

A KVANTUMELMÉLET STATISZTIKUS SOKASÁGA

NOVOBÁTZKY KÁROLY r. tag

Előadta az 1951. február 19-én tartott felolvasó ülésen

A modern tankönyv- és monográfiailrodalom, melynek célja a kvantumelmélet megalapozása és interpretációja, egyértelműen a Born-féle statisztikus értelmezés álláspontjára helyezkedik. Eszerint a kvantumelmélet kijelentései nem egy kiszemelt részecskére vonatkoznak, hanem statisztikai átlagolás eredményei. Meglepő azonban, hogy magának a sokaságnak a megállapításával és az átlagolás módjával az irodalom nem foglalkozik. Ennek a problémának megoldását tűzi ki céljául a jelen dolgozat a nem relativisztikus elmélet keretén belül.

Ismeretes, hogy az anyagi pont mozgását kimerítően leírja a Hamilton—Jacobi-féle parciális differenciálegyenlet. Ha $S(x, y, z, t)$ a hatásfüggvény, $V(x, y, z, t)$ az adott potenciál, m a mozgó pont tömege, akkor az egyenlet a következő:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + V = 0. \quad (1)$$

Az általános megoldás három integrációs konstánst tartalmaz: $S = S(x, y, z, t, a, b, c)$. Átmenetileg úgy gondoljuk, hogy a három állandót numerikusan rögzítettük.

Legyen p a tömegpont impulzusa, $\mathfrak{B} = \frac{p}{m}$ a sebessége. Amint ismeretes, $p = \text{grad } S$, tehát

$$\mathfrak{B} = \frac{1}{m} \text{grad } S(x, y, z, t). \quad (2)$$

Látható, hogy S sebességteret határoz meg, amennyiben a tér minden pontjához adott t időben sebességvektort rendel. Szemléletesen úgy gondolhatjuk tehát, hogy a téren m tömegű pontok halmaza áramlik át, melyet inkohereus folyadéknak tekinthetünk. $\frac{1}{m} S(x, y, z, t)$ játssza a sebességpotenciál szerepét.

A mozgás örvény nélküli tiszta áramlás.

Közelfekvő gondolat, hogy a mozgó pontok halmazát olyan sokaságnak tekintsük, amelyre statisztikát építhetünk. A statisztikai sokaság legjellemzőbb mennyisége a ϱ sűrűség. Sűrűségnek fogjuk nevezni a köbcéntiméterben foglalt tömegpontok számát. ϱ dimenziója tehát cm^{-3} . Az anyagmegmaradás megkívánja a kontinuitás egyenletének fennállását:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \text{div } \varrho \mathfrak{B} = 0. \quad (3)$$

A következőkben igen fontosnak bizonyul az a körülmény, hogy az (1) és (3) főegyenletek variációs elvből adódnak:

$$\delta \int \rho \left\{ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + V \right\} dx dy dz dt. \quad (4)$$

ρ variációja adja az (1) egyenletet, S variációja pedig a (3) kontinuitási egyenletet, ha tekintetbe vesszük (2)-t. Mivel ρ feltétlenül pozitív, legyen $\rho = A^2$, ahol A reális. (4) integranduszához kényelmi okokból még a 2 tényezőt függesztjük, úgy hogy a variációs elv a következő

$$\delta \int L dx dy dz dt = 0,$$

ahol a Lagrange-függvény

$$L = 2A^2 \left\{ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + V \right\}. \quad (5)$$

Lagrange függvénytől két dolgot kell megkövetelnünk. Egyfelől invariánsnak kell lennie, másfelől $L dx dy dz dt$ dimenziója szükségképpen hatásjellegű. Mindkét követelmény teljesül. S és A a nem relativisztikus mechanikában invariáns skalárok, melyeknek dimenziója $g \text{ cm}^2 \text{ sec}^{-1}$, ill. $\text{cm}^{-3/2}$.

