$\sqrt{-1}$, avagy a hullámfüggvény fázisa

P. A. Horváthy

Laboratoire de Mathématiques et de Physique Théorique Université de Tours
Parc de Grandmont; F-37 200 TOURS (France)
e-mail: horvathy@univ-tours.fr

Kivonat

A harmonikus oszcillátor hullámfüggvényének fázisa félperiódusonként $-\pi/2$-vel ugrik. Szemiklasszikus közelítéssel az eredmény tetszőleges rendszerre kitejeszthető.

1 Huszonhat év után

Közelgetek hát újra, kósza árnyak
kik hajdan már feltűntetek nekem.
Ezúttal vajha megragadhatnálak?
Ily próbára alkalmas még szivem?
(Goethe: Faust)

Megtörténik, hogy egy probléma ,,*ostinato*"-szerűen kíséri végig az ember életét: fiatal korunkban beléjük akadunk, [valamennyire] megoldjuk, majd elfelejtjük őket. Aztán évek múltán újra felbukkannak. Egy ilyenről számolok itt be.

Tavaly az ,,egydimenziós ország", Chile déli fertályába hívtak konferenciára. Kocsival jöttek értem a Santiago-i szállodába: hosszú nap, 900 km-es autóút állt előttünk. – *Huszonöt éve már találkoztunk!* – nyújtotta a kezét Marcelo és már mesélte is: – ,,*Észrevettem, hogy* $\sqrt{-1} = i$! *– dicsekedtél a marseille-i intézeti könyvtárban. – És mit kezdesz vele? – tamáskodtam. – Publikálom! – vágtad rá!* " – kuncogott Marcelo.

Történetében magamra ismertem: így volt!

78 októberében érkeztem Marseillebe, friss egyetemi doktorimmal a zsebemben. Professzorom, Jean-Marie Souriau, a geometriai kvantálás módszerének megalkotója, a hullámfüggvény fáziskorrekcióról írt, terjedelmes cikkét [1] adta a kezembe első olvasmánynak. Kemény differenciálgeometria; másnapra már olyan volt a fejem, mint a méhkas, zümmögött benne a sok szimplektikus kohomológia. Annyit azért sikerült kihámoznom, hogy ,,*Feynman oszcillátor - propagátora csak az első fél-periódusban helyes; utána – s minden további félperiódus után újra – a fázis* $-\pi/2$*-vel ugrik*".

Hogy lehetne ezt emberi ésszel megérteni? – tűnődtem. Feynman könyvébe [2] beleolvasva, láttam, hogy egy végtelen szorzat négyzetgyökét kell meghatározni. Az első félperiódusban valamennyi faktor pozitív, és ekkor Feynman formuláját kapjuk. N félperiódus eltelte után (de $(N+1)$

előtt) azonban, a fenti szorzat első N faktora negatívvá válik, s ezek négyzetgyökei rendre, összesen N-szer,

$$\frac{1}{\sqrt{-1}} = -i = e^{-i\frac{\pi}{2}}$$

-vel szorozzák a propagátort. Ettől eltekintve, minden úgy megy, mint előtte!

A dolog nyitja tehát valóban a $\sqrt{-1}$ volt, és Marcelo is jól emlékezett: észrevételemet publikáltam [3]. De akkori cikkem csak a jéghegy csúcsa: amit innen-onnan hozzáolvastam s megértettem, az jobbára kéziratban maradt. Ezt az ,,adósságot" törlesztem most.

Mint alább látni fogjuk, a probléma összefügg azzal a kérdéssel: *mennyiben minimális a klasszikus mozgás hatása*? Intuitíve [4], a hamiltoni hatás egy, az ,,összes lehetséges görbe alkotta végtelen dimenziós felületen" definiált függvény. A variációszámítás valójában differenciálszámítás ezen a felületen; *Hamilton elve* azt mondja, hogy a klasszikus mozgás az, amelyre a hatás első ,,deriváltja" (azaz az első variáció) eltűnik [5]. Hogy ez minimum-e vagy se, azt (jó esetben) a második variáció dönti el. Utóbbi egy kvadratikus forma. Ha minden sajátérték pozitív, akkor a hatás minimum, de ha van negatív sajátérték, akkor csak nyeregpont.

Hasonló eredményt kapunk általános mechanikai rendszerre szemiklasszikus approximációval.

Mi mindennek a fizikai következménye? Klasszikus mechanikában semmi, — de kvantum mechanikában épp a fenti fázisugrás! A megfigyelhetőség kérdése optikai analógiákhoz vezet [6].

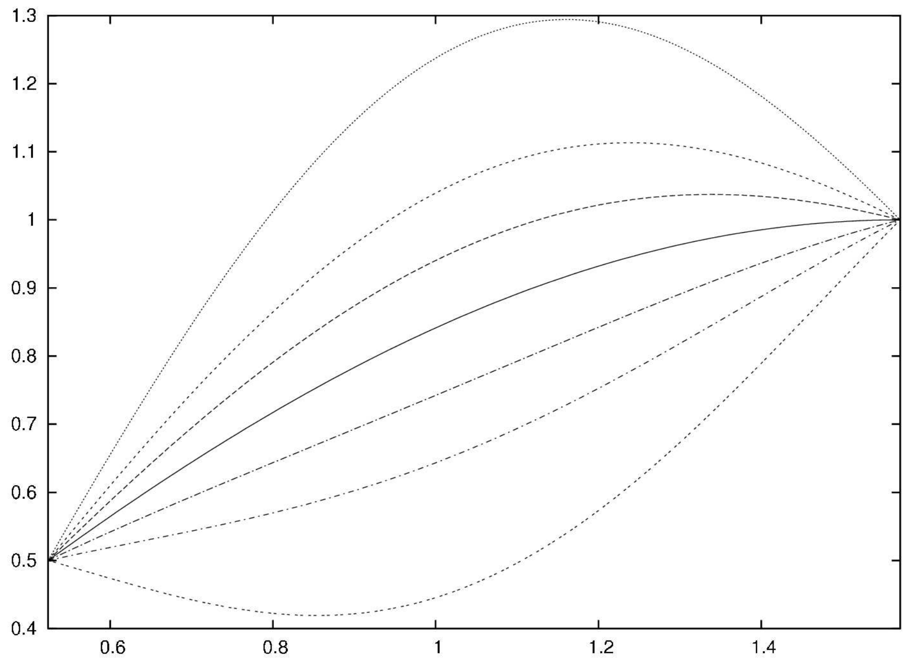
Jegyezzük meg, hogy a hullámfüggvény fázis-korrekciója Feynman integráltól függetlenül is tanulmányozható [7, 8]; ezért is szokásos Maszlov-féle korrekcióról beszélni.

