megoldó $|\psi(t)\rangle$ sjátfüggvényt kifejthetjük minden t időpillanatban az (5.3) megoldásainak teljes függvényrendszere szerint

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} c_m(t)|m, \mathbf{X}(t)\rangle. \tag{5.4}$$

Induljunk ki $t = 0$-ban az adiabatikus tétel feltételeinek eleget tevő $m = n$ n-dik sajátállapotbol azaz legyen $|\psi(0)\rangle \equiv |n, \mathbf{X}(0)\rangle$. Mivel adiabatikus evolució során továbbra is az n-dik sajátaltérben maradunk ezért az (5.4) általános megoldást tovább egyszerüsíthetjük a

$$|\psi(t)\rangle = c_n(t)|n, \mathbf{X}(t)\rangle \tag{5.5}$$

alakba, ahol $c_n(t)$, $|\psi\rangle$ és $|n\rangle$ normáltsága miatt egy egységnyi abszolútértékű **fázisfaktor**, $|c_n(t)| = 1$. Behelyettesítve (5.5)-öt az (5.2) Schrödinger egyenletbe kapjuk, hogy $i\hbar(\dot{c}|n\rangle + c|\dot{n}\rangle) = cE_n|n\rangle$. Megszorozva ezt balról $\langle n|$-vel és kihasználva a normáltságot, c-vel való osztás után kapjuk

$$i\hbar\left(\frac{d}{dt}(\log c(t)) + \langle n, \mathbf{X}(t)|\frac{d}{dt}|n, \mathbf{X}(t)\rangle\right) = E_n(\mathbf{X}(t)). \tag{5.6}$$

Az (5.6) egyenletet könnyen kielégíthetjük ha $c(t)$-t a $c(t) = a(t)b(t)$ alakba faktorizáljuk. Igy az $a^{-1}\dot{a} = -\frac{i}{\hbar}E_n$ és a $b^{-1}\dot{b} = -\langle n|\dot{n}\rangle$ differenciálegyenleteket kapjuk. Az egyenleteket megoldva

$$c(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(\mathbf{X}(t'))dt'} e^{-\int_0^t \langle n, \mathbf{X}(t')|\frac{d}{dt'}|n, \mathbf{X}(t')\rangle dt'}. \tag{5.7}$$

Ezt a kifejezést kell használnunk (5.5)-ben. Figyeljük meg, hogy $\langle n|n\rangle = 1$ miatt $\langle\dot{n}|n\rangle + \langle n|\dot{n}\rangle = 0$. Mivel $\langle\dot{n}|n\rangle = \overline{\langle n|\dot{n}\rangle}$, ezért az $\langle n|\dot{n}\rangle$ mennyiség tiszta képzetes. Tehát az (5.7)-ben álló második kifejezés **is** egy fázisfaktor ahogyan annak lennie is kell.

Tekintsük most az adiabatikus időfejlődésnek egy fontos speciális esetét! Tegyük fel, hogy $0 \leq t \leq T$ és $\mathbf{X}(T) = \mathbf{X}(0)$, azaz a **rendszert az $\mathcal{M}$ paramétertérben adiabatikusan körbevisszük egy zárt görbén**. Mivel az (5.3) sajátértékegyenleteknek az **egyértékű** megoldásait vesszük ezért $|n, \mathbf{X}(T)\rangle = |n, \mathbf{X}(0)\rangle$. Ha $t = 0$-ban $|n, \mathbf{X}(0)\rangle$ -val indulunk akkor T idő eltelte után a

$$|\psi(T)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^T E_n(\mathbf{X}(t))dt} e^{-\int_0^T \langle n, \mathbf{X}(t)|\frac{d}{dt}|n, \mathbf{X}(t)\rangle dt}|n, \mathbf{X}(0)\rangle, \tag{5.8}$$

állapotba jutunk. Az első fázisfaktort a továbbiakban **dinamikai fázisfaktornak** fogjuk nevezni, tekintettel arra, hogy a kvantummechanikai rendszerünk dinamikáját $H(t)$ határozza meg, és $E_n(t)$ pedig ennek egy sajátértéke.

Fordítsuk most figyelmünket a másik fázisfaktor felé! Vegyük észre, hogy $|n\rangle$ az időfüggést implicit módon $\mathbf{X}(t)$-n keresztül tartalmazza. Mivel

$$\frac{d}{dt}|n, \mathbf{X}(t)\rangle = \nabla_{\mathbf{X}}|n, \mathbf{X}(t)\rangle\dot{\mathbf{X}}(t), \tag{5.9}$$

a t-re történő integrálást átírhatjuk egy $\mathcal{M}$-beli körintegrállá. Legyen $\phi_n(q, \mathbf{X}(t)) \equiv \langle q|n, \mathbf{X}(t)\rangle$! Bevezetve a

$$\mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{X}) \equiv i\langle n, \mathbf{X}|\nabla_{\mathbf{X}}|n, \mathbf{X}\rangle = i\int dq\overline{\phi_n(q, \mathbf{X})}\nabla_{\mathbf{X}}\phi_n(q, \mathbf{X}) \tag{5.10}$$

jelölést végeredményünket az alábbi alakba írhatjuk

$$|\psi(T)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^T E_n(\mathbf{X}(t))dt}e^{i\oint_C \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{X})d\mathbf{X}}|n, \mathbf{X}(0)\rangle. \tag{5.11}$$

A (5.10) mennyiség neve **az n-dik sajátaltérhez tartozó Berry-féle vektorpotenciál**. Az elnevezés jogosultságának bizonyítására megmutatjuk, hogy $\mathbf{A}^{(n)}$ csak egy skalárfüggvény gradiense erejéig meghatározott. Ennek bizonyításához vegyük észre, hogy az (5.3) egyenlet által definiált **egyértékű** $|n, \mathbf{X}\rangle$ sajátfüggvények csak egy helytől függő fázisfaktor erejéig meghatározottak. Azaz, alkalmazzuk az

$$|n, \mathbf{X}\rangle \to e^{i\alpha(\mathbf{X})}|n, \mathbf{X}\rangle \tag{5.12}$$

transzformációt, ahol most a fázisfaktorról is feltesszük , hogy **egyértékű** függvénye $\mathbf{X}$-nek. Ekkor $\mathbf{A}^{(n)} = i\langle n|\nabla|n\rangle$ transzformációs szabálya

$$\mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{X}) \to \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{X}) - \nabla_{\mathbf{X}}\alpha(\mathbf{X}), \tag{5.13}$$

ahogyan azt vártuk. Az (5.11)-ben szereplő körintegrál természetesen változatlan marad hiszen $\oint_C \nabla_{\mathbf{X}}\alpha(\mathbf{X})d\mathbf{X} = 0$. Megjegyezzük, hogy

$e^{i\alpha(\mathbf{X})}$ egy $\mathcal{M} \to U(1)$ leképezés, hiszen a fázisfaktorral való szorzás felfogható úgy mint egy 1×1-es **unitér** mátrix-val való szorzás. Az (5.12) és (5.13) transzformációs szabályt $U(1)$ **mérték**transzformációnak nevezzük. A Berry-féle vektorpotenciál tehát nem más mint egy az $\mathcal{M}$ paramétertéren "élő" $U(1)$ **mértéktér**.

Az (5.11)-ben kapott eredményünket ezek után az alábbi módon értelmezhetjük. A zárt görbén T idő alatt történő adiabatikus időfejlődés során az $|n, \mathbf{X}(0)\rangle$ hullámfüggvény egy olyan fázisfaktort szed fel mely két részből áll. Az egyik a már fent említett **dinamikai fázisfaktor**. A másik fázisfaktort ($e^{i \oint_C \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{X}) d\mathbf{X}}$) **Berry-féle fázisfaktornak** fogjuk nevezni. Ez a fázisfaktor, melynek fontosságára M. V. Berry [2] irányította a fizikusok figyelmét, speciális esete mindazoknak a **geometriai fázisfaktorok**nak melyeket a fizikusok a későbbiekeben találtak. A

$$\gamma^{(n)}(C) \equiv \oint_C \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \tag{5.14}$$

fázis **geometriai** jellegű, hiszen csak a C görbétől függ, nem függ attól a sebességtől (mindaddig mig az adiabatikus tétel diktálta lassú sebességtartományban maradunk) mellyel a C-t körüljárjuk. A dinamikai fázis esetén a helyes kérdes: Mennyi ideig tartott az utazás? A geometriai fázis esetén pedig: Merre jártál?

Az (5.14) Berry-fázis további tulajdonságainak vizsgálatához egy kis matematikai kitérőt kell tennünk. Az $\mathcal{M}$ paramétertér szerkezetéről nem sokat mondtunk. A továbbiakban feltesszük, hogy vizsgálatainkat egy olyan $\mathcal{U} \subset \mathcal{M}$ **nyílt** halmazon belül végezzük mely diffeomorf módon leképezhető $\mathbf{R}^D$ egy megfelelő nyílt halmazára. (A megfelelő egy-egyértelmű leképezés diffeomorf ha a leképezés és az inverze is (akárhányszor) differenciálható.) Ez azt jelenti, hogy az $\mathcal{U} \subset \mathcal{M}$-beli pontokat X^μ, $\mu = 1, 2 \ldots, D$ lokális koordinátákkal írhatjuk le. Másképp szólva az $\mathcal{M}$ paramétertérre **lokálisan** úgy gondolhatunk mint $\mathbf{R}^D$-re. Persze $\mathcal{M}$-nek létezhetnek nagyon fontos **globális** tulajdonságai is. (Gondoljunk az előző fejezetben megismert $\mathbf{R}^2/\mathbf{Z}^2$ kúpra!) Ebben a fejezetben azonban feltesszük, hogy $\mathcal{M}$ nem tartalmaz szinguláris pontokat (mint például a kúp). Matematikailag ezt úgy fogalmazhatjuk meg, hogy $\mathcal{M}$ előáll olyan $\mathcal{U}_\alpha$, $\alpha = 1, 2 \ldots$ nyilt halmazok uniójaként melyek mind diffeomorfak $\mathbf{R}^D$ valamely nyílt halmazával. Az $\mathcal{U}_\alpha$-k lokális koordináták különböző választásának felelnek meg. Feltesszük, hogy az egyik X^μ lokális koordinátáról a másik X'^{ν} koordinátára való áttérésért felelős $X'^{\nu}(X)$ függvények végtelenszer differenciálhatóak. Az ilyen tulajdonságokkal rendelkező $\mathcal{M}$-et **differenciálható sokaságnak nevezzük**. A kúp nyílván nem differenciálható sokaság. A továbbiakban lokálisan fogunk dolgozni, tehát $\mathcal{M}$-re úgy fogunk gondolni mint $\mathbf{R}^D$-re. Ahol a globális tulajdonságokat is szeretnénk hangsúlyozni (például a következő három alfejezetben ahol $\mathcal{M} = S^2$ a kétdimenziós gömbfelület) ott a különböző lokális koordináták választásával kapcsolatos kérdésekre is kitérünk.

Használjuk tehát $\mathcal{M}$ leírására a továbbiakban az $X^\mu, \quad \mu = 1, 2, \ldots, D$ lokális koordinátákat! Ekkor $\nabla_{\mathbf{X}}$ helyett a $\frac{\partial}{\partial X^\mu} \equiv \partial_\mu$ jelölést használhatjuk. Ezzel a jelöléssel $A_\mu^{(n)}(X) = i\langle n, X|\partial_\mu|n, X\rangle$. Vezessük be továbbá az

$$A^{(n)} \equiv A_\mu^{(n)}(X)dX^\mu \tag{5.15}$$

jelölést. Tegyük fel, hogy a dX^μ koordinátadifferenciálok antiszimmetrikus módon szorzódnak. Vezessük be a koordinátadifferenciálok antiszimmetrikus szorzására a $\wedge$ jelet. Például $dX^1 \wedge dX^2 = -dX^2 \wedge dX^1$. Nyílván a feltételezett antiszimmetria miatt $dX^1 \wedge dX^1 = -dX^1 \wedge dX^1 = 0$. Hasonlóan írhatunk több dX^μ-ből álló szorzatokat is. Például $dX^1 \wedge dX^4 \wedge dX^5 = dX^4 \wedge dX^5 \wedge dX^1$, hiszen kétszer kellet dX^1-et átemelni.

Az (5.15)-ben szereplő $A^{(n)}$ **egyetlen** dX-t tartalmazó tagok összege. Nevezzük az ilyen A-t **egy-formá**-nak. Hasonlóan definiálhatunk **két-formát**,... **k-formát** is. Például az

$$F = \frac{1}{2}F_{\mu\nu}(X)dX^\mu \wedge dX^\nu \tag{5.16}$$

mennyiség egy két-forma. Mivel $F_{\mu\nu} = \frac{1}{2}(F_{\mu\nu} + F_{\nu\mu}) + \frac{1}{2}(F_{\mu\nu} - F_{\nu\mu})$, $dX^\mu \wedge dX^\nu = -dX^\nu \wedge dX^\mu$ miatt láthatjuk,hogy (5.16)-ban csak $F_{\mu\nu}$ **antiszimmetrikus** része szerepelhet. Feltesszük tehát, hogy az (5.16)-ban szereplő $F_{\mu\nu}$ antiszimmetrikus tenzor. Látjuk tehát, hogy míg egy egy-formának egy kovarians vektor A_μ addig egy két-formának egy kétindexes antiszimmetrikus kovariáns tenzor $F_{\mu\nu}$ felel meg. Hasonlóan építhetünk fel k-formákat melyeknek mind a k indexében teljesen antiszimmetrikus kovariáns tenzorok felelnek meg

$$\omega = \frac{1}{k!}\omega_{\mu_1\mu_2\ldots\mu_k}dX^{\mu_1} \wedge dX^{\mu_2} \wedge \ldots \wedge dX^{\mu_k}. \tag{5.17}$$

Könnyen megmutathatjuk D-dimenzióban a k formák lineáris teret alkotnak melynek dimenziója $\binom{D}{k}$. Egy ω p-formát és egy η q-formát összeszorozhatunk az alábbi módon

$$\omega\wedge\eta = \omega_{\mu_1\ldots\mu_p}\eta_{\nu_1\ldots\nu_q}\frac{1}{p!q!}dX^{\mu_1}\wedge\ldots\wedge dX^{\mu_p}dX^{\nu_1}\wedge\ldots\wedge dX^{\nu_q} = (-1)^{pq}\eta\wedge\omega,$$

melynek eredménye láthatóan egy $p+q$-forma.

Egy k-formából $k+1$-formát képezhetünk az u.n. **külső deriválás** segítségével. Ezt az operátort $\mathbf{d}$-vel jelöljük és hatását az ω k-formára az alábbi módon értelmezzük

$$d\omega = \frac{1}{k!}(\partial_\nu\omega_{\mu_1\mu_2\ldots\mu_k})dX^\nu\wedge dX^{\mu_1}\wedge dX^{\mu_2}\wedge\ldots\wedge dX^{\mu_k}. \tag{5.18}$$

Könnyen megmutatható, hogy

$$d(\omega\wedge\eta) = d\omega\wedge\eta + (-1)^p\omega\wedge d\eta.$$

Egy $f(X)$ függvény (**nulla-forma**) külső deriváltja a $df = \partial_\mu f(X)dX^\mu$ egy-forma. A külső deriválás fontos tulajdonsága,hogy $\mathbf{d^2 = 0}$. Ennek bizonyításához alkalmazzuk a $\mathbf{d}$ operációt mégegyszer (5.18)-ra, így $d^2\omega = \frac{1}{k!}(\partial_\mu\partial_\nu\omega_{\mu_1\mu_2\ldots\mu_k})dX^\mu\wedge dX^\nu\wedge dX^{\mu_1}\wedge dX^{\mu_2}\wedge\ldots\wedge dX^{\mu_k}$, ami zérus tekintettel arra, hogy $\partial_\mu\partial_\nu$ egy szimmetrikus mátrix (Young-tétel), míg a $dX^\mu\wedge dX^\nu$ mátrix antiszimmetrikus.

Ezek után készítsük el az (5.15) **Berry-féle egy-forma** külső deriváltját!

$$F^{(n)} \equiv dA^{(n)} = \partial_\nu A^{(n)}_\mu dX^\nu\wedge dX^\mu = \frac{1}{2}(\partial_\nu A^{(n)}_\mu - \partial_\mu A^{(n)}_\nu)dX^\nu\wedge dX^\mu, \tag{5.19}$$

tehát (5.16) alpján az $F^{(n)}_{\mu\nu}$ tenzor alakja $F^{(n)}_{\mu\nu} = \partial_\mu A^{(n)}_\nu - \partial_\nu A^{(n)}_\mu$. $F^{(n)}$ neve **Berry-féle görbületi két-forma**, $F^{(n)}_{\mu\nu}$ pedig a megfelelő **görbületi tenzor**.

Tekintsük most azt a fontos speciális esetet amikor $D = 3$, azaz a paramétertér lokálisan $\mathbf{R}^3$, a három dimenziós Euklideszi tér! Ekkor $F^{(n)}_{ij} = \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm}\partial_l A^{(n)}_m$ ahol $i,j,k,lm = 1,2,3$. Tehát $F^{(n)}_{ij} = \varepsilon_{ijk}(\nabla\times\mathbf{A}^{(n)})_k$, ahol $\nabla\times\mathbf{A}^{(n)}$ az $\mathbf{A}^{(n)}$ vektormező rotációját jelenti.

Könnyen megmutatható, hogy a külső deriválás $d^2 = 0$ tulajdonsága az f nulla-formán a $rot(gradf) = 0$, $A = A_\mu dX^\mu$ egy-formákon pedig a $div(rot\mathbf{A}) = 0$ kifejezésekkel ekvivalens. Legyen $\mathbf{B}^{(n)} = \nabla \times \mathbf{A}^{(n)}$, ekkor

$$F^{(n)} = \frac{1}{2} B_k^{(n)} \varepsilon_{kij} dX^i \wedge dX^j = \mathbf{B}^{(n)} \mathbf{dS}, \tag{5.20}$$

ahol kihasználtuk azt, hogy $\varepsilon_{ijk} \frac{1}{2} dX^i \wedge dX^j = \varepsilon_{ijk} dX^i dX^j$ ez pedig éppen az irányított felületelem k-dik komponense $\mathbf{dS}_k$.