A statisztika felépítésének legnagyobb nehézsége S három határozatlan állandójában rejlik. A sebességtér és a rajta végzett átlagolások lényegesen függenek ezek értékeitől. Már pedig a mozgás egyedüli adata a V potenciát és feltétlenül meg kell kívánnunk, hogy tisztán ez határozza meg az átlagértékeket. Az egyedüli kivezető út, hogy nem általános, hanem reguláris megoldásokat kívánnunk. Differenciálegyenletek reguláris megoldásai általában nem tartalmaznak határozatlan állandókat.

Érdekes, hogy itt a regularitás követelménye belső szükségletből fakad és nem önkényes hozzátoldás, mint a Schrödinger-féle elméletben. Találónan idézhető ezen a helyen Joosnak szép kijelentése, hogy a kvantummechanika az integrációs állandók nélküli mechanika.

A klasszikus mechanika azonban általánosságban nem tűri meg a ρ sűrűség regularitását. Gondoljunk pl. az X tengelyben rezgő lineáris oszcillátorra. Ha a az amplitudót, ω a körfrekvenciát és E az energiát jelenti, akkor

$$S = \frac{E}{\omega} \left(\arcsin \frac{x}{a} + \frac{x}{a} \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} \right).$$

Az $S = \text{konst.}$ felületek az X tengelyre merőlegesek, a pontthalmaz áramlása az X tengellyel párhuzamosan történik. Az a pontmennyiség, mely másodpercenként egy áramcső f keresztmetszetén átmegy, az $f \mathfrak{B}_x$ térfogatot tölti be. A sebesség az amplitudó-határfelületek felé fokozatosan csökken és ott zérussá válik. A pontsokaság egyre kisebb teret foglal el, a sűrűség nő és a határfelületeken végtelenné válik. Nagyon sok mozgást ismerünk, melynek fordulópontja van, ahol tehát ugyanez következik be.

Ha nem akarjuk elejteni a Jacobi-féle statisztikus sokaság gondolatát, nincs más hátra, mint a klasszikus mechanika megváltoztatása. Mikor *Schrödinger* annak idején erre a lépésre elhatározta magát, optikai analógiákat használt fel útjelzőként. Módszere nagyszerű eredményekre vezetett, de avval a nehézséggel járt, hogy a ψ hullámfüggvény fizikai jelentése nem adódott ki és hosszabb ideig függőben maradt. Itt nem akarjuk elhagyni a tiszta mechanika területét, hogy ezt a nehézséget elkerüljük. A vezérlő elv abban áll, hogy az (5) Lagrange-függvényt megengedett módon általánosítjuk. Figyelemreméltó, hogy ez az általánosítás nagy mértékben egyértelmű és a feltevések minimumával érhető el.

Világos, hogy (5) zárójeles kifejezésnek első négy tagja nem változtatható meg, mert különben S variációja nem szolgáltatja többé a kontinuitás egyenletét. Az egyedül megengedett változás egy T toldaléktag hozzáadásában áll, mely az említett okból nem tartalmazhatja S -et. T felépítésére rendelkezésre áll m , A és az A -ból alkotható differenciálvariánsok. Legegyszerűbb $(\text{grad } A)^2$, mert csak másodrendű téregyenletekre vezet. Ennélfogva

$$T = A^{n_1} (\text{grad } A)^{2n_2} m^{n_3}. \quad (6)$$

T dimenziója szükségképp $g \text{ cm}^{-1} \text{ sec}^{-2}$, hogy $dx dy dz dt$ -vel szorozva a hatás dimenzióját adja. Mivel $[A] = \text{cm}^{-3/2}$, $(\text{grad } A)^2 = \text{cm}^{-5}$, $[m] = g$, látható, hogy (6) jobboldalán hiányzik az idődimenzió, mely a baloldalon fellép. Elkerülhetetlenül szükséges, hogy a jobboldalt egy univerzális konstans tényezővel kiegészítsük. Nagyon sok ilyen konstans ismertünk, de mindegyiknek határozottan körülírt jelentése van és nem illik ide. Kivétel a Planck-féle h . Más választást nem lehet megindokolni. h választásával (6) egyenlet dimenziókban felírva a következő:

$$g \text{ cm}^{-1} \text{ sec}^{-2} = (g \text{ cm}^2 \text{ sec}^{-2})^{n_1} \text{cm}^{-3/2 n_2} \text{cm}^{-5 n_2} g^{n_3}.$$