2 Feynman oszcillátor propagátora [2]

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk előbb egy egydimenziós problémát. Legyen x_1 és x_2 két pont és legyen $T > 0$. Az x_1-ből T idő alatt x_2-be menő klasszikus mozgást Hamilton nyomán a *legkisebb hatás elve* [5] határozza meg. Tekintsük ehhez az összes olyan $\gamma(t)$ görbét, melyre $\gamma(0) = x_1$ és $\gamma(T) = x_2$. A határfeltételeket kielégítő pályák összességét jelölje $\mathcal{P}$. A hatás ekkor egy $\mathcal{P}$-n definiált függvény:

$$S(\gamma) = \int_0^T L(\gamma(t), \dot{\gamma}(t))dt, \tag{2.1}$$

ahol $L(x, \dot{x})$ a rendszer Lagrange függvénye. A *legkisebb hatás elve* szerint a a klasszikus mozgás az a $\bar{\gamma}$, melyre a S minimális [5].



<u>1. ábra</u> *Az x_1 és x_2 pontokat T idő alatt összekötő pályák egy „végtelen dimenziós felületetet" alkotnak. A hamiltoni hatás egy függvény ezen a felületen, melynek a klasszikus mozgás kritikus „pontja".*

Kivételes esetektől (l. alább) eltekintve, a kiszemelt pontokat adott idő alatt *egyetlen klasszikus pálya* köti össze s ezen mozog a részecske. De kvantummechanikában más a helyzet! A részecske nem egyetlen, hanem *minden, x_1-ből induló és T idő múlva x_2-be érkező görbén megy egyszerre!* Annak az „amplitúdója" [az amplitúdó abszolút értékének négyzete, $|\psi|^2$, a valószínűség], hogy a részecske a $t=0$ időpillanatban az x_1-ben legyen, $\psi(x_1)$. T idő elteltével, az x_2-beli $\psi_T(x_2)$ amplitúdót pedig úgy kapjuk, hogy a x_1-beli amplitúdót megszorozzuk az x_1-ből x_2-be történő átmenet $K(x_2,T|x_1,0)$ propagátorával, majd az eredményt az összes lehetséges indulási pontra összegezzük. A hullámfüggvény időfejlődése tehát:

$$U_T\psi(x_2)\equiv\psi_T(x_2)=\int_{-\infty}^{\infty}K(x_2,T|x_1,0)\psi(x_1)dx_1, \tag{2.2}$$

ahol a propagátor Feynman szerint a $\exp\left[\frac{i}{\hbar}S(\gamma)\right]$ „Dirac-faktor" „összes görbére vett integrálja":

$$K(x_2,T|x_1,0)=\int_{\mathcal{P}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}S(\gamma)\right]\mathcal{D}\gamma. \tag{2.3}$$

De mi itt a $\mathcal{D}\gamma$ integrációs mérték? Ez a dolog neheze, mely matematikailag még most sincs kielégítően megválaszolva de, – a matematika és fizika közti különbség illusztrációjaként, – néha mégis kiszámolható!

Tekintsünk egy tetszőleges, a határfeltételeket kielégítő γ görbét és bontsuk fel azt a klasszikus pálya és egy „variáció" összegére,

$$\gamma(t)=\bar{\gamma}(t)+\eta(t),\qquad \text{ahol}\qquad \eta(0)=\eta(T)=0, \tag{2.4}$$

hiszen a végpontok rögzítettek. Az oszcillátor Lagrange függvénye

$$L = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2), \tag{2.5}$$

s ezért a γ menti hatás:

$$S(\gamma) = \int_0^T \tfrac{1}{2}m(\dot{\bar{\gamma}}^2 - \omega^2\bar{\gamma}^2)dt + m\int_0^T (\dot{\bar{\gamma}}\,\dot{\eta} - \omega^2\bar{\gamma}\,\eta)dt + \tfrac{1}{2}m\int_0^T(\dot{\eta}^2 - \omega^2\eta^2)dt. \tag{2.6}$$

Az első tag a klasszikus trajektória menti hatás, $S(\bar{\gamma})$. Oszcillátor esetén:

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \qquad \Rightarrow \qquad x(t) = A\sin\omega t + B\cos\omega t,$$

ahol az A és B konstansokat a határfeltételek határozzák meg:

$$B = x_1 \qquad \text{és} \qquad A = \frac{x_2 - x_1\cos\omega T}{\sin\omega T},$$

feltéve, hogy $\sin\omega T \neq 0$, azaz ha $\omega T \neq N\pi$. Az adott határfeltételeket tehát egyetlen klasszikus pálya elégíti ki: *ha T nem a félperiódus egész számú többszöröse,*

$$T \neq N \times \frac{\tau}{2}, \qquad \tau = \frac{2\pi}{\omega}, \tag{2.7}$$

akkor pontosan egy klasszikus mozgás indul x_1-ből és érkezik T idő múlva x_2-be. Az erre számított hatás:

$$S(\bar{\gamma}) = \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left((x_1^2 + x_2^2)\cos\omega T - 2x_1x_2\right). \tag{2.8}$$

(2.6)-beli kifejtésünkre visszatérve, a középső tagban parciálisan integrálva,

$$\int_0^T (\dot{\bar{\gamma}}\,\dot{\eta} - \omega^2\bar{\gamma}\,\eta)dt = -\int_0^T (\ddot{\bar{\gamma}} + \omega^2\bar{\gamma})\,\eta\,dt = 0,$$

ugyanis $\bar{\gamma}$ kielégíti a klasszikus $\ddot{x} = -\omega^2 x$ mozgásegyenletet. Ez a tag tehát nulla s ezért a propagátor végül:

$$K(x_2, T|x_1, 0) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}S(\bar{\gamma})\right] \times F(T), \tag{2.9}$$

ahol a „redukált propagator”, $F(T)$, egy, a variációkra számított pályaintegrál:

$$F(T) = \int \exp\left\{\frac{im}{2\hbar}\int_0^T \left[(\dot{\eta}^2 - \omega^2\eta^2\right] dt\right\}\mathcal{D}\eta. \tag{2.10}$$