Visszatérve az (5.14) Berry-fázishoz, ha $D = 3$ akkor a Stokes-tétel felhasználásával azt kapjuk

$$\gamma^{(n)}(C) = \int_S \mathbf{B}^{(n)}(\mathbf{X}) d\mathbf{S}, \tag{5.21}$$

azaz **a Berry-fázis nem más mint az $B^{(n)} = \nabla \times A^{(n)}$ vektormező fluxusa azon az S felületen keresztül melyet C határol.**

Ezt az eredményt differenciálformákkal az alábbi rövid alakban fogalmazhatjuk meg

$$\gamma^{(n)}(C) = \int_{\partial S = C} A^{(n)} = \int_S dA^{(n)} = \int_S F^{(n)}, \tag{5.22}$$

ahol a $\partial S = C$ jelölés arra utal, hogy az $A^{(n)}$ egy-formát az S-et határoló zárt C görbére kell integrálni. Ebben a kompakt írásmódban $\int_{\partial S = C} A^{(n)}$ tetszőleges dimenzióban történő vonalintegrált jelent (lásd (5.14)), míg $\int_S F^{(n)}$ egy D dimenziós felületi integrált. Az (5.22)-ben szereplő második egyenlőség a Stokes tétel D dimenziós általánosítása. Ennek a tételnek a bizonyítását és a differenciálformák integrálásával kapcsolatos bővebb információt lásd például [3]-ben. Összefoglalva: **a Berry-fázis az (5.19) görbületi két-forma fluxusa a C görbét határoló S felületen át.**

Ennek az alfejezetnek a lezárásaként az $F^{(n)}$ Berry-féle két-formára néhány alternatív összefüggést vezetünk le. Kényelmi okokból vezessük be a $|dn\rangle \equiv d|n, X\rangle = \partial_\mu |n, X\rangle dX^\mu$ jelölést! A jelölés egy kicsit félrevezető hiszen nem az n-et deriváljuk X szerint hanem az n-vel indexelt implicit módon X-től is függő sajátfüggvényeket. Ekkor

$$F^{(n)} = dA^{(n)} = id\langle n|dn\rangle = i\langle dn| \wedge |dn\rangle = -\Im\langle dn| \wedge |dn\rangle. \tag{5.23}$$

Itt kihasználtuk, hogy $\langle n|d^2n\rangle = 0$ illetve azt, hogy $\langle n|dn\rangle$ tiszta képzetes tehát $\langle dn| \wedge |dn\rangle$ is az. $\Im$ a z komplex szám **képzetes részét** jelenti,azaz $z = \Re z + i\Im z$. Alkalmazzuk most a **d** operációt a $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ sajátértékegyenletre (lásd még (5.3)). Azt kapjuk, hogy

$$dH|n\rangle + H|dn\rangle = dE_n|n\rangle + E_n|dn\rangle. \tag{5.24}$$

Szorozzuk meg ezt **balról** $\langle m|$-vel ahol $m \neq n$! Ekkor az ortonormáltságot kihasználva és a $\langle m|Hdn\rangle = \langle Hm|dn\rangle = E_m\langle m|dn\rangle$ átalakítás után az

$$\langle m|dn\rangle = \frac{\langle m|dH|n\rangle}{E_n - E_m}, \tag{5.25}$$

összefüggésre jutunk. Mivel az $\{|m\rangle\}_{m=1}^{\infty}$ rendszer teljes az $I = \sum_{m=1}^{\infty}|m\rangle\langle m|$ egységoperátort "beszúrhatjuk" $F^{(n)}$ (5.23) összefüggésébe. Az eredmény $F^{(n)} = -\Im\sum_{m=1}^{\infty}\langle dn|m\rangle \wedge \langle m|dn\rangle$. Kihasználva az (5.25) összefüggést és a komplex konjugáltját az alábbi végeredményre jutunk

$$F^{(n)} = -\Im\sum_{m\neq n}\frac{\langle n|dH|m\rangle \wedge \langle m|dH|n\rangle}{(E_n - E_m)^2}, \tag{5.26}$$

ahol az $n = m$ tag nem szerepel a szummában hiszen $\langle dn|n\rangle \wedge \langle n|dn\rangle$ valós lévén ez két tiszta képzetes mennyiség szorzata. Az (5.26) formula igen fontos a gyakorlati számolások szempontjából hiszen a sajátfüggvények paraméterek szerinti deriváltjait **nem** tartalmazza.

$F^{(n)}$ egy másik hasznos alakját vezethetjük le a $P^{(n)} = |n\rangle\langle n|$ spektrális projektorok bevezetésével. Ezekre ${P^{(n)}}^2 = P^{(n)}$, $TrP^{(n)} = \langle n|n\rangle = 1$. Mivel $dP^{(n)} = |dn\rangle\langle n| + |n\rangle\langle dn|$ könnyen megmutathatjuk, hogy

$$F^{(n)} = -\Im Tr(P^{(n)}dP^{(n)} \wedge dP^{(n)}P^{(n)}) = -\Im Tr(P^{(n)}dP^{(n)} \wedge dP^{(n)}), \tag{5.27}$$

ahol az utolsó egyenlőségnél kihasználtuk a $Tr(ABC) = Tr(CAB)$ tulajdonságot.

5.2. DEGENERANCIÁK

Ebben az alfejezetben megvizsgáljuk mi történik ha két szomszédos potenciálfelület $E_n(\mathbf{X}) \equiv E_-(\mathbf{X})$ és $E_{n+1}(\mathbf{X}) = E_+(\mathbf{X})$ valamely $\mathbf{X} = \mathbf{X}^\star$ értéknél egybeesik, azaz $E_+(\mathbf{X}^\star) = E_-(\mathbf{X}^\star)$. Az egyszerűség kedvéert feltesszük azt is, hogy $D = 3$ tehát $\mathbf{X}$ egy közönséges három komponensű vektor. Legyen továbbá $E_+(\mathbf{X}) \geq E_-(\mathbf{X})$. Használjuk fel az (5.26) formulát, ekkor (5.21) alapján $\gamma^{(n)}(C)$ Berry-fázishoz a szummából az a tag fogja a legnagyobb járulékot adni melyre az energianevező a legkisebb. Ha $\mathbf{X}$ $\mathbf{X}^\star$ környezetében marad akkor $H(\mathbf{X})$-et első rendig sorbafejthetjük $\mathbf{X} - \mathbf{X}^\star$-ban, s így,

$$\mathbf{B}^{(+)}(\mathbf{X}) = -\Im \frac{\langle +(\mathbf{X}|\nabla H(\mathbf{X}^\star)| - (\mathbf{X})\rangle \times \langle -(\mathbf{X}|\nabla H(\mathbf{X}^\star)| + (\mathbf{X})\rangle}{(E_+(\mathbf{X}) - E_-(\mathbf{X}))^2}, \tag{5.28}$$

ahol $| \pm (\mathbf{X})\rangle$ az $E_\pm(\mathbf{X})$-hez tartozó sajátfüggvények. Nyilvánvaló, hogy $\mathbf{B}^{(+)} = -\mathbf{B}^{(-)}$, ezért $\gamma^{(+)}(C) = -\gamma^{(-)}(C)$. Szorítkozzunk arra a legegyszerűbb esetre amikor $E_\pm(\mathbf{X}^\star) = 0$ és $\mathbf{X}^\star = 0$. Ezt elérhetjük a koordinátarendszer origójának alkalmas eltolásával és a Hamilton operátor megfelelő konstanssal való eltolásával. A két ($|\pm\rangle$) állapotot összecsatoló $H(\mathbf{X})$-et egy 2×2 Hermitikus mátrixszal reprezentálhatjuk. A legáltalánosabb ilyen mátrix kifejthető a három Pauli mátrix és az egységmátrix szerint: $H = a_i\sigma_i + bI$. A b konstans megválasztása csak az energia zérusszintjét tolja el, ezért az általánosság megsértése nélkül feltehetjük, hogy $a_i = \frac{1}{2}X_i$. Tehát $H(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}X_i\sigma_i, i = 1,2,3$. Ekkor $E_+(\mathbf{X}) = -E_-(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}R = \sqrt{X_1^2 + X_2^2 + X_3^2}$. Tehát a degenerancia egy olyan izolált pontban történik ahol **három** paraméter egyszerre tűnik el. A Hamilton operátor konkrét alakjából következik, hogy $\nabla H = \frac{1}{2}\sigma$.

A $\mathbf{B}^{(n)}$ kiszámítását jelentősen megkönnyíthetjük, ha a koordinátarendszerünket úgy forgatjuk el, hogy az $\mathbf{X}$ vektor a z tengely irányába mutasson. Ekkor $|\pm(\mathbf{X})\rangle = |\pm\rangle$, ahol $|\pm\rangle$ a szokásos spin sajátfüggvények melyekre

$$\sigma_1|\pm\rangle = |\mp\rangle, \quad \sigma_2|\pm\rangle = \pm i|\mp\rangle, \quad \sigma_3|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle. \tag{5.29}$$

Az (5.28)-ban lévő vektoriális szorzat első és második komponense nyilván zérus lesz hiszen ezek mindegyikében szerepel szorzóként a $\langle\pm|\sigma_3|\mp\rangle = 0$ mátrixelem. A harmadik komponensre kapjuk,hogy

$$\mathbf{B}_3^{(+)} = -\frac{1}{2R^2} Im\langle +|\sigma_1|-\rangle\langle -|\sigma_2|+\rangle. \tag{5.30}$$

Azt kaptuk tehát, hogy $\mathbf{B}^{(+)} = (B_1^{(+)}, B_2^{(+)}, B_3^{(+)}) = -\frac{1}{2R^2}(0,0,1)$. Ezekután a koordinátatengelyeinket tetszőleges állásba visszaforgatva az eredmény

$$\mathbf{B}^{(+)} = -\frac{1}{2}\frac{\mathbf{X}}{R^3}. \tag{5.31}$$

Ez pedig egy **a paramétertér origójában lévő $-\frac{1}{2}$ póluserősségű mágneses monopólus mágneses térerőssége.** Továbbá,**ha az $\mathbf{R}^3$ pontjaival parametrizált kvantummechanikai rendszerünket egy $\mathbf{X}^\star$ közelében lévő S-et határoló C zárt görbén adiabatikusan körbevisszük , akkor a $|+(\mathbf{X})\rangle$ által felszedett Berry-fázis egy a $\mathbf{X}^\star$ pontban lévő $-\frac{1}{2}$ póluserősségű mágneses monopólus S-en átmenő fluxusával lesz egyenlő.** Mivel $\mathbf{dS} = \mathbf{n}R^2 d\Omega$ $(\mathbf{n} = \mathbf{X}/R)$, ezért $\gamma^{(\pm)}(C) = \mp\frac{1}{2}\Omega(C)$ **ahol $\Omega(C)$ az a térszög amely alatt a C görbét látjuk a degenerancia $\mathbf{X}^\star$ pontjából.**

Ez az igen fontos eredmény azt mutatja, hogy azok a paramétertérben lévő pontok melyekre két potenciálfelület metszi egymást bizonyos értelemben szingulárisak. Itt $\mathbf{B}^{(n)}$ divergenciája nem zérus ($dF^{(n)} \neq 0$ jóllehet $F^{(n)} = dA^{(n)}$). Ezek azok a pontok melyeknél az adiabatikus tétel már nem alkalmazható, hiszen ezek közelében a gap feltétel már nem teljesül. Ezeket a pontokat topológiai szempontból konzisztens módon figyelembe vehetjuk ha egyszerűen kivágjuk őket $\mathcal{M}$-ből. Például az előző esetben ekkor $\mathcal{M} = \mathbf{R}^3 - \{0\}$ lenne, amelyben ugyan minden görbe még összehúzható egy pontba, de minden gömbfelület már nem. (Például az origót is magábafoglaló gömbfelület.) A Berry-fázist felfoghatjuk tehát egy olyan globális detektornak is melynek segítségével feltérképezhetjük $\mathcal{M}$ topológiai szerkezetét.

5.3. SPIN MÁGNESES TÉRBEN

Tekintsünk egy $\mathbf{m}$ mágneses momentummal rendelkező részecskét. Ekkor a mágneses momentum

$$\mathbf{m} = \frac{\hbar e}{2mc} g\mathbf{S}. \tag{5.32}$$

ahol $\mathbf{S}$ az s spinű részecske impulzusmomentum operátora, g a Landé-féle g faktor ,$\frac{e\hbar}{2mc}$ a Bohr-magneton. Helyezzük ezt a részecskét lassan változó mágneses $\mathbf{B}(t)$ térbe. Hogy ne keverjük össze $\mathbf{B}$-t mely most valódi mágneses teret jelöl az (5.20)-ban definiált $\mathbf{B}^{(n)}$-vel ami három dimenziós paramétertér esetén épp a Berry-féle görbületi két-forma komponenseivel kapcsolatos, legyen $\mathbf{X}(t) \equiv \mathbf{B}(t)$.

A mágneses momentum és a mágneses tér kölcsönhatását leíró Hamilton operátor

$$H(\mathbf{X}(t)) = g\frac{e\hbar}{2mc}\mathbf{X}\mathbf{S} \equiv b\mathbf{X}\mathbf{S}. \tag{5.33}$$

Az (5.33) Hamiltoni sajátértékei

$$E_n(\mathbf{X}) = bnX, \quad n = -s, \ldots + s, \quad X \equiv |\mathbf{X}| \tag{5.34}$$

Ugyanis $\mathbf{X}$-t a z-tengely irányába forgatva éppen $S_3 \equiv S_z$ sajátértékproblámáját kapjuk. Ez pedig a fenti $2s+1$ sajátértékhez vezet.

Tegyük fel, hogy a mágneses teret adiabatikusan változtatjuk. Induljunk ki az (5.33) Hamiltoni egyik $|n, \mathbf{X}(0)\rangle$ sajátállapotából. A kérdés: ha T idő eltelte és egy C zárt görbe bejárása után a mágneses tér iránya visszatér a kiindulópontba mekkora Berry-fázist szed fel a hullámfüggvény?

Az (5.21), (5.22) és (5.26)-os összefüggéseket felhasználva a Berry-fázis az alábbi háromkomponensű vektor fluxusa lesz azon felületen keresztül melynek határa C,

$$\mathbf{B}^{(n)}(\mathbf{X}) = -\Im \sum_{m \neq n} \frac{\langle n|\mathbf{S}|m\rangle \times \langle m|\mathbf{S}|n\rangle}{X^2(n-m)^2}, \tag{5.35}$$

$\mathbf{B}^{(n)}(\mathbf{X})$ kiszámításához $\mathbf{X}$-et ismét a z-tengely irányába forgatjuk és kihasználjuk az alábbi összefüggéseket

$$(S_1 \pm iS_2)|n, s\rangle = \sqrt{s(s+1) - n(n \pm 1)}|n \pm 1, s\rangle \quad S_3|n, s\rangle = n|n, s\rangle. \tag{5.36}$$

Ennek alapján láthatjuk, hogy a szummába csak olyan állapotok adnak járulékot melyekre $m = n \pm 1$. Továbbá $B_1^{(n)}$ és $B_2^{(n)}$ kifejezésében a vektoriális szorzás miatt S_3 offdiagonális mátrixelemei is szerepelnek. Ezért $B_1 = B_2 = 0$. Marad tehát $B_3^{(n)}$.

$$\begin{aligned} B_3^{(n)} &= -\frac{1}{X^2}\Im\{\langle n|S_1|n+1\rangle\langle n+1|S_2|n\rangle - \langle n|S_2|n+1\rangle\langle n+1|S_1\rangle \\ &\quad + \langle n|S_1|n-1\rangle\langle n-1|S_2|n\rangle - \langle n|S_2|n-1\rangle\langle n-1|S_1\rangle\} \\ &= -\frac{n}{X^2}. \end{aligned} \tag{5.37}$$

Visszaforgatva a koordinátarendszert kapjuk, hogy

$$\mathbf{B}^{(n)}(\mathbf{X}) = -n\frac{\mathbf{X}}{X^3}. \tag{5.38}$$

Az (5.21) Berry-fázis tehát egy $-n$ póluserősségű mágneses monopólus azon felületen átmenő fluxusával egyenlő melyet a C görbe határol. A Berry-féle fázisfaktor pedig

$$e^{i\gamma^{(n)}(C)} = e^{-in\Omega(C)}, \tag{5.39}$$

ahol $\Omega(C)$ az a térszög amely alatt az origóból a C görbét látjuk. $n = 1$ esetén például ha B-t egy 60 fokos félnyílásszögű kúp mentén változtatjuk, akkor $\gamma = \pi$, így a hullámfüggvény előjelet vált.

Vegyük észre, hogy a probléma $s = 1/2$ esetén matematikai szempontból ugyanaz mint az előző alfejezetben szereplő. (Ott $\mathbf{X}$ egy tetszőleges paraméter volt itt pedig $\mathbf{X}$ a változó mágneses téret jelenti.) Figyeljük meg azt is, hogy az $\mathbf{X} = 0$ pont az $\mathcal{M} = \mathbf{R}^3$ paramétertérben speciális pont. Ebben a pontban ugyanis az $E = 0$ sajátérték $2s+1$-szeresen degenerált. Ennek a pontnak a közelében az adiabatikus tétel érvényét veszti. Ennek a pontnak a környezetét egy alkalmas G gömbbel kizárhatjuk a paramétertérből. Az így kapott új paramétertér $\mathbf{R}^3 - G$. Ez fordul elő akkor is amikor a **mágneses térnek csak az iránya változik**. Ekkor a paramétertér $\mathcal{M} = S^2$ a **kétdimenziós gömbfelület**.

A fentiekben levezetett Berry-fázis jelenlétét kísérletileg is igazolták [4].

5.4. AZ AHARONOV-ANANDAN FÁZIS

Az eddigiek során olyan kvantummechanikai időfejlődést tekintettünk melyet adiabatikusnak gondoltunk el. Ennek a lényege az volt, hogy ha $t = 0$-ban a Hamilton operátor $E_n(0)$-hoz tartozó M dimenziós sajátalteréből indulunk ki* , akkor az időtől függő Schrödinger egyenlet ezt az alteret egy későbbi $t \neq 0$ időpontbeli, **de ugyanehhez a sajátértékhez tartozó** sajátaltérbe viszi. A **különböző** sajátértékekhez tartozó alterek közötti **kvantumátmenetek valószínűségét tehát elhanyagoltuk**.

Ebben a fejezetben általánosabb időfejlődést fogunk vizsgálni. Ehhez azonban előbb tisztáznunk kell a kvantummechanikai állapotok terének fogalmát. Egy kvantumrendszer lehetséges állapotait a $\mathcal{H}$ Hilbert tér vektorai reprezentálják. Kísérleti szempontból azonban a rendszer fizikai állapotát bármely időpillanatban **mérésekkel határozhatjuk meg**. Méréskor olyan megfigyelhető fizikai menynyiségeknek megfelelő Hermitikus operátorok sajátértékeit kapjuk, melyek egymás között **kommutálnak**. A rendszer állapota a mérés után a megfelelő **közös sajátvektor lesz**. A sarkallatos pont az, hogy **a rendszer állapota így egy komplex számmal való szorzás erejéig határozatlan lesz.** Valóban, az operátorok komplex linearitása miatt sajátvektoraink komplex számszorosa is sajátvektor lesz. **A kvantumrendszer állapotait tehát valójában a Hilbert tér egydimenziós alterei (sugarai) adják.** Jelöljük az így értelmezett állapotok terét $\mathcal{P}$-vel. $\mathcal{P}$ pontos definícióját az alábbi módon adhatjuk meg

$$\mathcal{P} = \mathcal{H}/\!\sim, \quad \text{ahol} \quad |\psi\rangle \sim |\psi'\rangle \quad \text{ha} \quad |\psi\rangle\ = c|\psi'\rangle, c \in \mathbf{C}, \quad |\psi\rangle, |\psi'\rangle \in \mathcal{H}. \tag{5.40}$$

Másszóval a $\mathcal{H}$ **Hilbert tér mindazon vektorait azonosítjuk melyek egymás komplex számszorosai.** $\mathcal{P}$ másik szokásos neve **projektív Hilbert tér**. Nyílván $\mathcal{P}$ ugyanaz a tér mint a $\mathcal{H}$ egydimenziós altereire vetítő projekciós operátorainak tere. Legyen ugyanis $P = |\Phi\rangle\langle\Phi|$. Ekkor $P^2|\psi\rangle = \langle\Phi|\Phi\rangle P|\psi\rangle$. Ha $|\Phi\rangle$ egyre normált akkor $|\Phi\rangle$ és $e^{i\alpha}|\Phi\rangle$ ugyanazt a **normált** fizikai állapotot írják le, hiszen a $|\Phi\rangle \to e^{i\alpha}|\Phi\rangle$ transzformációra a $P = |\Phi\rangle\langle\Phi|$ érzéketlen.

* Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban legyen $M = 1$.