Az összehasonlítás rögtön megadja, hogy

$$n_1 = 2, n_3 = -1, \frac{3}{2} n_1 + 5 n_2 = 5.$$

Ha teljesen valószínűtlen hatványokat kizárunk, akkor az utolsó egyenlet megoldása $n_1 = 0, n_2 = 1$. Így tehát

$$T = \frac{h^2}{m} \left\{ \left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial A}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial A}{\partial z} \right)^2 \right\} \quad (7)$$

és a Lagrange-függvény

$$L = 2A^2 \left\{ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + V \right\} + \frac{h^2}{m} \left[\left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial A}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial A}{\partial z} \right)^2 \right]. \quad (8)$$

Az eredő Euler-egyenletek a következők:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} + \frac{1}{m} \left(\frac{\partial A^2}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial A^2}{\partial y} \frac{\partial S}{\partial y} + \frac{\partial A^2}{\partial z} \frac{\partial S}{\partial z} \right) + \frac{1}{m} A^2 \Delta S. \quad (10)$$

(10) a kontinuitás egyenlete, (9) a Hamilton—Jacobi-féle mozgásegyenlet. Az egyedüli különbség (1)-gyel szemben az, hogy a külső erők V potenciáljához a pontsűrűségtől függő $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}$ potenciál járul hozzá. A fundamentális mozgástörvények változatlanok maradtak. Ezeket (9) karakterisztikus egyenletei fejezik ki:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x}, \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial S}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} \left(V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A} \right),$$

vagy $\frac{\partial S}{\partial x}$ eliminálása után

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = - \frac{\partial}{\partial x} \left(V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A} \right).$$

Igaz marad, hogy tömeg és gyorsulás szorzata a ható erővel egyenlő, csak az erő maga változott meg. Míg fizikai testeknél V gradienséhez a feszültségek divergenciája járul hozzá, addig itt sűrűségpotenciálból származnak új erők.

Kérdés már most, hogy az így általánosított mechanika megenged-e reguláris megoldásokat, tényleg integrációs állandók nélküli mechanikát nyertünk-e. A felelet igenlő. Foglalkozunk össze A és S ismeretlen függvényeket a következő komplex függvényné:

$$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar} S}. \quad (11)$$

Ekkor a (9) mozgásegyenlet és a (10) kontinuitási egyenlet összefoglalható a jól ismert Schrödinger-féle egyenletben:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi = 0. \quad (12)$$

Ha az itt jelzett differenciálásokat ψ -nek (11)-beli alakján hajtjuk végre és az egyenlet reális és imaginárius részét külön-külön 0-sal tesszük egyenlővé, éppen a (9) és (10) egyenleteket nyerjük. A Schrödinger-egyenletről pedig köztudomású, hogy reguláris megoldásokat megenged.

Minden külön megfontolás nélkül kiadódik a Schrödinger-féle stacionárius egyenlet is. Ha ugyanis V nem függ t -től, akkor a klasszikus mechanika szerint $S = -Et + S_0(x, y, z)$, ahol E a mozgás energiaállandója. A megfelelő ψ -t (12)-be helyettesítve, az első tag $-E\psi$ -vé válik. A pontsűrűség

$$\varrho = A^2 = \psi^* \psi. \quad (13)$$

A (10) alatti kontinuitási egyenlet is átmegy a jól ismert alakba

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) + \operatorname{div} \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \psi^*), \quad (14)$$

ha a (11)-ből számított $S = \frac{\hbar}{2i} \lg \frac{\psi}{\psi^*}$ kifejezést helyettesítjük beléje. Világos, hogy a statisztikus sokaság egy adott helyén valamely pont megtalálásának valószínűsége annál nagyobb, minél nagyobb az illető helyen a pontsűrűség. $\psi^* \psi$ -t tehát nem kell külön axiomatikusan találati valószínűségnek definiálni, ez az értelme magától értetődő. Hasonlóan vagyunk (14) egyenlet második tagjával, mely valószínűségi áramnak adódik.

