

retusált természetfotókon a Napot átlagosan 1,08-szor nagyobbak képelték a Holdnál. A holdas és napos természetfotóknál kapott eredményeket összehasonlítva, a tesztalanyok két csoportra oszthatók: az egyik részük a Napot nagyobbak állította be a Holdnál, a másik részük viszont közel egyformának. Ennek több oka lehet: (i) A Holdat felhőtlen este/éjjeleken könnyű megfigyelni, mert viszonylag gyenge fénye nem vakítja el szemünket a sötétség ellenére sem. Így a holdkorong mérete jól megbecsülhető. Mivel ezzel szemben a Napot a nappali égen nem könnyű megfigyelni a vakítóan erős fénye miatt, ezért nehéz megbecsülni a napkorong határát, ami túlbecslést eredményezhet. (ii) Napnyugtakor vagy napkeltekor szabad szemmel huzamosabb ideig is megfigyelhető a gyenge fényű, narancssárga vagy vörös napkorong. Mivel ilyenkor a Nap a horizonton vagy ahhoz közel van, így a holdillúzió miatt ekkor érzékeljük a legnagyobbaknak. Ez befolyásolhatja a Nap méretéről az emberekben kialakult belső képet, ami a kísérleteinkben a holdkorongnál nagyobb napkorongként jelent meg.

5) A holdillúzió mértékére kísérleteinkben kapott $Q = 1,56; 1,57; 1,68; 1,72; 1,77; 2,12; 2,75$ és $2,85$ értékek zöme (2. táblázat) nagyobb a korábbi pszichofizikai

kísérletekben mért $Q = 1,0; 1,08; 1,16; 1,19; 1,20; 1,21; 1,26; 1,30; 1,42; 1,50; 1,64; 1,76$ és $1,80$ értékeknel (lásd cikkünk 1. részében szereplő 1. táblázatot). *Holway* és *Boring* (1940) $Q = 1,76/1,80$ [5], *Taylor* és *Boring* (1942) $Q = 1,64$ [6], valamint *Ross* és *Cowie* (2010) $Q = 1,50$ [15] mérési eredményei állnak legközelebb az általunk kapottakhoz. A *Ross* és *Cowie* által végzett kísérlet [15] metodikája volt a mi kísérleteinkéhez legjobban hasonló (tájképekre rajzolták be a Holdat a horizontra vagy az égre), míg a többi korábbi kísérlet módszertana jelentősen eltért a miénktől.

6) A vizsgált 100 festményen és 100 természetfotón előforduló hold/napmagasságok szűk tartománya miatt nem volt tapasztalható a holdillúzióra jellemző magasságfüggés, vagyis a hold/napkorong festményeken ábrázolt méretének és festményeken, valamint természetfotókon teszt személyek által beállított méretének csökkenése a horizont fölötti szögmagasság növekedésével.

Irodalom

2. Kovács Z., Udvarnoki Z., Papp E., Horváth G.: Psychophysical study of the moon illusion in paintings and landscape photos. *Proceedings of the Royal Society A* 477(2021) 20200737 (doi: 10.1098/rspa.2020.0737)

ABSZTRAKT VEKTORFOGALOM ÉS KVANTUMMECHANIKA

Fejős Gergely

Eötvös Loránd Tudományegyetem,
Fizikai Intézet, Atomfizikai Tanszék

Hétköznapi elképzelés szerint egy vektor egy iránnyal, állással¹ és hosszúsággal jellemezhető mennyiség. A fogalommal a matematikát tanuló diákok már általános iskolában találkoznak és számtalan alkalmazásával ismerkedhetnek meg a geometriától kezdve a fizikán át később minden olyan területen, ahol a lineáris algebra előkerül (lásd akár a biológiát vagy a közgazdaságtant). A vektort, mint absztrakt fogalmat a fizika alapszakos hallgatók egyetemi tanulmányaik első felében tanulják, azzal a nem titkolt céllal, hogy ké-

sőbb főként az (általános) relativitáselmélet és a kvantummechanika fogalmait könnyebben sajátítsák el [1]. Jelen, matematikai precizitást mellőző ismeretterjesztő írás célja, hogy rávilágítson: a kvantumelmélet vonatkozásában a hagyományosan tanított absztrakt vektorfogalom amennyit segít, adott esetben hasonló mértékben fogalmi zavarhoz is vezethet.

Vektorok a háromdimenziós térben

A háromdimenziós tér egy adott P pontjához a koordináta-rendszerünk origójából húzott nyílról úgy vélekedünk, hogy egy vektor a térben, de azt gondoljuk, hogy vektor például egy részecske sebessége, impulzusa, vagy éppen a rá ható erő is. A P pont helyzete a térben nyilvánvaló módon 3 valós számmal adható meg, ezért egy vektorra számhármasként is szokás gondolni. Mivel a pont helyzete egy valós, fizikailag létező hely a térben, azt akár egy másik számhármassal is megadhattuk volna, amennyiben a koordináta-rendszerünket másképp választjuk meg. Tengelyeit például elforgathatjuk, vagy origójának akár egy másik pontot is kijelölhetünk, a P pont helyzete leírásának szempontjából ezek teljesen egyenértékű válasz-

¹Egyesek (egyes könyvek) az irány fogalmába beleértik az állást is. Például észak–dél irányba haladtam, azaz északról dél felé. De van, aki másképp gondolja: észak–dél irányú egyenes mentén mozogtam, a mozgás értelme dél volt.