Tekintsük példaként a spint leíró **2 dimenziós** Hilbert teret. Ekkor $\mathcal{H} = \mathbf{C}^2$, azaz a két komplex számmal jellemezhető spinorok tere. $|\psi\rangle$ tehát a (z_1, z_2) alakba írható. Tegyük fel továbbá, hogy $z_1 \neq 0$. A $|\psi\rangle$ vektor és tetszőleges komplex számszorosa is ugyanazt az állapotot írja le $\mathcal{P}$-ben. Tehát a $c(z_1, z_2)$ alakú vektorok $\sim$-re nézve ugyanabba az ekvivalenciaosztályba esnek. Minden ekvivalenciaosztályból válasszunk **egy** reprezentánst. Legyen például $c = (z_1)^{-1}$. $\mathcal{P}$ elemeit így az $(1, w)$ alakba írhatjuk, ahol $w = (z_1)^{-1} z_2 \in \mathbf{C}$. Az állapotok terét tehát egy $w \in \mathbf{C}$ komplex számmal indexelhetjük. Ha a $z_1 = 0$ esetet is megengedjük akkor az állapotok terére a Riemann-féle gömböt ($w \in \mathbf{C} \cup \infty$) kapjuk. Ezt legegyszerűbben sztereografikus projekcióval láthatjuk be (lásd 5.1 ábra). Azt kaptuk tehát, hogy $\mathcal{P} = S^2$, míg $\mathcal{H} = \mathbf{C}^2$. Hangsúlyozzuk, hogy a fizikai állapotok tere $\mathcal{P}$ és nem pedig a $\mathcal{H}$ Hilbert tér. Ebből a példából azt is látjuk, hogy $\mathcal{P}$ geometriai szempontból sokkal érdekesebb tér mint $\mathcal{H}$.

5.1 ábra

Tekintsük most a Hilbert térnek az alábbi alakú **egydimenziós** projekciós operátorait.

$$\Lambda(t) \equiv |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|, \tag{5.41}$$

ahol $|\psi(t)\rangle$ kielégíti az $i\hbar\dot{\psi}(t) = H(t)\psi(t)$ Schrödinger egyenletet. Mialatt a vizsgált fizikai rendszerünk az időben változik, Λ egy $\mathcal{C}$ görbét ír le $\mathcal{P}$-ben

$$\mathcal{C} : t \to \Lambda(t). \tag{5.42}$$

A továbbiakban bennünket érdeklő időfejlődés **nem stacionárius**, azaz **nem** $|\psi(t)\rangle = e^{i\alpha(t)}|\psi(0)\rangle$ alakú. Az ilyen időfejlődésre ugyanis az (5.42) görbe egy ponttá degenerálódik. Irányítsuk figyelmünket ebben a fejezetben olyan időfejlődésre melyre létezik olyan $T > 0$, hogy

$$\Lambda(T) = \Lambda(0), \quad \text{amint} \quad \mathcal{C} : t \to \Lambda(t), \quad 0 \leq t \leq T. \tag{5.43}$$

Azaz, az időfejlődés során állapotunk $\mathcal{P}$-ben **egy zárt görbét ír le**. Az ilyen típusú evolúciót **ciklikus evolúció**nak nevezzük. Példánkban ahol $\mathcal{H} = \mathbf{C}^2$ volt, a ciklikus evolúció a $\mathcal{P} = S^2$ Riemann-féle gömbön egy zárt görbét határoz meg. Vegyük észre, hogy $\mathcal{H}$-ban a ciklikus evolúciót leíró $|\psi(t)\rangle$-re

$$|\psi(T)\rangle = e^{i\alpha_\psi}|\psi(0)\rangle, \tag{5.44}$$

azaz $|\psi(t)\rangle$ **általában nem zárt görbét ír le**. α_ψ egy ψ-től függő fázis (lásd 5.2 ábra).

Könnyen megmutatható, hogy az előző fejezetekben vizsgált erősen idealizált adiabatikus evolúció melynek során feltettük, hogy

$$\Lambda(t) = P_n(t) \equiv |n, \mathbf{X}(t)\rangle\langle n, \mathbf{X}(t)|, \tag{5.45}$$

nem kompatibilis a Schrödinger egyenlettel. Tudva ugyanis, hogy $P_n^2(t) = P_n(t)$ és

$$H(t)P_n(T) = P_n(t)H(t) = E_n(t)P_n(t), \quad \text{azaz} \quad [H(t), P_n(t)] = 0, \tag{5.46}$$

ennek az operátornak az időfejlődését a

$$i\hbar\dot{P} = [H, P] \equiv 0. \tag{5.47}$$

egyenlet írja le. Ebből viszont az következik, hogy $|n, \mathbf{X}(t)\rangle = e^{i\alpha(t)}$ $|n, \mathbf{X}(0)\rangle$ **minden t-re** , azaz **az állapot stacionárius**. Ez pedig nem kompatibilis az (5.45) megszorítással. (5.45) ugyanis általában egy nem degenerált görbét ír le, míg a fent bebizonyított stacionaritás csak egy ponttá degenerálódott "görbét" enged meg. Mi teszi mégis lehetővé a tétel gyakorlati alkalmazhatóságát? Az, hogy az (5.45) egyenlőséget nem egzaktul követeljük meg. Ez a kissé "pongyola" megfogalmazás azt takarja , hogy **találhatunk olyan "közel fekvő"** $|\psi(0)\rangle \neq |n, \mathbf{X}(0)\rangle$

kezdőállapotot melyre az evolúció mindvégig "közel" marad $|n, \mathbf{X}(t)\rangle\langle n, \mathbf{X}(t)|$-hez.

Feladatunk tehát a ciklikus evolúció geometriájának a tisztázása. Ehhez olyan paraméterektől függő $H(\mathbf{X}(t))$ Hamiltonit kell találnunk melyre a Schrödinger egyenlet megoldásából képezett (5.41) projektor kielégíti (5.43)-et. Tudjuk már, hogy az (5.45) adiabatikus evolúció a ciklikus evolúció degenerált esetét tudja csak megvalósítani. $\mathcal{C}$ ekkor csak egy pont. A ciklikus evolúció megvalósítására más utat kell tehát találnunk. Feltesszük ezért, hogy **létezik egy olyan** g **diffeomorfizmus** , hogy rögzített n esetén

$$\Lambda(t) = |n, g(X(t))\rangle\langle n, g(X(t))|, \tag{5.48}$$

Ez a következőt jelenti. Legyen $\mathbf{X}(t)$ egy $\mathcal{M}$ paramétertérbeli C zárt görbe. A $g : \mathcal{M} \to \mathcal{M}$ diffeomorfizmus ehhez egy $\mathbf{Y}(t)$ zárt $g(C)$ görbét rendel. (Lásd 5.2 ábra.)

Tekintsük most az

$$f^{(n)} : \mathcal{M} \to \mathcal{P}, \quad \mathbf{X} \mapsto P_n(\mathbf{X}) \tag{5.49}$$

leképezést. Az $f^{(n)} \circ g$ leképezés az $\mathcal{M}$-beli zárt C görbét a $\mathcal{P}$-beli zárt $\mathcal{C}$ görbébe viszi.

5.2 ábra

Másoljuk most $\mathcal{P}$ minden pontja fölé mindazokat a $\mathcal{H}$ beli elemeket melyek ennek a pontnak megfelelő ekvivalenciaosztályba esnek. Normált

$\mathcal{H}$-beli elemek esetén ezek épp azok az elemek melyek $e^{i\alpha}|\psi\rangle$ alakúak, azaz csak egy fázisfaktorban különböznek. Legyen Π az a természetes $\Pi : \mathcal{H} \to \mathcal{P}$ projekció, mely az "egymás fölött" elhelyezkedő $e^{i\alpha}|\psi\rangle$ alakú $\mathcal{H}$-beli vektorokat a megfelelő $\mathcal{P}$-beli pontba vetíti. Végtelen sok olyan különböző $\mathcal{H}$-beli görbe létezik (ezek között lehetnek nyíltak is zártak is) , melyeknek az "árnyéka" ugyanaz a $\mathcal{P}$-beli zárt görbe. Például az ábrán feltüntettük a ciklikus evolúciót reprezentáló (5.44) tulajdonságú nyílt görbét, melynek $\mathcal{P}$-ben a fázisfaktorral való szorzásra érzéketlen (5.43)-nek eleget tevő (5.41) kifejezés felel meg. Másrészt tudjuk azt is, hogy az (5.3)-nak eleget tevő $|n, X\rangle$-t **egyértékű**-nek választottuk, ezért $|n, g(X)\rangle$ is az. Az (5.48) feltevés tehát azt jelenti, hogy $|n, g(X)\rangle$ egy olyan $\mathcal{H}$-beli **zárt** görbe, (ábránkon ezt is feltüntettük) melynek az árnyéka **ugyanaz** a $\mathcal{P}$-beli zárt görbe. (Az adiabatikus evolúciónak megfelelő $f^{(n)}(C)$, $\mathcal{P}$-beli görbét szaggatott vonallal tüntettük fel. Amint azt már tudjuk ez a görbe **nem lehet azonos** $\mathcal{C}$-vel, jóllehet ez $\mathcal{C}$ közelében marad). Az (5.48) egyenlőséget másképp is értelmezhetjük. H -hoz található egy olyan $\tilde{H}$ melyre $\tilde{H}(X) = H(g(X))$. Ennek az új Hamilton operátornak az egyértékű sajátvektorai ciklikus állapotokat definiálnak. Persze ez a megközelítés mindaddig fából vaskarika amíg az ilyen tulajdonságú g-t meg nem találjuk. Egyáltalán nem biztos az sem, hogy g létezik az adott $H(\mathbf{X}(t))$ Hamiltonira. A következő fejezetben olyan példát fogunk tekinteni melyre az ilyen tulajdonságú g létezik. Most azonban térjünk vissza a ciklikus evolúció geometriai vonatkozásainak vizsgálatához.

Tegyük fel tehát, hogy a fent megbeszélt tulajdonságú g leképezés létezik. Ekkor az ábra alapján látható, hogy $|\psi(t)\rangle$-t az adiabatikus evolúcióra emlékeztető (5.5) alakba írhatjuk

$$|\psi(t)\rangle = c_n(t)|n, g(X(t))\rangle \tag{5.50}$$

ahol $|c_n(t)| = 1$, és $c_n(0) = 1$. Ismételten hangsúlyozzuk, hogy $|n, g(X(t))\rangle$ a $\tilde{H}(X) = H(g(X))$ Hamiltoninak a sajátfüggvénye, nem pedig a fizikai $H(X)$-nek. $H(X)$-nek és $\tilde{H}(X)$-nek nem lehet közös sajátfüggvényrendszere, hiszen adiabatikus ciklikus evolúció nincsen. (A degenerált esetet leszámítva.) Ebből következik, hogy $[H(X), \tilde{H}(X)] \neq 0$.

Mivel (5.50) formailag ugyanolyan alakú mint (5.5), a Schrödinger egyenletet felhasználva és (5.50)-et balról $\langle n, g(X(t))|$ -vel megszorozva az (5.6) egyenlethez hasonló

$$i\hbar\left(\frac{d}{dt}(\log c(t)) + \langle n, g(t)|\frac{d}{dt}|n, g(t)\rangle\right) = \langle n, g(t)|H(t)|n, g(t)\rangle \qquad (5.51)$$

egyenletet kapjuk. Figyeljük meg azonban, hogy $[H(X), \tilde{H}(X)] \neq 0$ miatt az egyenlet jobboldalán **nem** a megfelelő energiasajátérték áll.

Ismét megpróbálkozhatunk $c(t)$-nek a $c(t) = a(t)b(t)$ alakba történő szeparálásával. A végeredmény

$$|\psi(T)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^T \langle n,g(t)|H(t)|n,g(t)\rangle dt} e^{-\int_0^T \langle n,g(t)|\frac{d}{dt}|n,g(t)\rangle dt}|n(0)\rangle. \qquad (5.52)$$

Vizsgáljuk meg a kapott eredmény fizikai jelentését! Vezessük be először a

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t \langle n,g(X(t'))|H(X(t'))|n,g(X(t'))\rangle dt'}|\psi(t)\rangle \qquad (5.53)$$

vektort (lásd 5.2 ábra). Ez a vektor lényegében a $|\psi(t)\rangle$ vektornak az a része mely **nem** tartalmazza a dinamikai fázisfaktort. Könnyen megmutathatjuk, hogy

$$\langle\tilde{\psi}|d\tilde{\psi}\rangle = \langle\psi|d\tilde{\psi}\rangle = 0, \qquad (5.54)$$

azaz $|\tilde{\psi}\rangle$ úgy változik az időben, hogy a megváltozása mindig ortogonális marad $\mathcal{H}$-ban $|\psi\rangle$-re. Ez a tulajdonság emlékeztet az előző fejezetben megtárgyalt vektorok görbült terekben történő párhuzamos eltolására. (5.54) valóban a $|\psi(0)\rangle$ Hilbert térbeli vektornak a $\mathcal{P}$-ben lévő zárt $\mathcal{C}$ görbe mentén történő párhuzamos eltolását fejezi ki. Ezt az állítást az alábbiakban a vektorok gömb (S^2) felületén történő párhuzamos eltolásának vizsgálatával illusztráljuk.

Legyen $\mathbf{r}$ a gömb egy tetszőleges pontjába mutató egységvektor ($\mathbf{rr} = 1$). Tekintsünk egy erre merőleges $\mathbf{e}$ egységvektort ($\mathbf{er} = 0$, $\mathbf{ee} = 1$.) Tekintsünk továbbá a gömbön egy $\mathcal{C}$ zárt görbét. Ezt az $\mathbf{r}(t)$ módon parametrizálhatjuk. Kérdésünk: hogyan definiálhatjuk $\mathbf{e}(t)$ párhuzamos eltolását? Definíciónk legyen az alábbi: **megköveteljük, hogy e az eltolás során lokálisan nem fordulhat el r körül.** Ennek a feltételnek a precíz megfogalmazásához tekintsük az ω pillanatnyi forgástengely irányába mutató szögsebesség vektort. Ezt kifejthetjük az

$\omega = a\mathbf{r} + b\dot{\mathbf{r}} + c\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}$, módon. Mivel $\mathbf{e}$ nem fordulhat el $\mathbf{r}$ körül ezért $a = 0$. Továbbá $\dot{\mathbf{e}} = \omega \times \mathbf{e}$, ezért

$$\dot{\mathbf{e}} = b\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{e} + c(\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) \times \mathbf{e} = b\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{e} - c(\mathbf{e}\dot{\mathbf{r}})\mathbf{r}, \tag{5.55}$$

ahol kihasználtuk a hármas vektoriális szorzat kifejtését és az $\mathbf{er} = 0$ feltételt. Az $\mathbf{er} = 0$ további felhasználásával megmutatható, hogy $\dot{\mathbf{r}} = \omega \times \mathbf{r}$, ezért $c = 1$, és $b = 0$, így $\omega = \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}$. Ezt $\dot{\mathbf{e}} = \omega \times \mathbf{e}$-be helyettesítve kapjuk a párhuzamos eltolás feltételét: $\dot{\mathbf{e}} = -(\mathbf{e}\dot{\mathbf{r}})\mathbf{r}$. Ezt az $\mathbf{er} = 0$ feltétel deriválásával kapott $\mathbf{r}\dot{\mathbf{e}} = -\mathbf{e}\dot{\mathbf{r}}$ feltétel felhasználásával az

$$(I - \mathbf{r} \circ \mathbf{r})\dot{\mathbf{e}} = 0, \tag{5.56}$$

alakba írhatjuk, ahol $\mathbf{r} \circ \mathbf{r}$ két vektor diadikus szorzatát jelöli. A $\Lambda \equiv I - \mathbf{r} \circ \mathbf{r}$ 3×3-as mátrix kielégíti a $\Lambda^2 = \Lambda$ feltételt. Λ nem más mint a mindenkori $\mathbf{r}$ vektorra merőleges kétdimenziós altérre vetítő mátrix. Ez a kétdimenziós altér épp a gömb megfelelő pontbeli érintőtere. (5.56) tehát azt mondja: az $\mathbf{e}$ akkor parallel transzlált, ha lokális megváltozásának érintőtér irányú vetülete zérus, azaz $\Lambda d\mathbf{e} = 0$. Ha (5.54)-et a $\Lambda \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$ bevezetésével a $\Lambda d|\tilde{\psi}\rangle = 0$ alakba írjuk akkor a fentiekkel való analógia nyílvánvaló.

Vizsgáljuk most meg az (5.52)-ben szereplő geometriai fázisfaktort. Ezt az (5.11)-hez hasonló

$$e^{i \oint_C \tilde{\mathbf{A}}^{(\mathbf{n})}(\mathbf{X})d\mathbf{X}} \tag{5.57}$$

alakba írhatjuk, ahol $\tilde{A}^{(n)}_\mu(X) = i\langle\tilde{n}, X|\partial_\mu|\tilde{n}, X\rangle$, és az $|\tilde{n}, X\rangle \equiv |n, Y(X)\rangle$ vektorok a $\tilde{H}(X) = H(Y(X))$ operátor sajátvektorai. Itt bevezettük a g-t reprezentáló Y^μ lokális koordinátákat melyek megadása a megszokott X^ν koordinátákkal kapcsolatos $Y^\mu \equiv Y^\mu(X^\nu)$ sima függvények megadásával ekvivalens ($Y = g(X)$).

Látható továbbá, hogy (5.57) nem függ attól hogy milyen sebességgel járjuk körül a C $\mathcal{M}$-beli görbénket. Természetesen ismét bevezethetjük az (5.19)-nek megfelelő **Aharonov-Anandan-féle görbületi kétformát**. Ennek segítségével az **Aharonov-Anandan (AA) fázis** az alábbi alakot ölti

$$\gamma_{AA}{}^{(n)}(C) = \int_S \tilde{F}^{(n)}, \tag{5.59}$$

Azonban még további igen fontos "felfedezéseket" tehetünk. (5.54) alapján láthatjuk, hogy a párhuzamos eltolás szabályát a **paramétertér megemlítése nélkül is** tudjuk definiálni. Valóban, az (5.54)-ben szereplő **d** operációt fogjuk fel csak annak, hogy a $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ Hilbert tér-beli vektort infinitezimális módon megváltoztatjuk. Ez természetesen történhet úgy is mint eddig, hogy a ψ "hasában" lévő külső paramétereket változtatjuk. Előfordulhat az is, hogy ψ megváltozását valahogyan máshogy biztosítjuk. Ez történhet például úgy is, hogy a kvantumrendszerünket valamilyen mérőapparátussal hozzuk kapcsolatba. Itt most azonban elégedjünk meg azzal, hogy $|\psi\rangle$ megváltozását nem csak egy paraméterektől függő unitér evoluciót biztosító Hamiltonival tudjuk jellemezni. Ami bennünket érdekel most az az, hogy amennyiben a nemtriviális geometriával rendelkező $\mathcal{P}$ állapotok terén egy zárt $\mathcal{C}$ görbét tudunk definiálni, az (5.54) szabály felhasználásával módunk van arra, hogy értelmezzük a $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektor $\mathcal{C}$ mentén történő párhuzamos eltolását. Az (5.54) szabály nem integrálható: lokálisan ugyan teljesíthető, globálisan azonban nem. (A gömbön például az (5.56) szabállyal lokálisan tudjuk biztosítani azt, hogy az **e** vektor ne forduljon el a gömb pillanatnyi normálisa körül, globálisan azonban nem. Ennek illusztrálására tekinthetjük az 5.3 ábrán látható zárt görbét, melyre **e** 90 fokot fordul el, annak ellenére, hogy azt lokálisan mindvégig párhuzamosan transzláltunk.)

5.3 ábra

Úgy tűnik tehát, hogy lehetőségünk van olyan **nemintegrálható fázisfaktorok** bevezetésére melyek $\mathcal{P}$ nemtriviális geometriáját tükrözik. Ezeket a fázisfaktorokat az $\mathcal{M}$ paramétertér megemlítése nélkül is be tudjuk vezetni. A továbbiakban ezeket a legáltalánosabb fázisfaktorokat **geometriai fázisfaktoroknak** fogjuk nevezni.