Szép-szép, de ettől még nincs az integrál kiszámítva ! Mert mi az, hogy „$\mathcal{D}\eta$”?! Ehhez Feynman a (periódikus) variációt Fourier-sorba fejti,

$$\eta(t) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \sin[k\frac{\pi}{T}t] \quad \Rightarrow \quad \int_0^T \eta^2 dt = \frac{T}{2}\sum_k a_k^2, \quad \int_0^T \dot{\eta}^2 dt = \frac{T}{2}\sum_k (\frac{k\pi}{T})^2 a_k^2, \tag{2.11}$$

majd azt mondja: a pályákat az a_k Fourier-együtthatók meghatározzák, integráljunk ezért a pályák helyett az utóbbiakra:

$$F(T) = \lim_{n\to\infty} \mathcal{J}\int_{-\infty}^{\infty}\dots\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{\sum_{k=1}^{n} i\frac{\lambda_k}{2\hbar}a_k^2\right\} \times da_1 \dots da_n, \tag{2.12}$$

ahol

$$\lambda_k = m\left((\frac{\pi k}{T})^2 - \omega^2 \right) \tag{2.13}$$

és $\mathcal{J}$ a $\mathcal{P} \to \Big\{\text{Fourier együtthatók}\Big\}$ lineáris transzformáció Jacobi-faktora. Jegyezzük meg, hogy $\mathcal{J}$ az oszcillátor adataitól (ω, m) de még $\hbar$-tól is független. Az integrálok kiszámíthatóak:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[i\frac{\lambda}{2}x^2 \right] dx = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}}\, e^{i\frac{\pi}{4}}, \tag{2.14}$$

(2.12)-ben az exponensbeli összegből szorzat lesz, s végül:

$$F(T) = \lim_{n\to\infty} C_n \left(\prod_{k=1}^{n} \lambda_k \right)^{-1/2}, \tag{2.15}$$

ahol C_n a különböző (külön-külön divergens) faktorok együttese. A sajátértékek szorzata két tényezőre bontható:

$$\prod_{k=1}^{n} \lambda_k = \prod_{k=1}^{n} m\frac{k^2\pi^2}{T^2} \times \prod_{k=1}^{n} \Big(1 - \frac{\omega^2 T^2}{k^2\pi^2}\Big). \tag{2.16}$$

De Euler formulája szerint:

$$\prod_{k=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{k^2\pi^2} \right) = \frac{\sin x}{x}, \tag{2.17}$$

s így

$$F(T) = C\sqrt{\frac{\omega T}{\sin \omega T}},$$

ahol a C az összes, ω-tól független faktor szorzata. Vegyük észre, hogy $\omega \to 0$-re szabad részecskét kapunk, melyre, mint tudjuk

$$F^{szabad}(T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}. \tag{2.18}$$

Ez tehát a C értéke. A (2.8) oszcillátor-hatást beírva , az oszcillátor propagátora végül:

$$K(x_2, T|x_1, 0) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \times \exp\left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T}[(x_1^2 + x_2^2)\cos \omega T - 2x_1 x_2] \right\}. \tag{2.19}$$

3 A fáziskorrekció

Hol itt a hiba? Figyeljük meg, hogy Feynman eredménye kicsit ambivalens: az első faktorban a nevezőbeli i négyzetgyöke nem teljesen egyértelmű: úgy $e^{-i\pi/4}$ mint $e^{+i\pi/4}$ is lehet. De ez nem fontos, hiszen az egész hullámfüggvény szorzódik ezzel, s a globális fázis nem megfigyelhető: $|\psi|^2$-ből kiesik. Nagyobb baj ennél, ha a szinusz eltűnik a nevezőben: a propagátor felrobban és a 2. fejezet teljes levezetése értelmét veszti! A kutya az u.n. Fresnel integrál kiszámításában van elásva: (2.14) csak $\lambda > 0$-ra igaz! Márpedig,

$$\lambda_k > 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad 0 < T < k\frac{\tau}{2}, \tag{3.1}$$

ahol $\tau = 2\pi/\omega$ a periódusidő! Ha az első félperiódus előtt vagyunk, $0 < T < \tau/2$, akkor valamennyi gyök alatti faktor pozitív, és Feynman formulája helyes. Fél-periódus után (de egy teljes periódus előtt) azonban, azaz ha $\tau/2 < T < \tau$, akkor a (2.15)-ban szereplő *első*, gyök alatti faktor negatívvá válik, míg a következők pozitívak maradnak:

$$\lambda_1 < 0, \qquad \lambda_k > 0, \quad k \geq 2.$$

Ezért a propagátor

$$\frac{1}{\sqrt{-1}} = -i = e^{-i\frac{\pi}{2}} \tag{3.2}$$

-vel szorzódik! Más szóval: *a propagátor (s ezért a hullámfüggvény) fázisa* $(-\pi/2)$*-vel ugrik!* Hasonlóan, N fél-periódus után de $(N+1)$ előtt, azaz ha

$$N \times \frac{\tau}{2} < T < (N+1) \times \frac{\tau}{2}, \tag{3.3}$$

akkor a (2.15)-ban szereplő első N faktor lesz negatív, és $N \times (-\pi/2)$-vel ugratja a fázist. A eredmény ezért (2.19) helyett:

$$\begin{aligned} K(x_2, T|x_1, 0) = \; & \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar|\sin\omega T|}\right)^{1/2} e^{-\frac{i\pi}{4}} \\ & \times \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar|\sin\omega T|} \times [(x_1^2 + x_2^2)\cos\omega T - 2x_1x_2]\right\} \times e^{-\frac{i\pi}{2}N}. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Valljuk be férfiasan, hogy a fenti okoskodás kicsit trehány volt: $\sqrt{-1}$ nem csak i, de $-i$ is lehetne, ami minden fázisugrást $-\pi/2$-ről $\pi/2$-re, azaz π-vel változtatna. Sőt, az egyes fázisokat egymástól függetlenül is választhatjuk, ami rendre különböző eredményt adna! (-1) melyik gyökét kell tehát venni? Az indulás utáni félperiódusban a kérdés nem volt fontos, hiszen csak egy globális fázisfaktorról volt szó. De most N-szer kell újra és újra a $\sqrt{-1}$-et megválasztani – és ekkor már nem mindegy, hogyan! A (2.14)-t helyettesítő általános formula $\Im(\lambda) \geq 0$-ból indulva, analitikus kiterjesztéssel kapható. $\lambda \neq 0$ valós esetén:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[i\frac{\lambda}{2}x^2\right] dx = \begin{cases} (\frac{2\pi}{\lambda})^{1/2} e^{i\frac{\pi}{4}} & \lambda > 0 \\ (\frac{2\pi}{-\lambda})^{1/2} e^{-i\frac{\pi}{4}} & \lambda < 0 \end{cases} \tag{3.5}$$

Figyelembe véve, hogy Euler formulája, (2.17), is csak $x < \pi$-re érvényes és különben

$$\prod_{k=1}^{\infty} \left|1 - \frac{x^2}{k^2\pi^2}\right| = \frac{|\sin x|}{x}, \qquad x > 0, \tag{3.6}$$

megerősíthetjük, hogy fenti érvelésünk végülis helyes volt: minden félperiódus egy-egy új, negatív λ-t hoz be, mely a fázist $\pi/2$-vel ugratja.