A (12) Schrödinger-egyenlet lineáris és homogén, tehát operátoregyenletként fogható fel. Az összehasonlítás (1)-gyel megmutatja a mennyiségek és operátorok kapcsolatát:

$$\frac{\partial S}{\partial t} \sim \frac{\hbar}{i} \frac{s}{st}, \quad \frac{\partial S}{\partial x} \sim \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \text{ stb. } V \sim V!$$

Az eddigiek alapján megállapíthatjuk, hogy a Schrödinger-egyenlet nem talán egy részecskének, hanem a statisztikus sokaságnak klasszikus mozgását írja le. A következő fontos kérdés, hogyan kell ezen a sokaságon középértékelni. Valamely $F(x, p)$ fázisfüggvénynek klasszikus középértéke tudvalevőleg

$$\bar{F} = \frac{\int \varrho F dt}{\int \varrho dt}, \text{ vagy ha a nevezőt 1-re normáljuk}$$

$$\bar{F} = \int \varrho F dt = \int \psi^* \psi F dt. \quad (15)$$

Az átlagolásnak ez a módja itt teljesen hamis eredményekre vezetne. Az ok kézenfekvő. Hiszen a $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}$ sűrűségi potenciálnak hozzáadása a külső erők V potenciáljához teljesen megváltoztatja, mondhatnók, meghamisítja az erőviszonyokat. Vizsgáljuk pl. a lineáris oszcillátor egyik sajátfüggvényét:

$$\psi_n = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \left(\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right).$$

H_n Hermite-féle polinom. Mivel $e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$ faktora reális, S csak a $-E_n t$ tagból áll. A $p_x = \frac{\partial S}{\partial x}$ impulzus eltűnik, a statisztikus ponthalmaz mozdulatlan,

merev sokaság, melynek sűrűsége jobbra-balra gyorsan zérusra csökken. Ez az élettelen ponthalmaz szolgáljon statisztikai sokaságként a vibráló oszcillátor számára. A p_x impulzusnak és bármely hatványának középértéke a közönséges módon képezve természetesen zérus volna, holott az oszcillátorra $\bar{p}_x^2$ már a puszta szemlélet alapján nem az. Világos, hogy a mozgató erő megváltoztatása az átlagolás módjának megváltoztatását kívánja. Ennek a módnak megállapítása egyértelműen folyik abból az axiómából, mely szerint minden

fizikai mennyiség csak saját értékeinek egyikét veheti fel. Ha tehát $F(x, p)$ mennyiség operátoralakja Ω , akkor

$$\Omega \varphi_n = \lambda_n \varphi_n \quad (16)$$

egyenletnek λ_n értékei szolgáltatják az F mennyiség lehetséges értékeit. φ_n olyan sokaságot ír le, melyben minden egyes tömegpontnak F -mennyisége (pl. impulzusa) egyenlő λ_n -nel. Most felhasználhatjuk a sokaságoknak azt a rendkívüli előnyét, hogy egyetlen ψ függvénnyel írhatók le. Fejtsük az adott ψ -t a φ_n -ek szerint sorba:

$$\psi = \sum a_k \varphi_k. \quad (17)$$

Első pillanatban azt hihetnők, hogy a_k fejezi ki azt a mértéket, mellyel a φ_k által jellemzett sokaság a ψ sokaságban képviselve van. De ha meggondoljuk, hogy a_k általában komplex és hogy nem az a_k -ra, hanem az $|a_k|^2$ -ekre érvényes, hogy $\sum |a_k|^2 = 1$, akkor $|a_k|^2$ -et fogjuk a képviselő mértékének tekinteni. φ_k -yal együtt természetesen λ_k is $|a_k|^2$ mértékben (vagy súllyal) van képviselve a ψ sokaságban. F mennyiség középértéke a ψ sokaságban tehát