$\mathcal{P}$ egy megszámlálhatóan végtelen dimenziós sokaság. (A spin esetében véges dimenziós sokaság.) Bevezethetünk tehát megszámlálható lokális koordinátát: $x^{\hat{\mu}}, \quad \hat{\mu} = 1.2, \ldots \infty$. Formálisan definiálhatjuk a

$$\mathcal{A} \equiv i\langle\psi|d|\psi\rangle = i\langle\psi(x)|\partial_{\hat{\mu}}|\psi(x)\rangle dx^{\hat{\mu}}, \quad \hat{\mu} = 1, 2, \ldots \infty \tag{5.60}$$

differenciálformát, ahol a végtelen szumma konvergenciáját a Hilbert tér jól ismert tulajdonságai biztosítják. Ebben a képben az (5.54) szabály azt mondja, hogy **lokálisan** mindig található olyan $|\psi\rangle \to |\psi\rangle e^{i\alpha}$ $U(1)$ mértéktranszformáció, melynek segítségével $\mathcal{A} = 0$. Az $\mathcal{A} = 0$ feltételt azonban globálisan nem tudjuk teljesíteni mindaddig amíg $\mathcal{F} = d\mathcal{A} \neq 0$. $\mathcal{F}$-ről pedig belátható, hogy általában nem zérus.

Térjünk most vissza az Aharonov-Anandan fázishoz mely a fent bevezetett geometriai fázisfaktorok speciális esete. Nyílván az Aharonov-Anandan egy-forma $\tilde{A}^{(n)}$ is valamilyen értelemben speciális esete a teljesen általános $\mathcal{A}$ egy-formának. Az előbbi az $\mathcal{M}$ paramétertéren, az utóbbi a $\mathcal{P}$ projektív Hilbert téren él. Mi a két mennyiség kapcsolata? Az 5.4 ábra alapján láthatjuk, hogy $f^{(n)} \circ g$ egy leképezést definiál $\mathcal{M}$-ből $\mathcal{P}$-be. Lokális koordinátákkal $f^{(n)}$ megadása az $x^{\hat{\mu}}(X)$ megszámlálhatóan végtelen darab síma függvény megadását jelenti. Legyen most $\tilde{f}^{(n)} \equiv f^{(n)} \circ g$. Könnyen beláthatjuk (lásd 5.4 ábra), hogy

$$\tilde{A}^{(n)} = \tilde{f}^{(n)\star}\mathcal{A} = \mathcal{A}_{\hat{\mu}}(x(X))\frac{\partial x^{\hat{\mu}}}{\partial X^{\mu}}dX^{\mu}, \quad \hat{\mu} = 1, \ldots \infty, \mu = 1 \ldots \dim\mathcal{M}. \tag{5.61}$$

5.4 ábra

A fentiekben definiált $\tilde{f}^{(n)\star}$ leképezés jelentése nyilvánvaló. Legyen X lokális koordináta $\mathcal{U} \subset \mathcal{M}$-en, és x lokális koordináta $\tilde{f}^{(n)}(\mathcal{U}) \subset \mathcal{P}$-n. Ha $\tilde{f}^{(n)}$ az $\mathcal{U}$-t $\tilde{f}^{(n)}(\mathcal{U})$-ba képezi, akkor $\tilde{f}^{(n)\star}$ az $\tilde{f}^{(n)}(\mathcal{U})$-beli $\mathcal{A}$ **egy-formát "visszahúzza"** az $\mathcal{U}$-beli $\tilde{f}^{(n)\star}\mathcal{A}$ **egy-formába**. $f^{(n)^\star}\mathcal{A}$ az $\mathcal{A}$ "visszahúzottja" (angolul pull-back-je). Ennek alapján az Aharonov-Anandan fázist kétféleképpen is kiszámíthatjuk. Vagy $\mathcal{A}$-nak a $\mathcal{P}$-beli $\tilde{f}^{(n)}(C)$, vagy pedig $\tilde{A}^{(n)}$-nek az $\mathcal{M}$-beli C görbére vett vonalintegráljaként,

$$\gamma_{AA}{}^{(n)}(C) = \oint_C \tilde{A}^{(n)} = \oint_C \tilde{f}^{(n)\star}\mathcal{A} = \oint_{\tilde{f}^{(n)}(C)} \mathcal{A}. \tag{5.62}$$

Teljesen hasonlóan értelmezhetjük a Berry-fázist is. Ekkor $\mathcal{A}$-t az $f^{(n)}$ leképezés segítségével húzzuk vissza

$$\gamma_B{}^{(n)}(C) = \oint_C A^{(n)} = \oint_C f^{(n)\star}\mathcal{A} = \oint_{f^{(n)}(C)} \mathcal{A}, \tag{5.63}$$

ahol $A^{(n)}$-t a szokásos (5.10) és (5.15) formulák definiálják.

Ezzel megmutattuk, hogy az alpvető geometriai struktúrát a $(\mathcal{H}, \Pi, \mathcal{P})$ hármas határozza meg. Ezen megadható egy szabály mely megmondja, hogyan kell a $\mathcal{H}$-beli vektorokat a $\mathcal{P}$-beli görbék mentén párhuzamosan eltolni. Ez a szabály egy kapcsolatot (idegen szóval **konnexiót**) ad meg a különböző $\mathcal{P}$-beli állapotokat reprezentáló hullámfüggvények fázisa között. Az $\mathcal{A}$ egy-forma differenciálgeometriai elnevezése **univerzális konnexió-forma**. A $\mathcal{A}$ konnexióformán keresztül a kvantálás geometriai vonatkozásairól szerezhetünk ismereteket. **Az Aharonov-Anandan és Berry-féle egy-formák tehát az univerzális konnexióforma $\tilde{f}^{(n)}$ illetve $f^{(n)}$ leképezések általi "visszahúzottjai".**

5.5. SPIN MÁGNESES TÉRBEN. CIKLIKUS EVOLÚCIÓ.

Tekintsük a már jól ismert (5.33) Hamiltonit. Legyen C az alábbi $\mathcal{M} = S^2$ beli zárt görbe.

$$C : [0, T] \to S^2, \quad t \mapsto \mathbf{X}(t) = (\sin\theta\cos(\varphi + \omega t), \sin\theta\sin(\varphi + \omega t), \cos\theta). \tag{5.64}$$

Itt $\theta(t) = \theta$ és $\varphi(t) = \varphi + \omega t$ az időben változó gömbi polárkoordináták, θ és φ a görbe kezdőpontjának koordinátái. C tehát a gömb egyik szélességi körének felel meg. Az $\mathbf{X}(t)$ paraméterek időbeli változására most nem teszünk semmiféle megszorítást. Az $i\hbar\partial_t\psi(t) = H(t)\psi(t)$ időtől függő Schrödinger egyenlet ebben az esetben egzaktul megoldható. A trükk az alábbi. A (5.64) görbét nyílván generálhatjuk a z-tengely körüli ωt szögű elforgatással. Ezt a forgáscsoport S_3 operátora generálja. Az

$$e^{A}Be^{-A} = B + [A,B] + \frac{1}{2}[A,[A,B]] + \frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \dots \qquad (5.65)$$

összefüggés és a $[S_k, S_l] = i\hbar\epsilon_{klm}S_m$ kommutációs relációk felhasználásával belátható, hogy $H(t)$ az alábbi alakba írható

$$H(t) = U^{\dagger}(t)H_0U(t), \quad \text{ahol} \quad U(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\omega t S_3} \qquad (5.66a)$$

és

$$H_0 = \omega_0(\sin\theta\cos\varphi S_1 + \sin\theta\sin\varphi S_2 + \cos\theta S_3) \equiv \omega_0 \mathbf{e}\mathbf{S}. \qquad (5.66b)$$

Itt H_0 már időfüggetlen. Következő lépésként írjuk ψ-t a $\psi = U^{\dagger}\psi'$ alakba. Ekkor a Schrödinger egyenlet alapján

$$i\hbar\partial_t|\psi'\rangle = (UHU^{\dagger} - i\hbar U\partial_t U^{\dagger})|\psi'\rangle \equiv {H_0}'|\psi'\rangle. \qquad (5.67)$$

Könnyen megmutatható, hogy

$${H_0}' = H_0 - \omega S_3 = \omega_0[\sin\theta\cos\varphi S_1 + \sin\theta\sin\varphi S_2 + (\cos\theta - \omega/\omega_0)S_3] = \Omega\tilde{\mathbf{e}}\mathbf{S}, \qquad (5.68)$$

ahol

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{e}} &= \sin\tilde{\theta}\cos\tilde{\varphi}\mathbf{e}_1 + \sin\tilde{\theta}\sin\tilde{\varphi}\mathbf{e}_2 + \cos\tilde{\theta}\mathbf{e}_3, \\ \Omega &= \omega_0\sqrt{1 + \frac{\omega}{\omega_0}\left(\frac{\omega}{\omega_0} - 2\cos\theta\right)} \end{aligned}, \qquad (5.69a)$$

$$\cos\tilde{\theta} = \frac{\omega_0}{\Omega}(\cos\theta - \frac{\omega}{\omega_0}), \quad \sin\tilde{\theta} = \frac{\omega_0}{\Omega}\sin\theta, \quad \tilde{\varphi} = \varphi. \qquad (5.69b)$$

${H_0}'$ időfüggetlen, ezért (5.67) integrálható

$$|\psi'(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}t{H_0}'}|\psi'(0)\rangle, \qquad (5.70)$$

a teljes megoldás tehát

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}t\omega S_3}e^{-\frac{i}{\hbar}t{H_0}'}|\psi(0)\rangle. \qquad (5.71)$$

A következő lépésként megmutatjuk, hogy $|\psi(0)\rangle$ ciklikus ha ez az (5.68)-beli $H_0{}'$ Hamiltoni sajátvektora. Legyen $T\omega = 2\pi$. Ekkor

$$|\psi(T)\rangle = e^{-2\pi\frac{i}{\hbar}S_3}e^{-\frac{i}{\hbar}TH_0{}'}|\psi(0)\rangle. \tag{5.72}$$

A bennünket érdeklő $|\psi(0)\rangle$ ciklikus állapotok kielégítik (5.44)-öt (s így (5.43)-et is). Tehát

$$e^{-2\pi\frac{i}{\hbar}S_3}e^{-\frac{i}{\hbar}TH_0{}'}|\psi(0)\rangle \equiv \mathbf{U}(T)|\psi(0)\rangle = e^{i\alpha_\psi}|\psi(0)\rangle. \tag{5.73}$$

Megmutatjuk, hogy $[\mathbf{U}(T), H_0{}'] = 0$, ezért a ciklikus állapotok egyúttal $H_0{}'$ sajátvektorai is ahogyan azt beharangoztuk. Lássuk tehát a bizonyítást!

$$\begin{aligned}\mathbf{U}(T)H_0{}'\mathbf{U}^\dagger(T) = \omega_0 \sin\theta U^\dagger(T)(\cos\varphi S_1 + \sin\varphi S_2)U(T) \\ + \omega_0(\cos\theta - \omega/\omega_0)S_3,\end{aligned} \tag{5.74}$$

ahol $U(T)$-t (5.66)-ben definiáltuk. Ne keverjük ezt össze $\mathbf{U}(T)$-vel ami az "időfejlesztő" operátor. (5.65) segítségével megmutathatjuk, hogy $U^\dagger(T)S_1U(T) = \cos(\varphi+2\pi)S_1+\sin(\varphi+2\pi)S_2$, így $\mathbf{U}^\dagger(T)H_0{}'\mathbf{U}(T) = H_0{}'$. Ezt kellett bizonyítani. Fontos észbentartanunk azt is, hogy $[H_0{}', H_0] \neq 0$, tehát az adiabatikus evolúcóval ellentétben a $|\psi(0)\rangle$ ciklikus vektor **nem** energiasajátvektor.

Most pedig definiáljuk az előző fejezetben bevezetett g leképezést az alábbi módon.

$$g : S^2 \to S^2, \quad g : (\theta, \varphi) \mapsto (\tilde{\theta}, \tilde{\varphi}). \tag{5.75}$$

Vezessük be az $s = \frac{\omega}{\omega_0}$ mennyiséget, és az $u \equiv \cos\theta$, $\tilde{u} = \cos\tilde{\theta}$ koordinátatranszformációt. Ekkor az $X \in S^2$ pont koordinátái: (u, φ). Az s mutatja meg, hogy a mágneses tér z tengely körüli precessziójának ω frekvenciája, hogyan aránylik a Larmor frekvenciához. s különböző értékeihez, különböző $g_s : S^2 \to S^2, \quad \forall s \in \mathbf{R}_0^+,$ leképezéseket kapunk. Az (u, φ) koordinátákban a g_s leképezés alakja

$$g_s : (u, \varphi) \mapsto (\frac{u - s}{\sqrt{s^2 - 2us + 1}}, \varphi). \tag{5.76}$$

Könnyű belátni, hogy g_s egy síma függvény $\forall(s, X) \in \mathbf{R}_0^+ \times S^2$-re, kivéve az $(s, X) = (1, 1)$ pontot. Ekkor g_1 az északi sarkpontot az Egyenlítőbe képezi (a $\theta = 0$ azaz $u = 1$ pontban φ határozatlan), ezért g_1 nem egyértékű. Megmutatható az is, hogy g_s $0 \leq s < 1$ esetén folytonos függvénye u-nak és s-nek is. Ebben az esetben g_s diffeomorfizmus. Mivel az $s = 0$ eset az identitás leképezésnek felel meg, ezért ekkor az $f^{(n)}$ és az $\tilde{f}^{(n)}$ leképezések folytonosan egymásbadeformálhatók. A homotópia előzőekből ismert fogalmát felidézve tehát azt mondhatjuk, hogy

$$f^{(n)} \sim \tilde{f}^{(n)}, \quad \text{ha} \quad , 0 \leq s < 1. \tag{5.77}$$

Szorítkozzunk a továbbiakban a (6.76)-ben definiált g_s leképezésekre, ekkor ugyanis az $s \to 0$ esetén folytonosan éppen az adiabatikus limeszt kaphatjuk vissza. Definiáljuk a $\tilde{H}(X)$ operátort az alábbi módon.

$$\tilde{H}(X) = \frac{\omega_0}{\Omega} {H_0}'(X). \tag{5.78}$$

Ekkor $\tilde{H}(\theta, \varphi) = H(g(\theta, \varphi) = H(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi})$. Nyílván $\tilde{H}$-nak és ${H_0}'(X)$-nek ugyanazok a sajátvektorai, tehát $\tilde{H}$ sajátvektorai is ciklikus vektorok. Ezzel megmutattuk, hogy a példánkul szolgáló rendszerhez g megkonstruálható.

Hátra van még az Aharonov-Anandan fázis kiszámítása. Legyen $|\psi(0)\rangle = |\tilde{n}(0)\rangle = |n, \tilde{\theta}, \tilde{\varphi}\rangle$. Ekkor (6.71) alapján belátható, hogy

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\Omega n t} |\tilde{n}(t)\rangle \tag{5.79}$$

.

ahol $|\tilde{n}(t)\rangle = |n, g(t)\rangle = |n, \tilde{\theta}(t), \tilde{\varphi}(t))\rangle$, és $\tilde{\theta}(t) = \tilde{\theta}, \tilde{\varphi}(t) = \tilde{\varphi} + \omega t$.

Az (5.68) és a (5.69b) kifejezésekből láthatjuk, hogy $\tilde{H}$ éppen a (5.33) Hamiltoni, egységnyi abszolútértékű mágneses térben, ahol most a mágneses tér irányát $\tilde{\theta}$ és $\tilde{\varphi}$ paraméterezi. Az Aharonov-Anandan kétforma tehát továbbra is a szokásos (5.38) alakú, a fontos különbség az, hogy X helyett $g(X)$-et kell használnunk:

$$\tilde{F}^{(n)} = \tilde{\mathbf{B}}^{(n)} d\tilde{\mathbf{S}} = -n\tilde{\mathbf{e}} d\tilde{\mathbf{S}} = -n \sin\tilde{\theta} d\tilde{\theta} \wedge d\varphi, \tag{5.80}$$

hiszen $\tilde{\varphi} = \varphi$. Ezt kifejezhetjük az eredeti (θ, φ) koordinátákkal is

$$\tilde{F}^{(n)} = -n\left(\frac{\omega_0}{\Omega}\right)^3 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0}\cos\theta\right) d\theta \wedge d\varphi. \tag{5.81}$$

Az Aharonov-Anandan fázis tehát

$$\gamma_{AA}{}^{(n)} = \int_S \tilde{F}^{(n)}, \tag{5.82}$$

ahol S a C görbét (mely éppen egy szélességi kör volt) határoló felület. Felmerül azonban a kérdés: melyik felület? C-t ugyanis az 5.5 ábrán látható S és S' felület is határolja.

5.5 ábra

Az $e^{i\gamma_{AA}^{(n)}}$ fázisfaktor nyílván nem függhet S választásától. Ez azt jelenti, hogy

$$e^{i\int_S \tilde{F}^{(n)}} = e^{i(\int_{S'} \tilde{F}^{(n)} + 2\pi Q)}, \quad Q \in \mathbf{Z}, \tag{5.83}$$

azaz

$$Q = \frac{1}{2\pi}\int_{S^2} \tilde{F}^{(n)} \in \mathbf{Z}. \tag{5.84}$$

Azaz: $\tilde{F}^{(n)}$-nek a teljes paramétertér szerinti integrálja 2π-vel lenormálva egész szám kell hogy legyen. Mutassuk meg, hogy ez tényleg így van! Ehhez $\tilde{F}^{(n)}$ (5.81) kifejezését az $u = \cos\theta$ ($\tilde{u} = \cos\tilde{\theta}$) koordinátákkal írjuk fel.

$$Q = \frac{1}{2\pi}\int_{S^2} \tilde{F}^{(n)} = -\frac{1}{2\pi} n \int_{S^2} d\tilde{u} \wedge \tilde{\varphi} = -n\int_{-1}^{1} \frac{1-su}{(1-2su+s^2)^{\frac{3}{2}}} du = -2n. \tag{5.85}$$

Mivel n a részecske spinjének a z tengelyre vett vetülete ezért Q egész szám ahogy annak lennie is kell. Figyeljük meg, hogy a (5.85)-ben szereplő integrál nem függ a folytonosan változó s paraméter értékétől. Speciálisan választhatjuk s-et zérusnak, ekkor g az identitás leképezés, a megfelelő fázis a Berry-fázis, de a Q továbbra is $-2n$ marad. Mindaddig amig $0 \leq s < 1$, Q értéke tehát változatlan.

Vezessük be az $F_\xi^{(n)} : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{P}$ leképezések egyparaméteres családját úgy, hogy

$$F_0^{(n)} = f^{(n)}, \quad F_s^{(n)} = \tilde{f}^{(n)}, \quad 0 \leq \xi < 1. \tag{5.86}$$

Most $\mathcal{M} = S^2$ és $\mathcal{P} = S^2$. $F_\xi^{(n)}$ tehét a kétdimenziós gömbfelületek közötti leképezések folytonosan egymásbadeformálható családja. Azt kaptuk, hogy a Berry fázissal kapcsolatos $f^{(n)}$, és az Aharonov-Anandan fázissal kapcsolatos $\tilde{f}^{(n)}$ leképezések **homotópak**. A **folytonos deformációkra érzéketlen** Q tehát az $F : S^2 \to S^2$ leképezést jellemző **topológikus invariáns**.

Mi történik ha most (6.77)-vel ellentétben $1 < s \leq \infty$? Vezessük be a $q = 1/s$ mennyiséget. Ekkor

$$Q = \frac{1}{2\pi}\int_{S^2} \tilde{F}^{(n)} = -n\int_{-1}^{1} \frac{q^3 - q^2 u}{(1 - 2qu + q^2)^{3/2}} du = 0, \tag{5.87}$$

amint azt az integrálok explicit kiszámolásával ellenőrizhetjük. Amint azt beláthatjuk $q = 0$ esetén g_∞ a gömb minden pontját a déli pólusba képezi. Ekkor a megfelelő $F_\infty^{(n)}$ leképezés a paramétertér minden pontját a projektiv Hilbert tér **egy** pontjába fogja leképezni. Minden egyéb $F_\xi^{(n)}$, $1 < \xi \leq \infty$ leképezés homotóp ezzel a leképezéssel. Ezt tükrözi a $Q = 0$ eredményünk is.