Mi történik $T = N \times \tau/2$-re ? A propagátor nyilván divergál, hiszen a nevezőben $\sin\omega T \to \sin N\pi = 0$. Az eredmény úgy kapható, hogy felhasználjuk az idő-fejlődés csoport-tulajdonságát:

$$U_{t+t'} = U_t \circ U_{t'} \qquad \Rightarrow \qquad U_{N\frac{\tau}{2}} = (U_{\frac{\tau}{4}})^{2N}. \tag{3.7}$$

De (2.19) szerint

$$U_{\frac{\tau}{4}}\psi(x_2) = (\frac{m\omega}{2\pi\hbar})^{1/2} e^{-i\pi/4} \times \int e^{-i\frac{m\omega}{\hbar}x_1 x_2}\psi(x_1)dx_1, \tag{3.8}$$

ami lényegében egy Fourier-transzformáció! Márpedig egy Fourier-transzformáció négyzete egy függvényt az eredeti függvénybe viszi, csak az argumentum vált előjelet. Ezért

$$\psi_{N\frac{\tau}{2}}(x_2) = e^{-i\frac{\pi}{2}N}\psi((-1)^N x_2), \tag{3.9}$$

azaz

$$K(x_2, T|x_1, 0) = \exp\left[-i\frac{\pi}{2}N\right] \times \delta(x_1 - (-1)^N x_2). \tag{3.10}$$

Ha nem egy- hanem D dimenzióban vagyunk, akkor a fázis $D \times \pi/2$-vel fog ugrani.

• A fenti eredmény több, hasonló feladatra is kiterjeszthető. Konstans külső erő hatása alatt álló oszcillátornál [2, 9] például, előző számításunk szórul szóra elismételhető: a Lagrange függvény

$$L = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) + fx, \tag{3.11}$$

ahol $f = \text{const.}$ $T \neq k\tau/2$-re a klasszikus hatás:

$$\begin{aligned} S(\bar{\gamma}) = \;& \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\Big((x_1^2 + x_2^2)\cos\omega T - 2x_1x_2\Big) \\ & +2f\frac{1-\cos\omega T}{m\omega^2}(x_1+x_2) - f^2\frac{2(1-\cos\omega T) - \omega T\sin\omega T}{m^2\omega^4} \end{aligned} \tag{3.12}$$

cf. (2.8). A propagator újra (3.4) csak a hatáshoz az exponensben hozzá kell adni a (3.12)-beli extra tagokat. $T = N \times \tau/2$-re viszont:

$$\begin{aligned} & K(x_2, N\times\tau/2|x_1, 0) = \exp[-iN\frac{\pi}{2}]\exp\left[-i\frac{f^2}{\hbar m\omega^3}\Big(2(1-(-1)^N) - N\pi\Big)\right] \\ & \times \exp\left[i\frac{f}{\omega}\Big(x_1 - (-1)^N x_2\Big)\right] \times \delta\Big(\Big(x_1 - (-1)^N x_2\Big) - f\frac{1-(-1)^N}{m\omega^2}\Big). \end{aligned} \tag{3.13}$$

$f = 0$-ra formuláink nyilván az előzőekre redukálódnak.

4 Mennyire minimális a „legkisebb hatás" ?

Térjünk vissza a klasszikus mechanikára, nevezetesen a legkisebb hatás elvére. A hatás, mint láttuk, az x_1-et x_2-vel T idő alatt összekötő pályák alkotta végtelen dimenziós, $\mathcal{P}$-vel jelölt felületen definiált $S(\gamma)$ függvény. A (2.4)-beli η, a γ pálya egy variációja, úgy tekinthető, mint a $\mathcal{P}$ egy γ-beli „érintővektora" (l. 1. ábra).

A hatás első variációja, δS, ekkor az S γ-beli, η irányába vett direkciós (iránymenti) deriváltja:

$$\delta S_\gamma(\eta) = \lim_{s\to 0}\frac{S(\gamma + s\eta) - S(\gamma)}{s}. \tag{4.1}$$

δS_γ tehát egy, az érintőtéren definiált lineáris forma. Ahhoz, hogy S-nek a $\bar{\gamma}$-ban szélsőértéke legyen, szükséges az első variáció eltűnése,

$$\delta S_{\bar{\gamma}} \equiv \delta S_{\bar{\gamma}}(\eta) = \int\left\{\frac{d}{dt}\Big(\frac{\partial L}{\partial\dot{x}}\Big) - \frac{\partial L}{\partial x}\right\}\eta dt = 0. \tag{4.2}$$

Ez adja a klasszikus (Euler-Lagrange-féle) mozgásegyenletet [5],

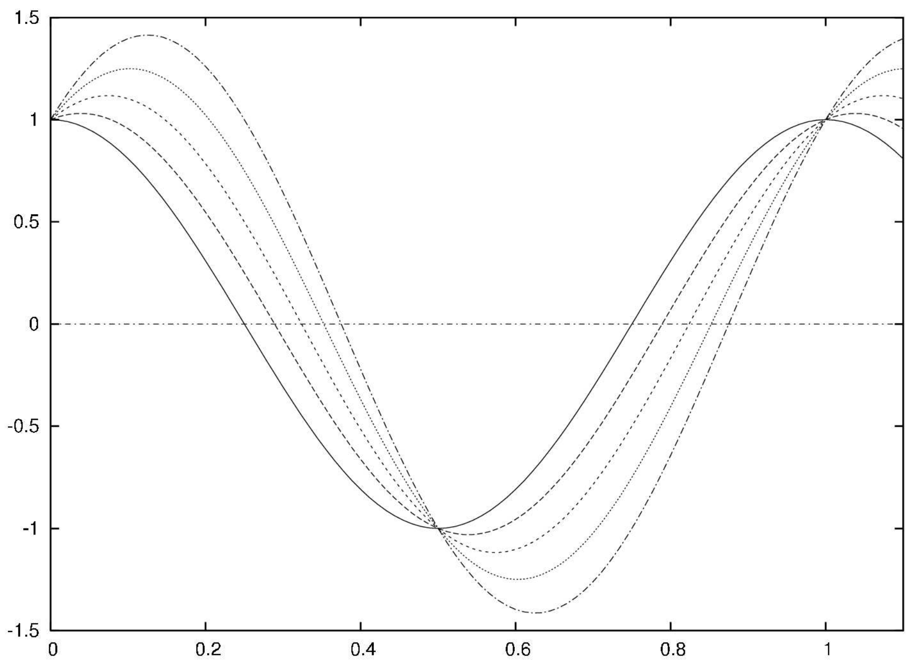
$$\frac{d}{dt}\Big(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\Big) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \tag{4.3}$$

melynek a határfeltételeket kielégítő megoldása a $\bar{\gamma}$.