$$\bar{F} = \sum |a_k|^2 \lambda_k. \quad (18)$$

Alkalmazzuk a (17) egyenletre az Ω operátort, akkor $\Omega \psi = \sum a_k \lambda_k \varphi_k$. (17) alapján érvényes még $\psi^* = \sum a_k^* \varphi_k^*$. Szorozzuk össze a két utolsó egyenletet és integráljunk a konfigurációs térre:

$$\int \psi^* \Omega \psi dt = \sum |a_k|^2 \lambda_k = \bar{F}.$$

Tisztán látható, hogy a középértékelés kvantumelméleti módja logikai folyamán (16)-nak.

Igen érdekes a vázolt statisztikus kvantumelmélet alkalmazása az alagút-effektusra. Gondoljunk a kezdőpontban az X tengelyre merőleges potenciál-küszöböt, melynek átlépése U munkát követel. Essék erre a falra az X tengellyel párhuzamosan mozgó tömegpontok árama, tömegpontonként E kinetikai energiával. Jól ismeretes, hogy akkor a negatív x -ek terében a Schrödinger-egyenlet $\mathcal{A}\psi_1 + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_1 = 0$ és a pozitív féltérben $\mathcal{A}\psi_2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi_2 = 0$.

A megoldás

$$\psi_1 = e^{i\alpha x} + a e^{-i\alpha x}, \quad \psi_2 = b e^{\beta x}, \quad \text{ahol } \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}, \quad \beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U - E)}.$$

α mindenképpen reális, β akkor, ha $U > E$. Ezt az esetet szemeljük ki. a és b komplex állandók. Itt csak az alagút-effektus paradoxonjával akarunk foglalkozni. A pozitív térrészbe átjutott tömegpontok energiája $E = \frac{p^2}{2m} + U$, tehát p^2 negatív, a p impulzus imaginárius, ami képtelenség.

A magyarázatot csak a statisztikus sokaság adhatja meg, mely minden izében klasszikus. Legyen a b együttható trigonometrikus alakja $b = r e^{i\varphi}$, ahol

r és φ ugyancsak állandó. Akkor $\psi_2 = e^{\beta x} r e^{i\varphi}$. Látható, hogy $A_2 = e^{\beta x} r$ és $S_2 = \hbar \varphi = \text{konst.}$, tehát $p_x = \frac{\partial S_2}{\partial x} = 0$. A statisztikus sokaság nyugvó, merev pontthalmaz, akárcsak az oszcillátoré. Sűrűsége $\rho = A_2^2 = e^{2\beta x} r^2$. Világos, hogy β négyzetgyökös kifejezését negatív előjellel kell venni, mikor is a sűrűség a potenciálkülösöbttől számított távolsággal exponenciálisan csökken. A fontos az, hogy a sokaság tömegpontjainak kinetikai energiája zérus, $\frac{\Delta A_2}{A_2}$ pedig pozitív konstans: β^2 . A (9) mozgásegyenlet, melyben $\frac{\partial S}{\partial t} = -E$, most így irandó

$$-E + U - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A_2}{A_2} = 0 \text{ vagy } E = U - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A_2}{A_2},$$

ami nyilván azonosság. A kinetikai energia egyáltalán nem negatív, hanem zérus, a reális energiaegyenleget pedig a sűrűségi potenciál biztosítja. Könnyen kimutatható, hogy a tömegpont rejtélyes felemelését a magasabb U energiaszintre ugyancsak a sűrűségi potenciál végzi.

Az eddigiekből kiviláglik, hogy a nem relativisztikus kvantumelmélet azonnal elveszti a klasszikustól elütő, sok tekintetben misztikus jellegét, ha a statisztikus sokaság alapján tárgyaljuk.

*Budapesti Eötvös Loránd Tudományegyetem
Fizikai Intézete.*