(5.62) és (5.63) alapján már tudjuk, hogy az Aharonov-Anandan és a Berry-féle fázisfaktorok $\mathcal{H}$ egydimenziós sajátaltereinek $\mathcal{M}$ feletti elhelyezkedésével kapcsolatosak. Ekkor az ábra alapján az $f^{(n)}$ és $\tilde{f}^{(n)}$ leképezések segítségével minden $\mathcal{M}$-beli pont "fölé" is odamásolhatjuk a Hilbert tér fázisfaktorokban különböző elemeit (sugarait).

5.6. ábra

Az így kapott $\mathcal{E}$ és $\tilde{\mathcal{E}}$ sokaságok lokálisan az $\mathcal{M}$ és az egydimenziós sugarak direkt szorzatára hasonlítanak. Globálisan azonban általában nem hiszen a sugarak nemtriviális módon elfordulhatnak $\mathcal{H}$-ban ahogyan $\mathcal{M}$ pontjait változtatjuk. Az algebrai geometria egy fontos tétele szerint $\mathcal{E}$ és $\tilde{\mathcal{E}}$ topológiája akkor és csak akkor ugyanaz, ha az $f^{(n)}$ és $\tilde{f}^{(n)}$ leképezések homotópak. Ekkor $\mathcal{E}$ és $\tilde{\mathcal{E}}$ topológiai szerkezete azonos lesz. Nemtriviális Berry-fázis esetén az Aharonov-Anandan fázis sem lesz triviális és viszont. $s > 1$ esetén azonban láttuk, hogy $\tilde{\mathcal{E}}$ topológiája különbözni fog $\mathcal{E}$ topológiájától, hiszen a megfelelő $S^2 \to S^2$ leképezések nem homotópak. Ekkor megmutatható, hogy $\tilde{\mathcal{E}}$ nemcsak lokálisan hanem globálisan is direkt szorzata lesz S^2-nek és az egydimenziós sugarak terének. Azt mondjuk ilyenkor $\tilde{\mathcal{E}}$ **triviális**. Az Aharonov-Anandan fázis ebben az esetben kitranszformálható. Ekkor ugyanis lehetőségünk van arra, hogy a $|\tilde{n}, X\rangle$ vektorainkat S^2 felett **globálisan** értelmezzük. A $Q = 0$ feltétel tehát azt jelöli, hogy ekkor az $\tilde{A}^{(n)}$ egyformát egy alkalmas mértéktranszformációval a paramétertér minden pontjában kitranszformálhatjuk.

Összefoglalva tehát azt mondhatjuk, hogy **nemtriviális Berry, vagy Aharonov-Anandan fázist csak akkor kaphatunk, ha a megfelelő spektrális projektorok által definiált** $f^{(n)}$ és $\tilde{f}^{(n)} : \mathcal{M} \to \mathcal{P}$ **leképezések nemtriviális homotópiaosztályba tartoznak**. Ez azt jelenti, hogy a Hamiltoniban szereplő egyéb paraméterek folytonos változtatásával **nem érhető el az , hogy ezek a triviális (konstans) leképezésbe deformálódjanak.** Az itt bemutatott esetben az Aharonov-Anandan fázis felléptét kísérletileg is igazolták [5].

5.5. REFERENCIÁK A 4. FEJEZETHEZ

[1] A. Messiah, *Quantum Mechanics* North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1961)

[2] M. V. Berry, Peoc. R. Soc. London Ser. **A392**, 45 (1984).

[3] H. Flanders, *Differential Forms with Applications to the Physical Sciences* Academic Press New York-London (1963).

[4] R. Tycko, Phys. Rev. Lett. **58** 2281 (1987).

[5] D. Suter, K. T. Mueller and A. Pines, Phys. Rev. Lett. **60** 1218 (1988).

6. DINAMIKAI SZIMMETRIÁK.

Kvantummechanikai
tanulmányainkból tudjuk, hogy ha egy kvantumrendszer meghatározott szimmetriatulajdonságokkal rendelkezik, akkor ez a szimmetria a rendszer állapotainak degeneráltságában nyílvánul meg. Például, forgásszimmetrikus rendszerek az impulzusmomentum egy meghatározott komponensének a sajátértékei (általában J_z) szerint degeneráltak. (Kivételt képez a $\mathbf{J} = 0$ eset.) A továbbiakban mindazokat a szimmetriákat melyek eredetüket tekintve geometriaiak *geometriai szimmetriáknak* fogjuk nevezni. Ilyenek például az eltolások, forgatások, tükrözések. Ebben a fejezetben a figyelmünket a szimmetriák olyan formáira fogjuk irányítani melyek nem geometriai eredetüek, hanem az erőtörvény vagy a Schrödinger egyenlet konkrét alakjával kapcsolatosak. Ezeket a szimmetriákat *dinamikai szimmetriák*nak fogjuk nevezni. Példaként a hidrogénatom dinamikai szimmetriacsoportjának mibenlétét fogjuk tisztázni. Megmutatjuk, hogy kötöttállapotok esetén ez a négydimenziós forgáscsoport ($SO(4)$), mig szórásállapotok esetén izomorf a (valódi) Lorentz-csoporttal ($SO(3,1)$). Ezután tisztán csoportelméleti megfontolások segítségével leszármaztatjuk a hidrogénatom jólismert spektrumát, magyarázatot adunk az állapotok n^2 szeres degeneráltságára (a spintől most eltekintünk). Ugyancsak a csoportelmélet alkalmazásával meghatározzuk a Coulomb szórás S-mátrixát. Befejezésül az $SO(2,1)$ csoport példáján keresztül vázoljuk az un. *algebrai szóráselmélet* alapgondolatait.

6.1. A HIDROGÉNATOM DINAMIKAI SZIMMETRIACSOPORTJA

6.1.1 A Runge-Lenz vektor

A hidrogénatom $E_n = \frac{m(ke^2)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$ energiasajátértékei ($U(r) = ke^2/r$), mint tudjuk, kizárólag az n főkvantumszámtól függenek ($n = 1, 2, \ldots$). A probléma forgásszimmetriája miatt $[L^2, H] = [L_z, H] = 0$ így azt várjuk, hogy az energia független az m mágneses kvantumszámtól és az állapotok $2l + 1$ szeresen degeneráltak (l a mellékkvantumszám).

Jóllehet az energiaértékek tényleg nem függenek m-től, azonban a degenerancia nem $2l+1$ hanem $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$-szeres. Erre a meglepő extra degeneranciára szeretnénk magyarázatot találni. A problémára már 1926-ban Pauli [1] majd később Fock [2] és Bargmann [3] is felfigyeltek. Ötletük az volt, hogy a hidrogénatomot leíró Schrödinger egyenletnek kell, hogy legyen egy olyan G szimmetriacsoporttal jellemzett szimmetriája mely tartalmazza a szokásos forgáscsoportot.

Klasszikus mechanikából megtanultuk, hogy a Kepler probléma $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} - \frac{\alpha}{r}$ Hamilton függvénye nem függ az időtől, ezért a teljes energia E mozgásállandó. A probléma forgásszimmetriájából következően az impulzusmomentum is megmarad, és a pálya egy rögzített síkban fekszik. Az impulzusmomentum vektor $\mathbf{L}$ egy az erre a síkra merőleges axiálvektor. A klasszikus probléma kötöttállapoti megoldásai ellipszisek. Mindezek a megmaradási törvények azonban még nem garantálják, hogy a síkban fekvő pálya még zárt is legyen. Egy kicsi eltérés a potenciál $U(r) = -\frac{\alpha}{r}$ szokásos alakjától már azt vonná maga után, hogy az ellipszis nagytengelye lassan elfordul s így a pálya már nem lesz zárt. Ennek alapján azt várjuk, hogy $\mathcal{H}$-n és $\mathbf{L}$-en kívül létezik egy olyan mennyiség mely az $U(r) = -\frac{\alpha}{r}$ potenciálra mozgásállandó. Ez a mozgásállandó fogja rögzíteni az ellipszis nagytengelyének irányát.

A keresett mennyiséget a fizikusok régóta ismerik ez pedig a *Runge-Lenz vektor*

$$\mathbf{K} = \frac{1}{m}\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \alpha\frac{\mathbf{r}}{r}. \tag{6.1}$$

Felhasználva a $\dot{\mathbf{p}} = -\alpha\mathbf{r}/r^3$ ($\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}}$) Newton egyenletet, és a $\dot{\mathbf{p}} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{p})$ hármas vektoriális szorzat kifejtését könnyen megmutathatjuk, hogy $\dot{\mathbf{K}} = \mathbf{0}$, tehát $\mathbf{K}$ tényleg mozgásállandó. ($\dot{\mathbf{L}} = \mathbf{0}$.)

Tekintsünk most egy ellipszis pályát! Az ellipszis nagy és kistengelyei a és b a fókusztávolság c. A pálya fókuszhoz legközelebbi (legtávolabbi) pontja a *perihélium* (*afélium*) az ennek megfelelő távolság r_p (r_a). A megfelelő pontokba mutató vektorok $\mathbf{r}_p$ és $\mathbf{r}_a$. Nyilvánvaló, hogy $r_p + r_a = 2a$, továbbá $r_a = a + c$ illetve $r_p = a - c$. Tudjuk továbbá azt is, hogy $a^2 = b^2 + c^2$ és az ellipszis excentricitása $\epsilon = c/a$, így

$$r_p = a(1 - \epsilon). \tag{6.2}$$

Mivel $\mathbf{K}$ megmaradó mennyiség, ezért értékét a pálya tetszőleges pontjában kiszámíthatjuk. Legyen ez a pont $\mathbf{r}_p$! Itt $\mathbf{r}$ és $\mathbf{p}$ merőlegesek egymásra ezért $\mathbf{p} \times \mathbf{L} = \mathbf{p} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \mathbf{r}p^2 - \mathbf{p}(\mathbf{r}\mathbf{p})$ miatt

$$\mathbf{p} \times \mathbf{L}|_p = \mathbf{r}_p p^2 = \mathbf{r}_p (L^2/r_p^2). \tag{6.3}$$

Ebben a formulában L^2 egy megmaradó mennyiség tehát értékét kifejezhetjük az ellipszis adataival. Ahhoz hogy ezt megtegyük az energia kifejezését gömbi koordinátákban (lásd klasszikus mechanika kurzus) írjuk fel

$$E = \frac{{p_r}^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r}. \tag{6.4}$$

Perihéliumban és aféliumban a p_r radiális impulzus zérus így

$$E = \frac{L^2}{2mr_p^2} - \frac{\alpha}{r_p} \tag{6.5a}$$

$$E = \frac{L^2}{2mr_a^2} - \frac{\alpha}{r_a}. \tag{6.5b}$$

A két egyenletet egymásból kivonva kapjuk, hogy $L^2(r_p + r_a) = 2m\alpha(r_p r_a)$. Mivel $r_p r_a = b^2$, ezért

$$L^2 = m\alpha\frac{b^2}{a} = m\alpha a(1 - \epsilon^2). \tag{6.6}$$

Ezt a (6.3) kifejezésbe helyettesítve és felhasználva a (6.2) összefüggést és $\mathbf{K}$ (6.1) definicióját kapjuk, hogy

$$\mathbf{K} = \alpha\epsilon\frac{\mathbf{r}_p}{r_p}. \tag{6.7}$$

Láthatóan $\mathbf{K}$ egy rögzített irányba mutató $\alpha\epsilon$ nagyságú vektor. Könnyen megmutatható, hogy $\mathbf{K}$ még az alábbi összefüggéseknek is eleget tesz

$$\mathbf{LK} = 0, \quad \mathbf{K}^2 = \frac{2}{m}\mathcal{H}\mathbf{L}^2 + \alpha^2. \tag{6.8}$$

Következő feladatunk a fent vázolt klasszikus probléma kvantálása. Ehhez értelmeznünk kell a (6.1) Runge-Lenz vektornak megfelelő $\hat{\mathbf{K}}$ Hermitikus operátort. Paulit követve az alábbi választás kézenfekvőnek tűnik

$$\hat{\mathbf{K}} = \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}) - \alpha\frac{\mathbf{r}}{r}. \tag{6.9}$$

A (6.9) kombináció nyílván Hermitikus hiszen

$$(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}})_j^\dagger = (\epsilon_{jmn}\hat{p}_m\hat{L}_n)^\dagger = (\epsilon_{jmn}\hat{L}_n\hat{p}_m) = -(\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}})_j. \tag{6.10}$$

Az $[\hat{r}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}\hat{I}$ kommutációs reláció, és az $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$ összefüggés felhasználásával hosszadalmas számolás után belátható ,hogy

$$[\hat{\mathbf{K}}, \hat{H}] = 0, \tag{6.11a}$$

$$\hat{\mathbf{K}}\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{K}} = 0, \quad \hat{\mathbf{K}}^2 = \frac{2}{m}\hat{H}(\hat{L}^2 + \hbar^2) + \alpha^2. \tag{6.11b}$$

A (6.11a) összefüggés azt fejezi ki, hogy a $\hat{\mathbf{K}}$ operátorral reprezentált fizikai menynyiség megmarad, (6.11b) pedig (6.8) kvantummechanikai analogonja.

Mivel $\hat{\mathbf{L}}$ és $\hat{\mathbf{K}}$ is kommutál a hidrogénatom Hamilton operátorával, kézenfekvő a feltevés, hogy ez a hat operátor egy szimmetriacsoport hat generátorát reprezentálja. A csoport Lie-algebrájának szerkezetét ezen hat operátor kommutációs relációinak vizsgálatával deríthetjük fel. További fáradtságos számolások után az alábbi kommutációs relációkat kapjuk

$$[\hat{L}_m, \hat{L}_n] = i\hbar\varepsilon_{mnj}\hat{L}_j, \tag{6.12a}$$

$$[\hat{L}_m, \hat{K}_n] = i\hbar\varepsilon_{mnj}\hat{K}_j, \tag{6.12b}$$

$$[\hat{K}_m, \hat{K}_n] = i\hbar\left(-\frac{2}{m}\hat{H}\right)\varepsilon_{mnj}\hat{L}_j. \tag{6.12c}$$

A (6.12) formulákból látható, hogy az $\hat{\mathbf{L}}$ operátorok egy zárt algebrát feszítenek ki mely éppen az $SO(3)$ algebra. Az $\hat{\mathbf{K}}$ operátorokat is hozzávéve az algebra azonban nem záródik hiszen a kommutációs relációkban megjelenik a $\hat{H}$ operátor is. Mivel azonban $\hat{H}$ kommutál mind a hat operátorral, és független az időtől, ezért a továbbiakban a Hilbert tér *rögzített energiájú* alterére szűkítjük le az operátorainkat. Ekkor a $\hat{H}$ operátor helyett a konstans E energiát írhatjuk formuláinkba. A továbbiakban két fontos esetet különböztetünk meg. Ha $E < 0$ ($E > 0$) akkor a generátorainkat újranormálva

$$\hat{\mathbf{M}} \equiv \sqrt{\mp\frac{m}{2E}}\hat{\mathbf{K}}, \tag{6.13}$$

kapjuk, hogy

$$[\hat{L}_k, \hat{L}_n] = i\hbar\varepsilon_{knj}\hat{L}_j, \tag{6.14a}$$

$$[\hat{L}_k, \hat{M}_n] = i\hbar\varepsilon_{knj}\hat{M}_j, \tag{6.14b}$$

$$[\hat{M}_k, \hat{M}_n] = \pm i\hbar\varepsilon_{knj}\hat{L}_j. \tag{6.14c}$$

A (6.14c) relációban $E < 0$ ($E > 0$) esetén a pozitív (negatív) előjel értendő. Kötött és szórásállapotok esetén láthatóan két különböző Lie-algebrát kaptunk. A következő alfejezetben megmutatjuk, hogy a két megfelelő algebra az $SO(4)$ illetve az $SO(3,1)$ csoportok Lie-algebrája.

6.1.2 Az $SO(4)$ és $SO(3,1)$ csoportok Lie algebrája

Ebben az alfejezetben rövid matematikai kitérőt teszünk, és megmutatjuk, hogy a (6.14) Lie-algebra izomorf az $SO(4)$ ($SO(3,1)$) algebrával ha (6.14c)-ben a felső (alsó) előjelet választjuk. Tekintsük azt a 4×4-es diagonális g mátrixot melynek elemei $g_{11} = g_{22} = g_{33} = 1$, $g_{44} = \pm 1$, $g_{ij} = 0$, ha $i \neq j$. Ezekután definiáljuk két $x, y \in \mathbf{R}^4$-beli vektor skaláris szorzatát az alábbi módon

$$\langle x, y\rangle \equiv x_i g_{ij} y_j, \quad i, j = 1, \dots 4. \tag{6.15}$$

Nyilván g a metrikus tenzor szerepét tölti be. Legyen A az alábbi tulajdonságu valós 4×4-es egységnyi determinánsú mátrix ($detA = 1$)

$$\langle Ax, Ay\rangle = \langle x, y\rangle. \tag{6.16}$$

Az ilyen tulajdonságu mátrixok az $SO(4)$ ($SO(3,1)$) csoportot alkotják g_{44} pozitív (negatív) előjelválasztása esetén. (6.16) baloldalát komponensenként kiírva kapjuk, hogy

$$A^T g A = g, \tag{6.17}$$

ahol A^T az A matrix transzponáltját jelenti. A fenti csoportok Lie-algebrájának jellemzéséhez meg kell vizsgálnunk , a csoport viselkedését az egységelem környezetében. Legyen $A = I + \omega$ ahol ω egy infinitezimális 4×4-es mátrix, I pedig az egységmátrix. Az $A = I + \omega$ kifejezést (6.17)-be helyettesítve ω-ban elsőrendben kapjuk, hogy

$$\omega^T g + g\omega = 0. \tag{6.18}$$

Vegyük fel az ω mátrixot az $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ alakban, ahol a egy 3×3-as, b 1×3-es, c 3×1-es mátrix, d pedig egy valós szám. ω fenti alakját (6.18)-ba helyettesítve kapjuk, hogy

$$\omega = \begin{pmatrix} a & b \\ \mp b^T & 0 \end{pmatrix}, \quad a^T = -a, \tag{6.19}$$

azaz a egy 3×3-as antiszimmetrikus mátrix. ($SO(4)$ esetében ω egy 4×4-es antiszimmetrikus mátrix.Ekkor ugyanis (6.19)-ben a felső előjelet kell választani.) Az ω mátrixnak hat független eleme van, csoportunk tehát egy hat paraméteres Lie-csoport, az infinitezimális generátorok száma is hat. Ne felejtsük el, hogy az a és b mátrixok is infinitezimálisak, ezért ω-t célszerű az alábbi alakba írni

$$\omega \equiv \frac{i}{\hbar}\beta_a (T_a)_{jk}, \quad a = 1, \ldots 6, \quad j,k = 1, \ldots 4. \tag{6.20}$$

A (6.20)-ban megjelenő jelölések még magyarázatra szorulnak. Kvantummechanikai tanulmányainkból tudjuk, hogy a szimmetriákat $\hat{U}$ unitér operátorokkal reprezentáljuk melyek $\hat{O}$ generátorai Hermitikus operátorok. $\hat{U}$ és $\hat{O}$ kapcsolata mint tudjuk

$$U = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{O}} = \hat{I} + \frac{i}{\hbar}\hat{O} + \ldots. \tag{6.21}$$

Infinitezimális $\hat{O}$ esetén a "..." magasabbrendű tagokat elhanyagolhatjuk. Ezekután érthető, hogy az $\frac{i}{\hbar}$ faktort a kvantummechanikai analógia kedvéért "húztuk ki" ω-ból. A hat β_a paraméter infinitezimális, ezek a forgáscsoportnál megismert Euler-szögek infinitezimális analogonjai. A hat T_a extra jk indexei azt jelzik, hogy ezek az infinitezimális generátorok még 4×4-es mátrixok is. Ezeket a mátrixokat az alábbi alakuaknak választjuk

$$T_1 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, T_2 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_3 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, T_4 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \pm i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_5 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pm i & 0 & 0 \end{pmatrix}, T_6 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & \pm i & 0 \end{pmatrix}. \qquad (6.22)$$

Legyen most $\tilde{\mathbf{L}} = (\tilde{L}_1, \tilde{L}_2, \tilde{L}_3) \equiv (T_1, T_2, T_3)$,és $\tilde{\mathbf{M}} = (\tilde{M}_1, \tilde{M}_2, \tilde{M}_3) \equiv (T_3, T_4, T_5)$. Egy kis számolás után meggyőződhetünk arról, hogy ez a hat mátrix ugyanazokat a (6.14) kommutációs relációkat elégíti ki mint a hat ($\hat{\mathbf{L}}$ $\hat{\mathbf{M}}$) operátor. Ezzel megmutattuk azt, hogy a (6.14) Lie-algebra izomorf az $SO(4)$ ($SO(3,1)$) Lie-algebrával.