De létezik-e ilyen megoldás? Gyakran igen, de nem mindig! Az oszcillátor esetén pl. *ha*

$$T = N \times \frac{\tau}{2}, \tag{4.4}$$

akkor T idő múlva minden, az x_1-ből induló klasszikus mozgás $x_2 = (-1)^N x_1$-ben találkozik, a kezdősebességtől függetlenül! [1] A klasszikus mozgásegyenlet megoldásai tehát úgy viselkednek, mint a *fénysugarak*: $T = N\tau/2$ idő elteltével minden, az x_1-ből induló klasszikus pálya az $(-1)^N x_1$-ben fókuszálódik. Az optikai analógia miatt, az ilyen pontokat *fokális pontoknak* hívják. (2. ábra).



2. ábra. *Félperiódus után valamennyi klasszikus mozgás, a kezdősebességtől függetlenül, a kiindulási pont ellentétében találkozik.*

Tegyük föl, hogy a kérdéses pontok közt egyetlen klasszikus pálya létezik. Minimum-e ilyenkor a hatás? Várjunk csak: (4.2) a minimum *szükséges, de nem elégséges* feltétele! Egy, egyenletünket kielégítő $\bar{\gamma}$ az S-nek *kritikus pontja*, de nem feltétlenül minimuma[2]!

[1] Gondoljunk csak az inga mozgásására: mint azt Galilei a pisai *Duomoban* megfigyelte, félperiódus elteltével az inga, a kitéréstől függetlenül, az ellentétes pontban lesz!

[2] A hatás kritikus pontját meghatározó variációszámítás csak olyan pályákra vonatkozik, melyek egymásba folytonos transzformációval átdeformálhatóak. Amennyiben a $\mathcal{P}$ több pálya-komponensből áll, akkor az egyes komponensekben külön-külön kell dolgozni. Az Aharonov-Bohm effektusban például, a szolenoidot különböző oldalakról megkerülő pályák különböző komponensekhez tartoznak, melyeket a lyukas sík (első) homotópia-csoportja, $\mathbf{Z}$ cimkéz. A (szabad) hatásnak két osztályban van kritikus pontja (nevezetesen ,,a lyukat két oldalról megkerülő egyenesvonalú mozgások"). A propagátor ezek interferenciájából kapható [10].

A helyzet véges (n) dimenziós tereken definiált többváltozós függvények viselkedésével analóg: $\vec{x}_0$ a $V(\vec{x})$ függvény kritikus pontja, ha

$$\text{grad } V(\vec{x}_0) = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad \partial_i V(\vec{x}_0) = 0 \quad \forall\, i.$$

Tekintsük a második parciális deriváltakból képzett

$$\delta^2 V \equiv \delta^2 V(\vec{x}_0) = \frac{\partial^2 V}{\partial x^i \partial x^j}(\vec{x}_0)$$

szimmetrikus mátrixot. Az $\vec{x}_0$ kritikus pont aszerint minimum, maximum vagy nyeregpont, hogy a $\delta^2 V$ mátrix definit-e vagy sem. Ez a sajátértékek viselkedéséből olvasható le: a mátrix szimmetrikus, s ezért n valós sajátértékkel rendelkezik:

$$\delta^2 V\, e_a = \lambda_a\, e_a, \qquad a = 1, \dots, n.$$

Ekkor $\vec{x}_0$

$$\begin{cases} \text{minimum, ha} & \lambda_a > 0 & & \forall a \\ \text{maximum, ha} & \lambda_a < 0 & & \forall a \\ \text{nyeregpont, ha} & \lambda_a > 0 & \lambda_b < 0 & \text{létezik } a, b. \end{cases}$$

Ahhoz, hogy eldöntsük, hogy a hatás valóban minimális-e vagy sem, meg kell tehát vizsgálnunk annak ,,második ,,deriváltját" azaz *második variációját*, mely egy, a variációk alkotta érintőtéren definiált *kvadratikus forma*. Ekkor a minimum elégséges feltétele ennek pozitív definit volta:

$$\delta^2 S_{\bar{\gamma}}(\eta, \eta) > 0 \qquad \forall \eta. \tag{4.5}$$

Amennyiben ez nem teljesül, azaz

$$\delta^2 S_{\bar{\gamma}}(\eta, \eta) < 0 \qquad \text{de} \qquad \delta^2 S_{\bar{\gamma}}(\eta', \eta') > 0 \tag{4.6}$$

alkalmas η és η' variációkra, akkor $\bar{\gamma}$ nyeregpont. Egy olyan η, melyre

$$\delta^2 S_{\gamma}(\eta, \eta) < 0 \tag{4.7}$$

egy *negatív módus*, ha pedig

$$\tfrac{1}{2}\delta^2 S(\eta, \eta') = 0 \qquad \forall \eta', \tag{4.8}$$

akkor *nulla-módusról* beszélünk. Egy nulla-módus irányában a függvény első közelítésben invariáns; hogy minimummal vagy maximumal van-e dolgunk, vagy egyikkel se, az a magasabb variációkon múlik.