6.1.3 Kötött állapotok.

Most végre visszatérhetünk az eredeti problémánkhoz nevezetesen a hidrogénatom sajátállapotainak n^2-szeres degeneráltságához. A probléma megoldásához fontos lépést tettünk előre azzal, hogy tisztáztuk a szerepet játszó szimmetriacsoport természetét. Csoportunk az $SO(4)$ azonban még tartogat számunkra némi meglepetést. Ez a csoport az $SO(N)$ (N dimenziós forgáscsoport) csoportok között speciális szerepet tölt be. Tekintsük ugyanis a generátoraink alábbi lineáris kombinációját

$$\hat{\mathbf{J}}^{(1)} \equiv \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{M}}), \quad \hat{\mathbf{J}}^{(2)} \equiv \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{M}}). \qquad (6.23)$$

Mivel Lie-algebránk egyben egy hat dimenziós vektortér, ez egy másik bázis választásának felel meg. Ezek az új operátorok továbbra is kommutálnak $\hat{H}$-val és az alábbi kommutációs relációknak tesznek eleget

$$[\hat{J}_k^{(1)}, \hat{J}_l^{(1)}] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{J}_m^{(1)}, \tag{6.24a}$$

$$[\hat{J}_k^{(2)}, \hat{J}_l^{(2)}] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{J}_m^{(2)}, \tag{6.24b}$$

$$[\hat{J}_k^{(1)}, \hat{J}_l^{(2)}] = 0. \tag{6.24c}$$

azt tapasztaltuk tehát, hogy az $so(4)$ algebra (ezentúl a Lie-csoport algebráját kis betűvel fogjuk megkülönböztetni a megfelelő Lie-csoporttól, $SO(4)$ utal a csoportra $so(4)$ pedig a csoport algebrájára) szétesik két független $so(3)$ algebrára. Matematikai szempontból ez azt jelenti, hogy $so(4)$ két darab $so(3)$ direkt összege, azaz $so(4) = so(3) \oplus so(3)$. Mivel az $so(3)$ éppen az impulzusmomentum algebra, és ennek az ábrázolásait már korábbi kvantummechanikai tanulmányainkból már ismerjük, ezért az $so(4)$ algebra ábrázolásait is könnyűszerrel megkonstruálhatjuk.

Frissítsük fel az $so(3)$ algebra ábrázolásairól szerzett ismereteinket! A különböző unitér irreducibilis ábrázolásokat egy pozitív egész vagy félegész szám indexeli. Jelöljük ezeket a számokat j_1 (j_2)-vel a $\hat{\mathbf{J}}^{(1)}$ ($\hat{\mathbf{J}}^{(2)}$) generálta $so(3)$ algebrára. A lehetséges értékek tehát: $j_1 = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots$, $j_2 = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots$. Tudjuk továbbá azt is , hogy

$$(\hat{\mathbf{J}}^{(1)})^2|j_1 m_1\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1)|j_1 m_1\rangle, \quad \hat{\mathbf{J}}_3^{(1)}|j_1 m_1\rangle = \hbar m_1|j_1 m_1\rangle. \tag{6.25a}$$

$$(\hat{\mathbf{J}}^{(2)})^2|j_2 m_2\rangle = \hbar^2 j_2(j_2+1)|j_2 m_2\rangle, \quad \hat{\mathbf{J}}_3^{(2)}|j_2 m_2\rangle = \hbar m_2|j_2 m_2\rangle. \tag{6.25b}$$

A (6.11b), (6.13) és (6.23) formulákból tudjuk, hogy $\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{M}} = (\hat{\mathbf{J}}^{(1)})^2 - (\hat{\mathbf{J}}^{(2)})^2 = 0$. Ebből következik, hogy $j_1 = j_2 \equiv j = 0, \frac{1}{2}, 1 \ldots$.

Definiáljuk most a következő operátort!

$$\hat{C} \equiv (\hat{\mathbf{J}}^{(1)})^2 + (\hat{\mathbf{J}}^{(2)})^2 = \frac{1}{2}(\hat{L}^2 + \hat{M}^2) = \frac{1}{2}(\hat{L}^2 - \frac{m}{2E}\hat{K}^2). \tag{6.26}$$

Ez az operátor az $so(4)$ algebra minden generátorával felcserélhető. Az ilyen tulajdonságú operátort *Casimir operátor*nak nevezünk. Az $so(4)$ bennünket érdeklő ábrázolásait tehát jellemezhetjük ennek az operátornak a sajátértékeivel. Mivel $j_1 = j_2 = j$ ez a sajátérték

$$C = 2\hbar^2 j(j+1). \tag{6.27}$$

Figyeljük meg, hogy (6.27)-ben $\hat{C}$-ről a "kalapot" elhagytuk ezzel utaltunk arra, hogy C egy szám amit úgy kapunk, hogy $\hat{C}$-t a megfelelő konstans energiáju, $j_1 = j_2$ tulajdonságú sajátaltéren "értékeltük ki". Számoljuk most ki ugyanezen az altéren (6.26) jobb oldalát. (6.11b) felhasználásával kapjuk, hogy

$$C = \frac{1}{2}\left(-\hbar^2 - \frac{m}{2E}\alpha^2\right). \tag{6.28}$$

(6.27)-et és (6.28)-at egyenlővé téve és E-t kifejezve kapjuk

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}\frac{1}{(2j+1)^2}, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1 \dots, \tag{6.29}$$

ami az $n \equiv 2j+1 = 1, 2, 3 \dots$, $\alpha = ke^2$ szereposztással épp a hidrogénatom ismert sajátenergiáit adja.

Mi a helyzet a degeneranciával? Ennek vizsgálatához vegyük észre, hogy $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{J}}^{(1)} + \hat{\mathbf{J}}^{(2)}$ (lásd (6.23)). Az impulzusmomentum összeadás szabályából l lehetséges értékei

$$l = |j_1 - j_2| = 0, 1, 2, \dots, j_1 + j_2 = 2j = n - 1. \tag{6.30}$$

l tehát a $0, 1, 2, \dots n-1$ értékeket veheti fel ahogy annak lennie is kell. A degenerancia meghatározásához vegyük észre, hogy $\hat{H}$, $J_3^{(1)}$, $J_3^{(2)}$ páronként kommutálnak így választható közös sajátfüggvényrendszerük. (6.25a,b) alapján $j_1 = j_2 = j$ ismételt figyelembe vételével kapjuk, hogy a rögzített energiájú állapotok száma megegyezik a $|jm_1\rangle \otimes |jm_2\rangle$ tenzorszorzatbeli állapotok számával. Mivel m_1 és m_2 egyaránt a $-j, -j+1, \dots j$ értékeket veheti fel ezért a degenerancia $(2j+1)^2 = n^2$ ahogy annak lennie is kell.

6.1.4 A Wigner-Eckart tétel, és az $so(3,1)$ algebra unitér irreducibilis ábrázolásai.

Mielőtt a szórásállapotok tárgyalásába fognánk, szükséges egy kis csoportelméleti kitérőt tennünk. Tudjuk, hogy szórásállapotokra $E > 0$ így a (6.13) $\hat{\mathbf{M}}$ operátorok alakja

$$\hat{\mathbf{M}} = \frac{m}{\hbar k}\hat{\mathbf{K}}, \quad E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{6.31}$$

Ezek az operátorok a (6.14) $SO(3,1)$ felcserélési relációknak tesznek eleget. ((6.14c)-ben a *negatív előjelet kell vennünk.*) A szórásmátrix csoportelméleti meghatározásához szükségünk lesz az $so(3,1)$ algebra unitér irreducibilis ábrázolásainak ismeretére. (Pontosabban a Hermitikus $\hat{M}_3$ operátor bizonyos mátrixelemeire.) Mivel ez a feladat meglehetősen bonyolult ezért ebben a fejezetben csak az alapvető matematikai lépéseket vázoljuk, a részletesebb tárgyalást lásd például A. Bohm kitünő könyvében [4].

Az $so(3,1)$ unitér irreducibilis ábrázolásainak meghatározásához hasonló stratégiát követünk mint az $so(3)$ algebra esetén. Itt az L_1, L_2, L_3 operátorok mátrixelemeit az L_3 operátorok sajátvektorai által kifeszített bázisban határoztuk meg, ahol L_3 egy $so(2)$ részalgebrát generált. A végeredmény mint tudjuk

$$L_3|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle, \tag{6.32a}$$

$$L_\pm|lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}|lm\pm 1\rangle, \tag{6.32b}$$

$$L_\pm \equiv L_1 \pm iL_2, \quad l = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots \quad m = -l, \ldots, l. \tag{6.32c}$$

Mivel az $so(3)$ algebra az $so(3,1)$ részalgebrája és az $so(3)$ algebra (6.32) irreducibilis ábrázolásai már ismertek, feladatunk a fentiek alapján az K_1, K_2, K_3 operátorok $|lm\rangle$ bázisbeli mátrixelemeinek meghatározása. Jelöljük az $|lm\rangle$ bázisvektorok által kifeszített vektorteret $\mathcal{R}_l$-vel. Feladatunk az $\mathcal{R} = \sum_l \bigoplus \mathcal{R}_l$ ábrázolási tér megkonstruálása az $\mathcal{R}_l$ vektorterek segítségével. Meg kell tehát határoznunk, hogy a lehetséges ($l = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots$) értékek közül a $\mathcal{R} = \sum_l \bigoplus \mathcal{R}_l$ szummába milyen l értékek kerülhetnek be. Kössük ki továbbá azt is, hogy a szummában minden megengedett l érték *csak egyszer fordulhat elő.* Továbbá bennünket csak az unitér ábrázolások érdekelnek, ezért az $\mathcal{R}$ ábrázolási téren "dolgozó" K_1, K_2, K_3 operátorok *Hermitikusak* kell hogy legyenek.

Tekintsük most a (6.14b) kommutációs relációt. Ez a reláció azt fejezi ki, hogy a $\hat{\mathbf{M}}$ a forgáscsoporttal szemben *vektorként* viselkedik. (Könnyű belátni, hogy $\hat{\mathbf{r}}_j$ és $\hat{\mathbf{p}}_j$ is $\hat{\mathbf{M}}$-hez hasonlóan viselkedik.) Az ilyen tulajdonságú operátorokat *vektoroperátoroknak* nevezünk. Legyen most $\hat{V}_j, \quad j = 1, 2, 3$ egy vektoroperátor. Ezen (Descartes-féle) komponensek helyett célszerű bevezetni az un. *szférikus* komponenseket

$$V_0 = V_3, \quad V_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(V_1 \pm i V_2). \tag{6.33}$$

A V_κ-k, $\kappa = -1, 0, +1$ az alábbi csererelációkat elégítik ki

$$[L_\pm, V_{\mp 1}] = \hbar\sqrt{2}V_0, \quad [L_\pm, V_0] = \hbar\sqrt{2}V_{\pm 1}, \quad [L_0, V_\kappa] = \hbar\kappa V_\kappa, \tag{6.34}$$

a többi kommutátor zérus. A (6.34) relációk az általánosabb

$$[L_\pm, T_\kappa^{(j)}] = \hbar\sqrt{j(j+1) - \kappa(\kappa \pm 1)}T_{\kappa \pm 1}^{(j)}, \quad [L_0, T_\kappa^{(j)}] = \hbar\kappa T_\kappa^{(j)}, \tag{6.35}$$

relációk speciális esetei a $j = 1, \ \kappa = -j, \ldots, j$ választás esetén. Az ilyen tulajdonságú $T_\kappa^{(j)}$ operátorokat j-ed rangú *tenzoroperátoroknak* nevezzük. Legyen most $T_\kappa^{(j)}$ egy tenzoroperátor. Ekkor a Wigner-Eckart tétel szerint

$$\langle l'm'|T_\kappa^{(j)}|lm\rangle = \langle lmj\kappa|l'm'\rangle\langle l'||T^{(j)}||l\rangle, \tag{6.35}$$

ahol $\langle lmj\kappa|l'm'\rangle$ a kvantummechanika tanulmányainkból már ismert Clebsch-Gordan koefficiens, és $\langle l'||T^{(j)}||l\rangle$ az m', m és κ-tól független úgynevezett *redukált mátrixelem.* (A Clebsch-Gordan koefficensek értékeit táblázatok tartalmazzák, lásd például [4].) A tétel bizonyítása meghaladja ezen jegyzet kereteit. Mi a továbbiakban csupán a tétel $\hat{M}_\kappa$ vektoroperátorra ($j = 1, \quad \kappa = -1, 0, +1$) vonatkozó alakját fogjuk használni.

Alkalmazzuk a $\hat{M}_\kappa$ vektoroperátort az $|lm\rangle$ bázisvektorokra! Ekkor

$$\hat{M}_\kappa|lm\rangle = \sum_{l'm'}|l'm'\rangle\langle l'm'|\hat{M}_\kappa|lm\rangle = \sum_{l'm'}|l'm'\rangle\langle lm1\kappa|l'm'\rangle\langle l'||\hat{M}||l\rangle, \tag{6.36}$$

ahol az utolsó egyenlőségnél felhasználtuk a Wigner-Eckart tételt.

A Clebsch-Gordan koefficensek tulajdonságaiból következik [4], hogy a zérustól különböző tagok azok melyekre $l' = l+1, l, l-1$, és $m' = m+\kappa$. Vezessük be az

$$a_l = -\frac{\langle l||\hat{M}||l\rangle}{\sqrt{l(l+1)}}, c_l = -\frac{\langle l-1||\hat{M}||l\rangle}{\sqrt{l(2l+1)}}, d_l = -\frac{\langle l+1||\hat{M}||l\rangle}{\sqrt{(l+1)(2l+1)}}, \tag{6.37}$$

jelöléseket. Ekkor a Clebsch-ek konkrét kifejezéseit felhasználva kapjuk, hogy

$$\hat{M}_0|lm\rangle = \sqrt{l^2-m^2}c_l|l-1m\rangle - ma_l|lm\rangle - \sqrt{(l+1)^2-m^2}d_l|l+1m\rangle. \tag{6.38}$$

A $\hat{M}_{\pm 1}|lm\rangle$ hasonló kifejtését az olvasóra bízzuk.

Megmutatható [4], hogy a $|lm\rangle$ bázist újradefiniálhatjuk olymódon, hogy az új bázisban $d_l = c_{l+1}$. Ekkor (6.38) alakja $m = 0$ esetén (erre a későbbiekben szükségünk lesz)

$$\hat{M}_0|l0\rangle = lc_l|l-10\rangle - (l+1)c_{l+1}|l+10\rangle. \tag{6.39}$$

Mindezidáig csak azt használtuk ki, hogy $\hat{M}_\kappa$ egy vektoroperátor. Ez a fontos tulajdonság vezetett a (6.38) formulára. Ez a formula azonban tartalmazza az ismeretlen a_l és c_l mennyiségeket. Szerencsére $\hat{M}_\kappa$ nemcsak egy vektoroperátor, hanem (6.14c) alapján kielégíti még a

$$[\hat{M}_0, \hat{M}_{\pm 1}] = \mp\hbar\hat{L}_{\pm 1}, \quad [\hat{M}_{+1}, \hat{M}_{-1}] = -2\hbar\hat{L}_0, \tag{6.40}$$

összefüggéseket is. Elegendő ezek közül csupán egyet választanunk, hiszen a másik kettőt ez a reláció és a (6.34) relációk már meghatározzák. Legyen ez a kiválasztott reláció a

$$[\hat{M}_{+1}, \hat{M}_0] = \hbar\hat{L}_{+1}, \tag{6.41}$$

reláció. (6.41)-vel az $|lm\rangle$ bázisra hatva és felhasználva a (6.32b), (6.38) összefüggéseket, majd egyenlővé téve a lineárisan független bázisvektorok együtthatóit egy rekurziós relációrendszert kapunk az ismeretlen a_l és c_l mennyiségekre. A relációrendszer megoldását lásd [4]-ben, mi itt csak a végeredményt idézzük

$$a_l = \hbar \frac{ij_0 j_1}{l(l+1)}, \quad c_l = \hbar \frac{i}{l} \sqrt{\frac{(l^2 - j_0^2)(l^2 - j_1^2)}{4l^2 - 1}}, \quad l \geq j_0, l \geq 1. \tag{6.42}$$

Itt j_1 egy tetszőleges *komplex* szám j_0 pedig az a legkisebb l érték mely az ábrázolásban előfordulhat, azaz $\mathcal{R} = \sum_{l=j_0,j_0+1,\ldots} \bigoplus \mathcal{R}_l$. Nyílván ilyen érték kell, hogy létezzen hiszen $l > 0$ és a $\hat{M}_\kappa$ operátorok nem csak m-ben hanem l-ben is léptetnek.

Az $so(3,1)$ algebra irreducibilis ábrázolásait tehát *két* szám indexeli (j_0, j_1) ahol j_0 egész vagy félegész j_1 pedig komplex. Az $\mathcal{R}$ ábrázolási terünket célszerű tehát az $\mathcal{R}(j_0, j_1)$ módon jelölni. Kitűzött feladatunkat azonban még nem értük el ugyanis bennünket az *unitér* irreducibilis ábrázolások érdekelnek. Az unitér ábrázolások megkonstruálásához egy skalárszorzatot kell $\mathcal{R}(j_0, j_1)$-n bevezetnünk, és meg kell követelnünk azt, hogy az $\hat{\mathbf{L}}$ és az $\hat{\mathbf{M}}$ operátorok Hermitikusak legyenek erre a skalárszorzatra nézve. Rendelkezzen a skalárszorzat a szokásos

$$\langle l'm'|lm\rangle = \delta_{l'l}\delta_{m'm} \tag{6.43}$$

tulajdonsággal! Ekkor (6.38) alapján

$$\langle \hat{M}_0 l-1m|lm\rangle = -\sqrt{l^2 - m^2}\bar{c}, \quad \langle l-1m|\hat{M}_0 lm\rangle = \sqrt{l^2 - m^2}c_l, \tag{6.44a}$$

$$\langle \hat{M}_0 lm|lm\rangle = -m\bar{a}_l, \quad \langle lm|\hat{M}_0 lm\rangle = -ma_l. \tag{6.44b}$$

Innen látható, hogy $\hat{M}_0 = \hat{M}_3$ akkor lesz hermitikus ha

$$a_l = \bar{a}_l, \quad c_l = -\bar{c}_l. \tag{6.45}$$

Hasonlóan megmutatható, hogy az $\hat{M}_1$ és $\hat{M}_2$ Hermiticitásának megköveteléséből adodó $\hat{M}_{\pm 1}^\dagger = \hat{M}_{\mp 1}$ reláció is (6.45)-re vezet. (6.45)-ből látható, hogy az ábrázolás unitaritásához $j_1 = if \;\; f \in \mathbf{R}$ *tiszta képzetes* kell hogy legyen és $j_0 = 0, \frac{1}{2}, \ldots$. A másik lehetőség $0 \leq j_1 < 1$ és $j_0 = 0$. Az

$$\mathcal{R}(j_0, j_1) = \sum_{l=j_0, j_0+1, \ldots}^{\infty} \bigoplus \mathcal{R}_l \tag{6.46}$$

ábrázolási tér végtelen dimenziós.

Az $so(3, 1$ algebrát kifeszítő $\hat{\mathbf{L}}$ és $\hat{\mathbf{M}}$ operátorok amennyiben $\hat{\mathbf{L}}$ az impulzusmomentum és $\hat{\mathbf{M}}$ a megfelelően normált Runge-Lenz vektor operátora természetesen az $so(3, 1)$ egy speciális ábrázolását adják. A kérdés: milyen j_0 és j_1 értékekkel jellemezhető ez az ábrázolás? Vegyük észre, hogy a $\hat{C}_1 = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{M}}^2$ és a $\hat{C}_2 = \hat{\mathbf{M}}\hat{\mathbf{L}}$ operátorok az $\hat{\mathbf{L}}$ és a $\hat{\mathbf{M}}$ operátorok mindegyikével felcserélhetők. Az ilyen tulajdonságú operátorokat *Casimir operátorok*nak nevezzük. Jelöljük $|j_0 j_1, lm\rangle$-vel az $\mathcal{R}(j_0, j_1)$ ábrázolási teret kifeszítő bázisvektorokat! Megmutatható [4] (fejezzük ki $\hat{C}_1$-et és $\hat{C}_2$-t az $\hat{L}_\pm$,$\hat{M}_\pm$, $\hat{L}_0$ és $\hat{M}_0$ operátorokkal majd hattassuk a $|j_0 j_1, lm\rangle$ bázisra), hogy

$$\hat{C}_1 |j_0 j_1, lm\rangle = \hbar^2 (j_0^2 + j_1^2 - 1) |j_0 j_1, lm\rangle, \tag{6.46a}$$

$$\hat{C}_2 |j_0 j_1, lm\rangle = -i\hbar^2 j_0 j_1 |j_0 j_1, lm\rangle. \tag{6.46b}$$

6.1.5 A szórásmátrix meghatározása

A fenti matematikai kitérő után minden keszen áll arra, hogy a szórásmátrixot meghatározzuk. Mivel (6.11b) alapján $\hat{C}_2 = 0$ és $\hat{C}_1 + \hbar^2 = -(\frac{m\alpha}{\hbar k})^2$, ezért (6.46)-ból látható, hogy vagy $j_1 = 0$, vagy $j_0 = 0$. Ha $j_1 = 0$ akkor $(\frac{m\alpha}{\hbar k})^2 = -j_0^2 \hbar^2 < 0$ lenne ami nincsen összhangban az energia pozitivitásával. Marad tehát a $j_0 = 0$ eset. Ekkor $j_1^2 \hbar^2 = -(\frac{m\alpha}{\hbar k})^2$, azaz j_1 tiszta képzetes. Ábrázolási terünk tehát a $\mathcal{R}(0, i\frac{m\alpha}{\hbar^2 k}) \equiv \mathcal{R}(0, i\eta)$ tér, ahol

$$\eta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}, \tag{6.47}$$

az un. Sommerfeld paraméter. A $\mathcal{R}(0, i\eta)$ téren az $so(3, 1)$ algebra egy unitér ábrázolása valósul meg. Az ábrázolási tér végtelen dimenziós.

Következő feladatunk a be és kijövő szórásállapotok algebrai jellemzése. A bejövő (kimenő) szórásállapotok $+z$ tengely irányában terjedő bejövő

(kijövő) síkhullámoknak felelnek meg. Mivel $\hat{L}_3$ és $\hat{M}_3$ kommutálnak, ezért sajátértékeikkel a teljes szórásfolyamat során jellemezhetjük az $|in\rangle$ és $|out\rangle$ állapotokat. Mivel $\hat{L}_3 e^{ikz} = 0$ ezért

$$\hat{L}_3 |k\hat{z}^{in}_{out}\rangle = 0. \tag{6.48}$$

Könnyen belátható, hogy $\frac{1}{2}(\mathbf{p}\times\mathbf{L} - \mathbf{L}\times\mathbf{p}) = \mathbf{r}p^2 - \mathbf{p}(\mathbf{r}\mathbf{p})$. Ebből (6.31) felhasználásával kapjuk, hogy $\hat{M}_3 e^{ikz} = \hbar(i-\eta)e^{ikz}$ azaz

$$\hat{M}_3 |k\hat{z}^{in}_{out}\rangle = \hbar(i \pm \eta)|k\hat{z}^{in}_{out}\rangle. \tag{6.49}$$

A (6.48) és (6.49) egyenleteknek eleget tevő $|k\hat{z}^{in}_{out}\rangle$ állapotokat kifejthetjük az $\mathcal{R}(0, i\eta)$ tér $|0\eta, lm\rangle$ bázisvektorai szerint (η (6.47) miatt függ k-tól). (6.48) miatt $m = 0$ ezért a felhasználható bázisvektorok alakja $|0\eta, l0\rangle$. A továbbiakban az egyszerűség kedvéért ezeket a vektorokat röviden $|l0\rangle$ alakban fogjuk használni. A kifejtés alakja legyen ezután az alábbi

$$|k\hat{z}^{in}_{out}\rangle = \sum_l \sqrt{2l+1}\, a_{l\,out}^{\,in} |l0\rangle. \tag{6.50}$$

Most felidézzük a (6.39)-ből kapott ($j_0 = 0$, $j_1^2 = -\eta^2$)

$$\hat{M}_3|l0\rangle = il\hbar\sqrt{\frac{l^2+\eta^2}{4l^2-1}}|l-10\rangle - i\hbar(l+1)\sqrt{\frac{(l+1)^2+\eta^2}{4(l+1)^2-1}}|l+10\rangle \tag{6.51}$$

összefüggést. $\hat{M}_3$ hatását a $|k\hat{z}^{in}_{out}\rangle$ állapotokra kétféleképpen is kiszámítottuk, (6.49) alapján illetve (6.51) alapján. (6.49) alapján a_l csak az $(i \pm \eta)$ faktorral szorzódik. (6.51) pedig az l értékeit ± 1-vel eltolva megfelelő faktorokkal szorozza az $a_{l\pm 1}$ együtthatókat. A számításokat elvégezve az alábbi rekurziós relációt kapjuk

$$(l+1)\sqrt{(l+1)^2+\eta^2}\,a_{l+1} = (2l+1)(1-i\eta)a_l + l\sqrt{l^2+\eta^2}\,a_{l-1}, \tag{6.52}$$

ahol az a_l mennyisegekről az "in" indexet most elhagytuk. A fenti relációból $l = 0$ helyettesítéssel kapjuk, hogy

$$a_1^{in} = \sqrt{\frac{1-i\eta}{1+i\eta}} a_0^{in}. \tag{6.53}$$

A rekurzió felhasználásával indukcióval könnyen belátható, hogy

$$a_l^{in} = \sqrt{\frac{(l-i\eta)!}{(l+i\eta)!}} \sqrt{\frac{i\eta!}{-i\eta!}} a_0^{in}. \tag{6.54}$$

Az $a_0 = \sqrt{\frac{-i\eta!}{i\eta!}}$ választással kapjuk, hogy

$$a_l^{\mp} = \sqrt{\frac{\Gamma(l+1\mp i\eta)}{\Gamma(l+1\pm i\eta)!}}, \tag{6.55}$$

ahol $a_l^{\mp} \equiv a_l^{in/out}$, és kihasználtuk, hogy az "in" állapotról az "out" állapotra való áttérés során $\eta \mapsto -\eta$.

Az S mátrixot az alábbi módon definiáljuk.

$$S(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \langle \mathbf{k}'^{out} | \mathbf{k}^{in} \rangle = \langle \mathbf{k}'^{out} | S | \mathbf{k}^{out} \rangle, \tag{6.56}$$

így $|k^{in}\rangle = S|k^{out}\rangle$. Ezt (6.50)-be helyettesítve és kihasználva, hogy $[S, \mathbf{L}] = 0$ kapjuk hogy $a_l^{in} = S_l a_l^{out}$, ahol $S|l,m\rangle = S_l|l,m\rangle$. Az s mátrixra tehát azt kapjuk, hogy

$$S_l(k) = \frac{\Gamma(l+1-i\eta)}{\Gamma(l+1+i\eta)}, \quad \text{ahol} \quad \eta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}. \tag{6.57}$$

6.2. AZ ALGEBRAI SZÓRÁSELMÉLET

Az előző fejezetben láttuk, hogy a H-atom kötött állapotait a *kompakt* $SO(4)$ csoporttal, míg a szórásállapotait a *nemkompakt* $SO(3,1)$ csoporttal írhattuk le. A kompakt $SO(4)$ irreducibilis unitér ábrázolásait *diszkrét* számértékekkel (egész vagy félegész számokkal), míg a nemkompakt $SO(3,1)$ csoport esetén az unitér irrepeket *folytonosan változó* értékekkel is jellemezhettük. Azt találtuk továbbá, hogy (lásd (6.47) egyenlet) ezek a folytonosan változó jellemzők a szórási energiával hozhatók kapcsolatba. Ezek után természetesnek tűnik az az ötlet, hogy tetszőleges nemkompakt félegyszerű Lie-csoportot használjunk kvantummechanikai szórásproblémák leírására. Tudjuk már, hogy az $SO(3,1)$ csoport a Coulomb potenciálon történő három dimenziós szórást írja le. Felmerül tehát a kérdés melyek azok az egzaktul megoldható szórásproblémák melyek egy adott G nemkompakt csoporttal kapcsolatosak. Természetes azt várnunk, hogy a G csoport **g** Lie-algebráját különbözőképp realizálva, különböző szórásproblémákat kapunk. Az $SO(3,1)$ csoport algebrájára például egy ilyen realizációt az impulzusmomentum operátor és a Runge-Lenz vektor operátorának három -három komponense adott. Ez a realizáció a Coulomb problémára vezetett. Továbbá ezek az operátorok differenciáloperátorok voltak. Az $so(3,1)$ algebrát azonban mátrixokkal is kielégíthetjük. Választhatunk tehát akár mátrix-értékű differenciáloperátorokat is. Sok különböző realizáció képzelhető el, a G-t jellemző *lokális* koordináták különféle megválasztásának megfelelően is. Ezek után természetes azt kérdeznünk: elképzelhető-e , hogy a szórásmátrix funkcionális alakja, független marad a realizációk konkrét alakjától, és kizárólag a csoport bizonyos globális jellemzőitől függ?

Ezalatt az alábbiakat értjük. A Lie-algebra a csoport egységeleme körüli viselkedését írja le. Ez tehát a csoportot *lokálisan* jellemzi. A realizációk a lokális koordináták választásán keresztül tehát lokális tulajdonságokat tükröznek. Ezzel szemben a G csoport *globális* tulajdonságai, (összefüggőség, alcsoport szerkezet) G topológiai szerkezetével kapcsolatosak. Az Algebrai Szóráselmélet alapgondolata az, hogy konkrét realizációk felhasználása nélkül próbáljuk a szórásmátrix általános szerkezetét meghatározni.

A következő két fejezetben a legegyszerűbb nemkompakt csoport az $SO(2,1)$ példáján keresztül illusztráljuk az elmondottakat. Az első alfejezetben az $so(2,1)$ algebrára egy realizációt tekintünk. A kvadratikus Casimir operátor kiszámolásával egy egydimenziós szórásproblémát kapunk. A megfelelő szórásmátrixot (reflexiós koefficens) explicit módon meghatározzuk. A második alfejezetben a csoportkontrakciók elméletét felhasználva tisztán algebrai módon meghatározzuk a szórásmátrix algebrai szerkezetét. Levezetjük a szórásmátrix funkcionális alakját. Megmutatjuk , hogy az előző alfejezetben kapott szórásmátrix funkcionális alakja megegyezik az a realizációfüggetlen számolással kapottal.

6.2.1 Realizáció az $SO(2,1)$ csoportra

Tekintsük az $X_1^2 + X_2^2 - X_3^2 = 1$ *egyköpenyű* hiperboloidot. Az $SO(2,1)$ csoport a hiperboloid egyik pontját a hiperboloid egy másik pontjába viszi. Hasonlóan a $SO(3)$ forgáscsoporthoz, mely az $X_1^2 + X_2^2 + X_3^2 = 1$ egységgömb pontjait transzformálja. Megmutatható, hogy a hiperboloidon ható $SO(2,1)$ transzformáció infinitezimális generátorai az alábbiak.

$$J_1 = -i(X_2\partial_3 + X_3\partial_2), \quad J_2 = i(X_1\partial_3 + X_3\partial_1), \quad J_3 = -i(X_1\partial_2 - X_2\partial_1) \tag{6.58}$$

Bevezetve az $(X_1, X_2, X_3) \equiv (\cosh\rho\cos\phi, \cosh\rho\sin\phi, \sinh\rho)$ $-\infty < \rho < +\infty$, $0 \leq \phi < 2\pi$ transzformációt, és a szokásos $J_\pm = J_1 \pm iJ_2$ operátorokat az alábbi formulákat kapjuk

$$J_\pm = e^{\pm i\phi}(\partial_\rho - i\tanh\rho\partial_\phi), \quad J_3 = -i\partial_\phi. \tag{6.59}$$

Mivel a felületelem a hiperboloidon $dA = \cosh\rho d\rho d\phi$, az operátorokat célszerű az $O \mapsto T^{-1}OT$ hasonlósági transzformációnak alávetni, ahol $T(\rho) \equiv \cosh^{-1/2}\rho$. Ezzel a $\Psi(\rho,\phi)$ hullámfüggvények terén a $\langle|\rangle$ skalárszorzat definiciójában az integrálási mérték egyszerűen $d\rho d\phi$ lesz. Ezen transzformáció után

$$T^{-1}J_\pm T = e^{\pm i\phi}(\partial_\rho + \tanh\rho(\pm 1/2 - i\partial_\phi)), \quad T^{-1}J_3T = -i\partial_\phi. \tag{6.60}$$

Számítsuk most ki az $SO(2,1)$ csoport kvadratikus Casimir operátorát ebben a realizációban! Ez a C operátor az $so(2,1)$ algebra valamennyi generátorával kommutál. A kommutációs relációk alapján könnyen belátható, hogy $C = J_1^2 + J_2^2 - J_3^2 = -J_+J_- + J_3(J_3+1)$. (6.60) felhasználásával könnyen megmutatható, hogy

$$T^{-1}CT = \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\frac{d^2}{d\phi^2} + 1/4}{\cosh^2\rho} - \frac{1}{4} \right). \tag{6.61}$$

Következő lépésként megmutatjuk, hogy a kvadratikus Casimir sajátértékproblémája egy egzaktul megoldható szórásproblémára vezet. Ehhez tisztáznunk kell az $so(2,1)$ Lie-algebra unitér ábrázolásainak természetét. A kommutációs relációk alapján látható, hogy az $so(2,1)$ algebra egy előjeltől eltekintve épp a jólismert $so(3)$ algebra, melynek az ábrázoláselméletét már alaposan ismerjük. A két algebra közötti hasonlatosság alapján a szimultán diagonalizálható C és J_3 operátorok közös sajátfüggvényeit a

$$T^{-1}CY|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle, \quad T^{-1}J_3T|jm\rangle = m|jm\rangle \tag{6.62}$$

egyenletekkel definiáljuk, ahol az m és j lehetséges értékeivel még adósak maradtunk. Definiáljuk a $(\rho\ \phi)$ reprezentációban a megfelelő sajátfüggvényeket a $\langle\rho\phi|jm\rangle \equiv u_{jm}(\rho,\phi) = R_{jm}(\rho)e^{im\phi}$ módon! Ekkor a (6.61) operátor sajátértékegyenletéből kapjuk, hogy

$$\left(-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{m^2 - 1/4}{\cosh^2\rho} \right) R_{jm}(\rho) = -\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 R_{jm}(\rho). \tag{6.63}$$

Melyek a megengedett j és m értékek? Az $SO(3,1)$ csoport ábrázoláselmélete alapján azt várjuk, hogy a szórásállapotokat egy bizonyos folytonosan változó $j \in \mathbf{C}$ *komplex* számmal jellemezhetjük. Unitér ábrázolásokat keresünk, ez azt jelenti hogy a C és J_3 operátorok ábrázolási mátrixelemei hermitikusak. A $j(j+1)$ szám tehát *valós* kell, hogy legyen. A $j(j+1) \in \mathbf{R}$ feltételből $j = a + ib$ behelyettesítésével kapjuk, hogy $j = -\frac{1}{2} + if(k)$, ahol az $SO(3,1)$ esetből okulva most feltesszük, hogy f a folytonosan változó k hullámszám függvénye. Legyen $f(k) \equiv k$! Ekkor $j = -\frac{1}{2} + ik$ értékét (6.63)-be helyettesítve a

$$\left(-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{m^2 - 1/4}{\cosh^2\rho} \right) R_{jm}(\rho) = k^2 R_{jm}(\rho), \tag{6.64}$$

Schrödinger egyenletet kapjuk ($E \equiv k^2$). Ez egy $V_m(\rho) = -(m^2 - 1/4)/\cosh^2\rho$ Pöschl-Teller potenciálon történő egy dimenziós szórásproblémát ír le. Láthatjuk azt is, hogy a Hamilton operátor $H = -(T^{-1}CT + \frac{1}{4})$.

Adósok vagyunk még az m lehetséges értékeivel. Alaposabb analizis segítségével megmutatható, hogy $m = m_0, m_0 \pm 1, m_0 \pm 2, \ldots$ ahol $0 \leq m_0 < 1$. Az $m_0 = 0$ és $m_0 = 1/2$ választás az $so(2,1)$ algebra jólismert ábrázolásait adja. m_0 többi lehetséges értéke az az un. projektív ábrázolások megjelenésére vezet. Ezek az $SO(2,1)$ univerzális fedőcsoportjának *egyértékű* ábrázolásait. A helyzet hasonló az $SO(3)$ csoporthoz. Ott a j félegész értékei az $SO(3)$ többértékű ábrázolásait adták. Ezek az ábrázolások azonban az univerzális fedőcsoport (az $SU(2)$) egyértékű ábrázolásainak feleltek meg. Mindebből azt tanultuk, hogy a projektív ábrázolások segítségével *tetszőleges* valós m potenciálerősséggel jellemzett Pöschl-Teller potenciálon történő szórást csoportelméleti módon tárgyalhatunk.

A (6.64) Schrödinger egyenlet megoldása ismert. Mivel a későbbiekben a szórásmátrix funkcionális alakját tisztán csoportelméleti megfontolások segítségével úgyis levezetjük, ezért itt csak a végeredményeket idézzük.