Vizsgáljuk közelebbről a második variációt:

$$\tfrac{1}{2}\delta^2 S \equiv \tfrac{1}{2}\delta^2 S_{\bar{\gamma}}(\eta, \eta) = \tfrac{1}{2}\int_0^T \left\{ \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\eta^2 + 2\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\eta\dot{\eta} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\eta^2 + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\dot{\eta}^2 \right\} dt,$$

ahol a (feltételezetten egyedüli) klasszikus pálya, $\bar{\gamma}$ mentén kell integrálni. Parciális integrálással:

$$\tfrac{1}{2}\delta^2 S = \int_0^T (\eta, \Lambda\eta)dt, \qquad \Lambda = -\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\frac{d}{dt} + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) + \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\frac{d}{dt} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}\right). \tag{4.9}$$

Λ itt a második variáció operátora. A második variáció tehát akkor pozitív definit, ha a Λ kvadratikus alak minden sajátértéke pozitív, $\lambda > 0$,

$$\Lambda\,\eta = \lambda\eta, \qquad \eta(0) = \eta(T) = 0. \tag{4.10}$$

• A legegyszerűbb esetben:

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \qquad \Rightarrow \qquad \Lambda = -m\left(\frac{d^2}{dt^2} + \frac{d^2V}{dx^2}\right). \tag{4.11}$$

Az oszillátorra pl.:

$$\Lambda_{osc} = -m\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2\right). \tag{4.12}$$

Ezért, a határfeltételeket figyelembe véve:

$$m(\ddot{\eta} + \omega^2\eta) = -\lambda\eta \quad \Rightarrow \quad \eta(t) = \sin[\sqrt{\omega^2 + \frac{\lambda}{m}}t],$$

De $T\sqrt{\omega^2 + \frac{\lambda}{m}} = k\pi,\ k = 0, \pm 1, \ldots$ a periodicitás miatt, s így:

$$\lambda_k = m\left((\frac{k\pi}{T})^2 - \omega^2\right) \quad \text{és} \quad \eta_k(t) = \sin(\frac{k\pi}{T}t), \tag{4.13}$$

l. (2.11) és (2.13). Az (3.3)-beli N természetes egész,

$$N\tau/2 < T < (N+1)\tau/2,$$

tehát *a negatív sajátértékeket számolja*! Az oszcillátor mozgás trajektória ezért csak az első félpediódusban minimuma a hatásnak, azután annak csak nyeregpontja, N negatív módussal!

De mi történik a fokális-pontokban ? $T = N \times \tau/2$ esetén az x_1-et és x_2-t $x_2 \neq (-1)^N x_1$ estén *egyetlen klasszikus pálya se* köti össze, vagy – ha $x_2 = (-1)^N x_1$ – végtelen sok. Legyen ezek valamelyike $\bar{\gamma}$; ekkor a többi klasszikus pálya a $\bar{\gamma}$ variációjának tekinthető, melyeket egy valós s paraméterrel cimkézhetünk: $\gamma = \gamma_s$. Legyen $\gamma_0 = \bar{\gamma}$. A klasszikus hatás ezen pályák valemennyiére ugyanaz. Az s-et futtatva egy $\bar{\gamma}$-ból induló, $\mathcal{P}$-beli „görbét" kapunk; ennek s-szerint vett deriváltja a hatás *nulla-módusa.*

Mi mindennek a fizikai következménye? A klasszikus mechanika szintjén – semmi: az első variáció, (4.2), a mozgásegyenletet adja függetlenül attól, minimum-e a kérdéses kritikus pont. De kvantummechanikában *van* következmény, nevezetesen a hullámfüggvény fázisa! Ezt alább, a 5. fejezetben általánosabban is megmutatjuk. De előbb tekintsünk egy másik példát.

• Az oszcillátoréhoz hasonló fázisugrás lép fel *konstans mágneses térben*, az indukcióvonalakra merőleges síkban mozgó töltött részecske estén is. Klasszikusan, a részecske $\omega = \frac{eB}{2m}$ Larmor frekvenciával, egyenletesen köröz. A periódus $\tau = 2\pi m/eB$. A Lagrange függvény:

$$L_B = \frac{m}{2}\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + 2\omega(x\dot{y} - y\dot{x})\right), \qquad \omega = \frac{eB}{2m}. \tag{4.14}$$

Ha T nem egy teljes periódus egész-számú többszöröse,

$$T \neq N \times \tau = N \times \frac{2\pi m}{eB}, \tag{4.15}$$

akkor T idő alatt pontosan egy klasszikus mozgás-görbe köti össze az adott kezdeti- és végpontokat, (x_1, y_1)-et és (x_2, y_2)-t. Az erre számított hatás:

$$S_B = \frac{m\omega}{2}\Big[\left[(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2\right]\cot(\omega T) + 2(x_1 y_2 - x_2 y_1)\Big]. \tag{4.16}$$

A második variáció mátrixa most:

$$\Lambda_B = m \begin{pmatrix} \frac{d^2}{dt^2} & -2\omega\frac{d}{dt} \\ 2\omega\frac{d}{dt} & \frac{d^2}{dt^2} \end{pmatrix}. \tag{4.17}$$

A megoldandó sajátérték-probléma ezért:

$$\begin{cases} m\ddot{\eta}_x - 2m\omega\dot{\eta}_y = -\lambda\eta_x \\ m\ddot{\eta}_y + 2m\omega\dot{\eta}_x = -\lambda\eta_y \end{cases}, \qquad \eta_x(0) = \eta_y(0) = 0 = \eta_x(T) = \eta_y(T), \tag{4.18}$$

melynek megoldása legegyszerűbben egy időfüggő forgatással kapható: η_x és η_y helyett vezessük be a ξ és ζ változókat:

$$\begin{pmatrix} \eta_x \\ \eta_y \end{pmatrix} = R(t)\begin{pmatrix} \xi \\ \zeta \end{pmatrix} \quad \text{ahol} \quad R = \begin{pmatrix} \cos\omega t & \sin\omega t \\ -\sin\omega t & \cos\omega t \end{pmatrix}$$

$$\text{azaz} \quad \begin{cases} \eta_x = \cos\omega t\,\xi + \sin\omega t\,\zeta, \\ \eta_y = -\sin\omega t\,\xi + \cos\omega t\,\zeta. \end{cases}$$

Idő szerint deriválva és (4.18)-be beírva:

$$R(t)\begin{pmatrix} \ddot{\xi} + (\omega^2 + \lambda/m)\xi \\ \ddot{\zeta} + (\omega^2 + \lambda/m)\zeta \end{pmatrix} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} m\ddot{\xi} + (m\omega^2 + \lambda)\xi = 0 \\ m\ddot{\zeta} + (m\omega^2 + \lambda)\zeta = 0 \end{cases}.$$

A periodicitást figyelembevéve, $\xi, \zeta \propto \sin(\sqrt{\omega^2 + \lambda}t) = \sin\frac{k\pi}{T}t$, ahol k egész. A sajátértékek végül kétszeresen degeneráltak

$$\lambda_k = m\left((\frac{k\pi}{T})^2 - \omega^2\right), \qquad k = 0, 1, \ldots. \tag{4.19}$$

A *redukált propagátor ezért ugyanaz, mint egy* $\omega = eB/2m$ *frekvenciájú síkbeli oszcillátoré:* T idővel indulás után, ha

$$N\tau < T < (N+1)\tau, \tag{4.20}$$

akkor:

$$\begin{aligned} K(x_2, y_2, T|x_1, y_1 0) &= \frac{m\omega}{2\pi i\hbar|\sin\omega T|}\times \\ \exp&\left\{\frac{im\omega}{2\hbar}\Big[\left[(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2\right]\cot(\omega T) + 2(x_1 y_2 - x_2 y_1)\Big]\right\}(-1)^N. \end{aligned} \tag{4.21}$$

N *teljes* kör megtétele után, azaz N teljes periódus,

$$T = N\frac{2\pi m}{eB} \tag{4.22}$$

elteltével, a kezdősebességtől függetlenül, valamennyi klasszikus mozgás újra a kiindulási pontba fókuszálódik. A propagátor ilyenkor előző érvelésünk szerint újra Dirac-delta lesz, csak előjelet vált:

$$K(x_2, y_2, \tau | x_1, y_1, 0) = (-1)^N \delta(x_1 - x_2, y_1 - y_2). \tag{4.23}$$

5 Szemiklasszikus approximáció

Visszatérve az általános esetre, tegyük fel, hogy egyetlen klasszikus trajektoria, $\bar{\gamma}$, köti össze kiszemelt pontjainkat és fejtsük ki a klasszikus hatást másodrendben [11]:

$$S(\gamma) = S(\bar{\gamma}) + \delta_{\bar{\gamma}}(\eta) + \tfrac{1}{2}\delta^2 S_{\bar{\gamma}}(\eta, \eta) + \dots \tag{5.1}$$

ahol a „…" a magasabb rendő variációkat jelöli. *Szemiklasszikus közelítésen a másodiknál magasabb tagok elhagyását értjük.* Hamilton elve szerint $\delta S_{\bar{\gamma}} = 0$; a szemiklasszikus propagátor tehát:

$$K(\vec{x}_2, T | \vec{x}_1, 0) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\bar{\gamma})\right] \times F(T), \qquad F(T) = \int \exp\left\{\frac{i}{2\hbar}\delta^2_{\bar{\gamma}} S(\eta, \eta)\right\} \mathcal{D}\eta \tag{5.2}$$

cf. (2.9)-(2.10).

A redukált propagátor a második variáció diagonalizálásával határozható meg. Tegyük fel az egyszerűség kedvéért, hogy a probléma egy dimenziós. Tekintsük a (4.10) sajátérték-egyenletben szereplő Λ kvadratikus forma egy önadjungált, Sturm-Liouville operátor a $\mathcal{P}$ „felület" η-k alkotta „érintőterén", s ezért λ_n sajátértékei valósak és (η_n-el jelölt) sajátvektorai teljes ortonormált rendszert alkotnak a szokásos skalár-szorzatra:

$$(\eta_n, \eta_m) = \frac{1}{T}\int \eta_n \eta_m dt = \delta_{nm}.$$

Az η variációt általánosított Fourier-sorba fejthetjük a sajátvektor-bázisban:

$$\eta = \sum_n a_n \eta_n \qquad \Rightarrow \qquad \Big(\eta, \Lambda\eta\Big) = \sum_k a_k^2 \lambda_k.$$

A redukált propagátor ezért újra (2.12), csak a λ_k-k most a Λ (4.10)-beli sajátértékei. Az előzőek szerint,

$$F(T) = C\sqrt{\prod_k \frac{2i\pi\hbar}{\lambda_k}}. \tag{5.3}$$

Mint az előzőekben már megjegyeztük, hogy a Jacobi faktor a dinamikától független, s ezért (5.3) a szabad propagátorra is érvényes:

$$F(T)^{szabad} = C\sqrt{\prod_k \frac{2i\pi\hbar}{\lambda_k^{szabad}}}, \tag{5.4}$$

ahol $F(T)^{szabad}$ ill. λ_k^{szabad} a probléma szabad (azaz külső tértől mentes) propagátora ill. annak sajátértékei. (5.3)-t (5.4)-el elosztva, C kiesik:

$$F(T) = F(T)^{szabad} \times \sqrt{\frac{\prod\limits_k \lambda_k^{szabad}}{\prod\limits_k \lambda_k}}. \tag{5.5}$$

A szemiklasszikus propagátor tehát:

$$K = e^{iS(\bar\gamma)} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{D/2} \times \sqrt{\frac{\prod_k \lambda_k^{szabad}}{\prod_k \lambda_k}}, \tag{5.6}$$

hiszen D dimenzióban $F(T)^{szabad} = (\frac{m}{2\pi i\hbar T})^{D/2}$, cf. (2.18).

• Oszcillátor esetén újra az előző eredmény kapjuk: (2.16) szerint a sajátértékek szorzatának hányadosa a gyök alatt épp az a végtelen szorzat, melyet Euler formulájával meghatároztunk, ugyanis $\lambda_k^{szabad} = m\pi^2 k^2/T^2$.

A Van Vleck mátrix.

Általánosabb eredmény kapható az u. n. *Van Vleck mátrix* segítségével [11]. Emlékezzünk vissza, hogy – amennyiben $\vec{x}_1$-et $\vec{x}_2$-vel egyetlen klasszikus pálya, $\bar\gamma$, köti össze, – akkor (rögzített T mellett) a hatás tekinthető a végpontok függvényének:

$$S(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = S(\bar\gamma). \tag{5.7}$$

$S(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ Hamilton principális függvénye [5]. Ekkor érvényes [11]:

Tétel: *A szemiklasszikus propagátor D tér-dimenzióban:*

$$K(\vec{x}_2, T|\vec{x}_1, 0) = \left(\frac{1}{2\pi i\hbar}\right)^{1/2} \left|\det\frac{\partial^2 S}{\partial\vec{x}_1\partial\vec{x}_2}\right|^{D/2} \exp\left[-iDN\frac{\pi}{2}\right] \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}S(\bar\gamma)\right]. \tag{5.8}$$

ahol $\vec{x}_1 = (x_1^i)$ ill. $\vec{x}_2 = (x_2^j)$ a kezdeti- ill. végpont koordinátái. A $D\times D$ mátrix

$$\left[\frac{\partial^2 S}{\partial\vec{x}_1\partial\vec{x}_2}\right] = \left[\frac{\partial^2 S}{\partial x_1^i\partial x_2^j}\right] \tag{5.9}$$

determinánsa az u.n. Van Vleck determináns.