Hosszadalmas számolással leellenőrizhetjük, hogy egyenletünk két lineárisan független megoldása az alábbi alakú.

$$F_1 = (\cosh\rho)^{\frac{1}{2}-m} F(\frac{1}{2} - m - ik, 1 - m, \frac{1 + i\sinh\rho}{2}), \qquad (6.65a)$$

$$F_2 = (\cosh\rho)^{\frac{1}{2}-m} \left(\frac{1}{2}(1 + i\sinh\rho)\right)^m F(\frac{1}{2} - ik, \frac{1}{2} + ik, 1 + m, \frac{1 + i\sinh\rho}{2}), \qquad (6.65b)$$

ahol F a hipergeometrikus függvény. A hipergeometrikus függvény ismert aszimptotikus viselkedése alapján

$$\lim_{\rho \mapsto \pm\infty} F_j(\rho) = A_{j\pm} e^{ik\rho} + B_{j\pm} e^{-ik\rho}. \quad j = 1, 2 \qquad (6.66)$$

A reflexiós és transzmissziós koefficenseket pedig az alábbi képletek segítségével számíthatjuk.

$$R = \frac{B_{1+}B_{2-} - B_{1-}B_{2+}}{A_{2-}B_{1+} - A_{1-}B_{2+}}, \quad T = \frac{A_{2+}B_{1+} - A_{1+}B_{2+}}{A_{2-}B_{1+} - A_{1-}B_{2+}}. \qquad (6.67)$$

Az aszimptotikus viselkedés meghatározása után, a fenti képletbe helyettesítve kapjuk, hogy

$$T(k, m) = \frac{\sin i\pi k}{\sin\pi(1/2 - m - ik)} Q(k, m),$$

$$R(k,m) = \frac{\sin\pi(1/2-m)}{\sin\pi(1/2-m-ik)}Q(k,m), \tag{6.68a}$$

ahol

$$Q(k,m) = \frac{\Gamma(ik)}{\Gamma(-ik)}\frac{\Gamma(1/2+m-ik)}{\Gamma(1/2+m+ik)}. \tag{6.68b}$$

A $(\sin x + \sin y)(\sin x - \sin y) = \sin(x-y)\sin(x+y)$ képlet segítségével könnyen belátható, hogy $|T|^2 + |R|^2 = 1$ ahogyan annak lennie is kell.

6.2.2 Az Algebrai S matrix

Ebben az alfejezetben megmutatjuk, hogy a (6.68a) reflexiós koefficens funkcionális alakja realizációfüggetlen módon is meghatározható. Ez alatt azt értjük, hogy már az $SO(2,1)$ csoport realizációfüggetlen tulajdonságai is lehetővé teszik az S mátrix (1D-ben a reflexiós koefficens) néhány tetszőleges függvény erejéig történő meghatározását.

A szóráselmélet alapvető feladata : a hullámfüggvány aszimptotikus viselkedéséből leolvasni a szórást jellemző S matrixot. Ha ezt a feladatot tisztán csoportelméleti módszerek segítségével szeretnénk végrehajtani, akkor tudnunk kell csoportelméleti módszerekkel jellemezni a hullámfüggvény aszimptotikus alakját.

A következőkben bevezetjük az aszimptotikus algebra fogalmát. Tudjuk, hogy az $SO(2,1)$ csoportnak az $SO(2)$ kétdimenziós forgáscsoport a részcsoportja. $SO(2)$-t a J_3 generátor generálja. Az $SO(2,1)$ kommutációs relációk alakja

$$[J_1, J_2] = -iJ_3, \quad [J_2, J_3] = iJ_1, \quad [J_3, J_1] = iJ_2. \tag{6.69}$$

Egy $SO(2,1)$ dinamikai szimmetriával jellemzett kvantummechanikai rendszer szórásállapotait a $|j,m\rangle$ absztrakt Hilbert-térbeli vektorral repreentálhatjuk, ahol

$$C|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle, \quad J_3|jm\rangle = m|jm\rangle. \tag{6.70}$$

Itt $C = -J_1^2 - J_2^2 + J_3^2$ a kvadratikus Casimir. Az Algebrai Szóráselmélet alapfelteváse az, hogy a szórást jellemző Hamilton operátor a kvadratikus Casimir operátornak valamilyen funkcionálja. Mivel az előző alfejezetből már tudjuk, hogy a szórásállapotokat a $j = -\frac{1}{2} + if$

alaku komplex számok indexelik. Azt is tudjuk , hogy ezek az $SO(2,1)$ nemkompakt csoport egy unitér ábrázolását adják. Itt f egy *valós szám*. Mivel a C sajátértékei a $j(j+1) = -\frac{1}{4} - f^2$ valós számok ezért a zavarónak tűnő $\frac{1}{4}$ faktort a C-hez adjuk. A $C + \frac{1}{4}$ operátor folytonos spektruma tehát az f^2 alakú valós számokból áll ahol f indexeli az irreducibilis unitér ábrázolásokat. Ha tehát H a $C + \frac{1}{4}$ mennyiség valamilyen függvénye akkor fltehetően f a szórási energia valamely függvénye! Tegyük fel tehát, hogy

$$H = h(C + 1/4), \quad j = -\frac{1}{2} + if(k). \tag{6.71}$$

Mivel $E = k^2$, $(\hbar = 2m \equiv 1)$, ezért

$$k^2 = h(-f(k)^2). \tag{6.72}$$

Mivel realizációtól függetlenül dolgozunk nem sokat tudunk az $|j,m\rangle \equiv |f,m\rangle$ szórásállapot aszimptotikus alakjáról. Legyen ez $|f,m\rangle^\infty$. Egydimenzióban az aszimptotikus állapotok a be és kifutó síkhullámok. Jelöljük ezeket a $|\pm k,m\rangle^\infty$ vektorokkal, ahol $-$ utal a bejövő és $+$ a kimenő hullámokra. Hogyan lehetne ezeket a vektorokat csoportelméleti szempontból jellemezni?

Ahhoz, hogy ezt kiderítsük, tekintsük a (6.60) generátorok aszimptotikus alakját, azaz legyen $\varrho \to \infty$. A generátorok aszimptotikus alakja tehát (most a T hasonlósági trafóktól eltekintünk)

$$J_\pm{}^\infty = e^{\pm i\phi}(\partial_\rho + (\pm 1/2 - i\partial_\phi)), \quad J_3{}^\infty = -i\partial_\phi. \tag{6.73}$$

Ezek a generátorok az alabbi kommutációs relációkat elégítik ki,

$$[J_+{}^\infty, J_-{}^\infty] = -2J_3{}^\infty, [J_3{}^\infty, J_\pm{}^\infty] = \pm J_\pm{}^\infty \tag{6.74}$$

, ebben a realizációban $|\pm k,m\rangle^\infty = e^{\pm ik\varrho}e^{im\Phi}$. Tehát

$$|j,m\rangle^\infty = A_m|-k,m\rangle^\infty + B_m|k,m\rangle^\infty. \tag{6.75}$$

Ahhoz, hogy a (6.75) egyenletet realizációfüggetlenül le tudjuk írni algebrai módon kellene az $|\pm k,m\rangle^\infty$ állapotokat jellemezni. Ezt megtehetjük ha bevezetjük az un. *kétdimenziós Euklideszi algebrát* , $E(2)$-t. $E(2)$-t a P_1, P_2, és L operátorok generálják, melyek az alábbi relációknak tesznek eleget

$$[P_+, P_-] = 0, \quad [L, P_\pm] = \pm P_\pm, \tag{6.76}$$

ahol $P_\pm = P_1 \pm iP_2$.

A mi konkrét realizációnkban nyilván $P_1 = P_x = -i\partial_x$ és $P_2 = P_y = -i\partial_y$ ahol $x = \varrho\cos\phi$ és $y = \varrho\sin\phi$, továbbá $L = xP_y - yP_x$.

Ahhoz, hogy az $E(2)$ algebra ábrázolásairól képet alkothassunk, térjünk vissza ismét a konkrét realizációnkhoz! A (ϱ, ϕ) koordinátákkal kifejezve egy $\varrho^{1/2}$-nel történő hasonlósági transzformáció után azt kapjuk, hogy

$$P_\pm = -ie^{\pm i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\varrho} \mp \frac{1}{\varrho}\left(\pm\frac{1}{2} - i\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right), \quad L = -i\frac{\partial}{\partial\phi}. \tag{6.77}$$

Az $E(2)$ Casimir operátor $C' = P_1^2 + P_2^2$ alakja

$$C' = -\frac{\partial^2}{\partial\varrho^2} + \left(-\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - \frac{1}{4}\right)\varrho^{-2}. \tag{6.78}$$

A C', $L = J_3$, operátorok közös sajátfüggvényeim kielégítik a

$$C'|k,m\rangle = k^2|k,m\rangle, \quad L|k,m\rangle = m|k,m\rangle, \tag{6.79}$$

egyenleteket. Ebben a realizációban $|k,m\rangle = v_m^k(\varrho)e^{im\phi}$. Ha k-t $-k$-ra változtatjuk akkor semmi nem változik tehát írható, hogy $|\pm k, m\rangle = v_m^{\pm k}(\varrho)e^{im\phi}$. (A megfelelő differenciálegyenlet vizsgálatával könnyen kideríthető, hogy a megfelelő függvények a $h^\pm_{m-1/2}(k\varrho)$ Hankel függvények.) Legyen most $P_i^\infty = \lim_{\varrho\to\infty} P_i$, ahol $i = 1, 2$. Könnyen megmutatható, hogy

$$P_\pm{}^\infty|k,m\rangle^\infty = k|k,m\rangle^\infty, \quad P_\pm{}^\infty|-k,m\rangle^\infty = -k|-k,m\rangle^\infty. \tag{6.80}$$

A mi realizációnkban

$$P_\pm{}^\infty = -ie^{\pm i\phi}\frac{\partial}{\partial\varrho}, \quad L^\infty = -i\frac{\partial}{\partial\phi}. \tag{6.81}$$

A be és kimenő $|\pm k, m\rangle^\infty$ hullámokat tehát csoportelméleti szempontból úgy tekinthetjük , mint az aszimptotikus $E(2)$ algebra ábrázolásait.

A fenti realizációfüggő megfigyeléseinket most általánosítjuk. Ez az általánosítás már realizációfüggetlen lesz. A fentiekből azt tanultuk, hogy a szórásfeladat algebrai megoldásához kapcsolatot kel találnunk az $E(2)$ és az $SO(2,1)$ csoport algebráinak generátorai között. Ezt a kapcsolatot **Euklideszi kapcsolat**nak nevzzük. Próbáljuk meg a $J_\pm{}^\infty$ és $J_3{}^\infty$ $SO(2,1)$ generátorokat kifejezni a $P_+{}^\infty, P_-{}^\infty L^\infty, L^\infty,{}^2, L^\infty P_+{}^\infty, P_-{}^\infty L^\infty, P_+{}^{\infty 2}, P_-{}^{\infty 2}$ lineáris és kvadratikus kombinációk segítségével! Nyilván $J_3{}^\infty = L^\infty$, ugyanakkor az ábrázolás unataritása miatt $J_+{}^{\infty\dagger} = J_-{}^\infty$ Ahhoz, hogy kielégítsük a (6.74) kommutációs relációk közül a másodikat könnyen belátható, hogy

$$J_+{}^\infty = \alpha P_+{}^\infty + \beta L^\infty P_+{}^\infty, \tag{6.82}$$

ahol α és β k-függő komplex függvények. Továbbá, ahhoz hogy (6.74)-ből az első relációt kielégítsük teljesülnie kell a

$$\beta\beta^* = \frac{1}{k^2}, \quad \alpha\beta^* + \alpha^*\beta + \beta\beta^* = 0, \tag{6.83}$$

egyenleteknek. Ezeknek az egyenleteknek a megoldása

$$\beta = \frac{e^{i\gamma}}{k}, \quad \alpha = \left(-\frac{1}{2} + i\delta\right)\beta, \tag{6.84}$$

ahol γ, δ valós k-tól függő függvények. Könnyen belátható, hogy az aszimptotikus Casimir invariáns alakja

$$C = J_3{}^\infty - J_3{}^{\infty 2} - J_+{}^\infty J_-{}^\infty = -\frac{1}{4} - \delta^2. \tag{6.85}$$

Mivel azt már tudjuk, hogy $C = -\frac{1}{4} - f^2(k)$ ezért azt kapjuk hogy

$$\delta(k) = \pm f(k). \tag{6.86}$$

A legáltalánosabb kapcsolat tehát

$$J_\pm{}^\infty(\pm k) = \frac{e^{i\gamma_\pm(k)}}{\pm k}\left[\left(-\frac{1}{2} \mp if(k)\right)P_+{}^\infty + L^\infty P_+{}^\infty\right]. \tag{6.87}$$

Itt a $\pm k$ jelölés utal arra, hogy a megfelelő operátorokkal a $|\pm k, m\rangle^\infty$ vektorokra kell hatnunk. (A helyzet hasonló a H-atom dinamikai szimmetriájánál találthoz. A generátorokat ott is a Hilbert tér egy rogzített energiájú alterén kellet érteni.) A (6.87) Euklideszi kapcsolat formulájában $\gamma_\pm(k)$ két tetszőleges valós függvény, $f(k)$-t pedig (6.71-72) definiálja. Az eddigiek alapján megmutatható, hogy a mi speciális realizációnkban $f(k) = k$, és $\gamma_\pm(k) = 0$.

Következő feladatunk az algebrai S-mátrix meghatározása. Tujuk már, hogy

$$|j, m\rangle^\infty = A_m|-k, m\rangle^\infty + B_m| = k, m\rangle^\infty. \tag{6.88}$$

Nem nehéz azt sem belátni (az $SO(3)$ csoport algebrájának ábrázolásainak megkonstruálásakor használt érvek $SO(2,1)$ csoportalgebrára valo alkalmazásával) ,hogy

$$\begin{aligned} J_\pm{}^\infty|j, m\rangle^\infty &= \sqrt{(m \mp j)(m \pm j \pm 1)}|j, m \pm 1\rangle^\infty, \\ J_3{}^\infty|j, m\rangle^\infty &= m|j, m\rangle^\infty \end{aligned}. \tag{6.89}$$

Vegyük még ehhez hozzá az $E(2)$ generátorok (6.80) hatását. Hassunk a (6.88) egyenletre *balról* a $J_+{}^\infty$ operátorral kihasználva (6.89)-et, illetve *jobbról* a (6.87) kifejezéssel kihasználva (6.80)-at. Ekkor azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} &\sqrt{(m-j)(m+j+1)}|j, m+1\rangle^\infty \\ &= A_m \frac{e^{-i\gamma_-(k)}}{(-k)} \left[\left(-\frac{1}{2} + if(k)\right)(-k) + (m+1)(-k)\right] |-k, m+1\rangle^\infty \\ &+ B_m \frac{e^{i\gamma_+(k)}}{(-k)} \left[\left(-\frac{1}{2} - if(k)\right)(+k) + (m+1)(+k)\right] |+k, m+1\rangle^\infty \end{aligned}. \tag{6.90}$$

Mivel

$$|j, m+1\rangle^\infty = A_{m+1}|-k, m+1\rangle^\infty + B_{m+1}|k, m+1\rangle^\infty. \tag{6.91}$$

az alábbi rekurziós relációkat kapjuk

$$\begin{aligned} \sqrt{(m-j)(m+j+1)}A_{m+1} &= e^{i\gamma_-(k)}(m + 1/2 + if(k))A_m, \\ \sqrt{(m-j)(m+j+1)}B_{m+1} &= e^{i\gamma_+(k)}(m + 1/2 - if(k))B_m, \end{aligned}. \tag{6.92}$$

Ebből az $R_m = B_m/A_m$ reflexiós együtthatóra az alábbi összefüggést kapjuk

$$R_{m+1}(k) = e^{i[\gamma_+(k)-\gamma_-(k)]}\left(\frac{m+\frac{1}{2}-if(k)}{m+\frac{1}{2}+if(k)}\right)R_m(k). \tag{6.93}$$

Ahhoz, hogy az algebrai S mátrix funkcionális alakját teljes egészében meghatározhassuk egy kis matematikai kitérőt kell tennünk. Meg kell tárgyalnunk ugyanis az előző alfejezetből már ismert un. *projektív* ábrázolások szerepét. Csoportelméleti tanulmányainkból emlékeztetünk arra, hogy az $SO(3)$ forgáscsoport unitér irreducibilis ábrázolásainak meghatározásakor fontos szerepet játszott az $SU(2)$ csoport. Ennek a két csoportnak ugyanaz volt a Lie-algebrája. Az algebra irreducibilis unitér ábrázolásait a $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots$ egész és félegész számok indexelték, ekkor az m értékei a $2j+1$ darab $-j, -j+1, \ldots j$ számokon futottak végig. Jóllehet az algebrák izomorfak voltak a megfelelő Lie-csoportok nem azok. Ennek megfelelően az $SU(2)$ csoport azon unitér irreducibilis ábrázolásai melyeket *félegész* számok indexeltek nem írtak le valódi forgatásokat. Például egy $\frac{1}{2}$ spinü részecske hullámfüggvénye 360 fokos forgatás után előjelet vált. Ez az ábrázolás tehát az $SO(3)$ forgáscsoportnak nem egyértékű ábrázolása. Hasonló a helyzet az $SO(2,1)$ csoporttal is. Ennek a csoportnak az unitér irreducibilis ábrázolásai között is vannak *többértékű* ábrázolások. Részletesebb analízissel megmutatható, hogy itt nem csak kétértékű, hanem "végtelen-sok" értékű ábrázolások is vannak [5]. Ezeket az ábrázolásokat projektív ábrázolásoknak nevezzük. Az előző alfejezetből már tudjuk, hogy ezeket az ábrázolásokat az $0 \leq m_0 < 1$ valós számok indexelik. Az előző alfejezetből ismert hullámfggvény ekkor a $\psi(\varrho, \phi + 2\pi) = e^{2\pi i m_0}\psi(\varrho, \phi)$ tulajdonsággal rendelkezik. A bennünket érdeklő projektív ábrázolások az alábbiak. **1.** Projektív diszkrét ábrázolások, ahol j negatív valós szám és $m = -j - j+1, -j+2, \ldots$. **2.** Projektív folytonos ábrázolások, ahol $j = -\frac{1}{2} + if$, ahol f valós, és $m = m_0, m_0 \pm 1, \ldots$. Az általunk tanulmányozott realizációban $H = -(C + 1/4)$, mivel C sajátértéke $j(j+1)$ ezért az **1.** diszkrét ábrázolások az $E_j = -(j+1/2)^2$ energiájú kötött állapotokat írják le, ahol $j = -m_0, -m_0 - 1, \ldots, -m$, ahol az m_0 az m tört-része. A **2.** szórásállapotokat a $j = -\frac{1}{2} + ik$, és a $m = m_0, m_0 \pm 1, \ldots$ számok indexelik. A Pšchl-Teller potenciálban szereplő m potenciálerősség most tetszőleges valós szám.

Hasonlóan , visszatérve most már a realizációfüggetlen megfontolásainkhoz, a projektív ábrázolások tetszőleges valós m-vel rendelkező potenciáerősségekett írnak le. Ezért a (6.93) rekurziós összefüggés megoldása

$$R_m(k) = e^{i[\gamma_+(k)-\gamma_-(k)]}\left(\frac{\Gamma(m+\frac{1}{2}-if(k))}{\Gamma(m+\frac{1}{2}+if(k))}\right)\Delta(k). \tag{6.94}$$

Láthatóan a $f(k) = k$, és $\gamma_\pm(k) = 0$ választással ez éppen a (6.68a) alakú reflexiós koefficenst adja. A $\Delta(k)$ függvény értékét a csoportelmélet nem rögzíti le. Ezzel az $SO(2,1)$ dinamikai szimmetriával rendelkező egydimenziós szórásproblémák S-mátrixának funkcionális alakját meghatároztuk.

5.3. REFERENCIÁK A 6. FEJEZETHEZ

[1] W. Pauli, Z. Phys. **36** 336 (1926).

[2] V. A. Fock, Z. Phys. **98** 145 (1935).

[3] V. Bargmann, Z. Phys. **99** 576 (1936).

[4] A. Bohm, *Quantum Mechanics*, Springer-Verlag (1993).

[5] V. Bargmann, Ann. of Math. **48** 568 (1947).