• Az oszcillátor esetében pl.

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x_1 \partial x_2} = -\frac{m\omega}{\sin\omega t}, \tag{5.10}$$

s így (5.8) újra az oszcillátor-propagátor előző képletét adja.

• Tekintsük újra a konstans mágneses térbeli töltött részecskét, és tegyük föl, hogy $T \neq \tau$. Hamilton Principális függvénye ekkor (4.16), és a Van Vleck mátrix determinánsának abszolút értéke:

$$\left|\det\frac{\partial^2 S}{\partial\vec{x}_1\partial\vec{x}_2}\right| = m^2\omega^2 \times \det\begin{pmatrix} -\cot\omega T & 1 \\ -1 & -\cot\omega T \end{pmatrix} = \frac{m^2\omega^2}{\sin^2\omega T}. \tag{5.11}$$

Ezért (5.8)-ből újra (4.21)-ot kapjuk.

6 Megfigyelhető-e a fázis?

A naiv válasz: nem, hiszen ha a hullámfüggvényt tetszőleges fázis-faktorral szorozzuk, az amplitúdó abszolút értéke – s így a valószínűség – nem változik. De ez csak *egyetlen* hullámfüggvényre igaz! Mi van, ha a rendszert részekre bontjuk, és a rész-hullámfüggvényeket külön-külön, *különböző* fázis-faktorokkal szorozzuk? Rekombinálva őket, azok interferálni fognak!

Ez először az optikában nyert megerősítést: a XIX. sz. végén Gouy [6] rámutatott, hogy – Huygens elvéből következően – a fókuszponton áthaladva, *a fény fázisa fél hullámhosszal ugrik*. Gouy ezt kísérletileg Fresnel tükör-kísérletének alábbi módosításával igazolta: bontsunk egy fénysugarat két részre, és veressük vissza a rész-sugarakat egy sík- ill. egy homorú tükrön, majd – a homorú tükörből jövő sugár fókuszon való áthaladása után, interferáltassuk a rész-sugarakat. A kísérletet elvégezve, Gouy azt találta, hogy számításaival összhangban, a központban a sugarak valóban kioltják egymást. Az oszcillátor esetén talált fázis-ugrást hasonló interferencia-kísérletben figyelhetnénk meg.

Mi történik, ha az oszcillátor nem tökéletesen harmonikus ? Ez a (5.1)-beli magasabb tagok figyelembevételével vizsgálható [12].

Hasonló fázisugrást találtak molekuláris [13], nukleáris [14], valamint nehéz-ion [15] ütközések esetén.

Jegyezzük meg végül, hogy a Maszlov-féle korrekció a pályák alkotta végtelen dimenziós ,,sokaság" topológiai tulajdoságaival áll kapcsolatban [16].

References

[1] J.-M. Souriau: *Construction explicite de l'indice de Maslov.* Proc. Group Theoretical Methods in Physics. Nijmegen '75. Springer Lecture Notes in Physics **50**, (1976); V. Marino, L. Gualandari: *Indice di Maslov. Lezioni del Prof. Souriau.* Pubblicazioni del'Istituto di Matematica Applicata N. 191. Università di Roma (1977).

[2] R. P. Feynman: *A nemrelativisztikus kvantummechanika felépítése a téridőben. Reviews of Modern Physics* **20**, 367 (1948). Magyar fordítása: l. a *Kvantummechanika* cikkgyűjteményt, 181-209. o. Válogatta és fordította Györgyi Géza. Akadémia kiadó, Bp. (1971); R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and path integrals.* McGraw-Hill, New York (1965).

[3] P. A. Horváthy: *Extended Feynman Formula for harmonic oscillator. Int. Journ. Theor. Phys.* **18**, 245 (1979).

[4] P. A. Horváthy, L. Úry: *Analogy between statics and dynamics – related to variational mechanics. Acta Phys. Hung.* **42**, 251 (1977).

[5] Budó Ágoston: *Mechanika.* Negyedik kiadás. Tankönyvkiadó, Budapest (1965). L. Landau, E. Lifsic: Elméleti fizika I. Mechanika.

[6] M. Gouy: *Sur une propriété nouvelle des ondes lumineuses.* C.R.A.S. **110**, 1251 (1890).

[7] J. B. Keller: *Corrected Bohr-Sommerfeld quantum conditions for non-separable systems. Annals of Physics* **4**, 180-188 (1958).

[8] V. P. Maszlov: *Perturbációszámítás és aszimptotikus módszerek.* [orosz nyelven]. Moszkva: MGU (1965). A geometriai aspektusokat illetően l. V. I. Arnold: *Egy, a kvantálásban szerepet játszó karakterisztikus osztály. Funkcionalnüj Analiz i ego prilozsenyja* **1**, 14 (1967).

[9] B. K. Chen: *Extended Feynman Formula for forced harmonic oscillator. Int. Journ. Theor. Phys.* **23**, 1099 (1984).

[10] P. A. Horváthy: *Quantization in multiply connected spaces. Phys. Lett.* **76A**, 11 (1980).

[11] S. Levit and U. Smilansky: *A new approach to Gaussian path integrals and the evaluation of the semiclassical propagator. Ann. Phys.* **103**, 198 (1977).

[12] L. S. Schulman: *Caustics and multivaluedness: two results of adding path amplitudes. Functional integration and its applications.* ed. A. Arturs, Clarendon Press, Oxford (1975).

[13] W. H. Miller: *Semiclassical theory of atom-diatom collisions: path integrals and classical S matrix. J. Chem. Phys.* **53**, 1949 (1970); *Classical-limit quantum mechanics and the theory of molecular collisions. Advances in Chemical Physics* **25**, 69-177 (1974).

[14] S. Levit, U. Smilansky, D. Pelte: *Phys. Lett.* **53B**, 39 (1974); H. Massman, J. O. Rasmusssen: *Nuclear Physics* **A243**, 155 (1975).

[15] T. Koeling and R. A. Malfliet: *Semi-classical approximation to heavy ion scattering based on the Feynman path integral method.* *Physics Reports* **C 22**, 181-213 (1975).

[16] M. Morse, *Calculus of variations in the large.* Transactions of the AMS, Providence (1934); J. Milnor, *Morse theory.* Annals of Math. Studies No. **51** Princeton U.P. (1963).

Ehess, ihass, ölelhess, alhass!
A mindenséggel mérd magad!
Sziszegve se szolgálok aljas,
nyomorító hatalmakat.

(József Attila: *Ars poetica*; részlet; 1937. febr. eleje)