Fejős Gergely (PhD 2011, ELTE részecskefizika) elméleti fizikus, egyetemi adjunktus (2019). 8 évet töltött Japán meghatározó egyetemein és kutatóintézeteiben (University of Tokyo, RIKEN, Osaka University, Keio University). Kutatásaiban erősen kölcsönöz kvantummező-elméletekkel foglalkozik nemperturbatív funkcionális technikák alkalmazásával. Érdeklődési területei közé tartozik a kvark- és maganyag fázisszerkezete, szupravezetés, topológikus fázisátalakulások. Bolyai- és ÜNKP ösztöndíjas.

tások. Az új számhármassal azonban nagyon szoros kapcsolatban van a régi számhármassal, egyikből a másikat a forgatás és eltolás szabályai szerint kell kikeverni. Minden olyan mennyiséget, amely 3 számmal reprezentálható, és új koordináta-rendszerre való áttéréskor a tér egy pontja helyzetének leírására szolgáló háromkomponensű mennyiséggel azonos módon transzformálódik, vektornak hívunk.

Mindezek alapján a fizikában a vektor fogalma nem pusztán egy számhármast jelent. A fentiek szerint úgy gondolkozhatunk, hogy a vektor valójában absztrakt objektum, amelyet az összes lehetséges koordináta-rendszerhez tartozó reprezentációk összességéként definiálunk. Eszerint azonban egy számhármassal nem feltétlenül alkot vektort. Ahhoz, hogy vektorról beszélhessünk, a szóban forgó számhármashoz tartoznia kell egy koordináta-rendszernek olyan módon, hogy ha egy új rendszerre térünk át, akkor a számhármassal komponensei a feljebb említett módon keverednek össze. Például, ha egy testre két különböző erő hat, amelyek mindegyike vektor, és adott koordináta-rendszerben (F_{1x}, F_{1y}, F_{1z}) és (F_{2x}, F_{2y}, F_{2z}) számhármassal reprezentálhatók, akkor könnyen belátható, hogy az $(F_{1x}+F_{2x}, F_{1y}+F_{2y}, F_{1z}+F_{2z})$ számhármassal is egy vektort reprezentál, vagyis létezik egy koordináta-rendszerrel független eredő erő, mint vektor. Ellenben, például egy hőtartály belső energiája, térfogata és részecskeszáma (U, V, N) hiába rendezhető egy számhármassal (az entrópia természetes változóiként ez gyakran használatos), az sosem alkot vektort, mert a koordináta-rendszer megváltoztatásakor ezek a mennyiségek egyáltalán nem változnak.

Az absztrakt vektor és reprezentációinak megkülönböztetése azért nagyon hasznos, mert az előbbi segítségével a fizikai törvényeket olyan módon fejezhetjük ki, amely semmilyen formában sem tartalmazza azt az információt, hogy milyen koordináta-rendszerrel használunk. A törvényektől pedig el is várjuk, hogy ne legyenek érzékenyek a koordináta-rendszer választására. Az, hogy például a tengelyeket hogyan forgatjuk el, vagy hová tesszük az origót, nem változtathat azok matematikai alakján. Könnyen belátható, hogy a sebesség mint a hely idő szerinti deriváltja vektor, és mint ilyen, annak időderiváltja, vagyis az \mathbf{a} gyorsulás is az. Ha feltesszük, hogy egy testre ható \mathbf{F} erő vektor, és egy adott koordináta-rendszerben azt találjuk, hogy $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ (m a test tömege), akkor rögtön arra jutunk, hogy ez az egyenlet tetszőleges koordináta-rendszerben igaz. *Newton* törvénye minden koordináta-rendszerben azonos alakú.

Négyesvektorok

A törvények koordináta-rendszerrel független megfogalmazásának lehetősége különösen fontos értelmet nyer például a relativitáselméletben. Itt nem a tér pontjait reprezentáló háromkomponensű mennyiségek, hanem eseményekhez rendelhető, a térkoordináták mellett az időt is tartalmazó számnégyesek kerülnek

főszerepbe. Kiderül, hogy egy, az egymáshoz képest egyenes vonalú egyenletes mozgást végző megfigyelők által érzékelt esemény mint fizikailag létező „valóság” (négyes)koordinátái – a háromkomponensű „hagyományos” helyvektorok a koordináta-rendszer elforgatásakor fellépő transzformációjával valamelyest analóg módon – a Lorentz-transzformáció képletei szerint keverednek össze. A fentiekhez hasonlóan pedig minden olyan számnégyest, amely az eseményekhez tartozó idő-tér négyessel azonos módon transzformálódik, egy absztrakt vektor adott reprezentációjának tekintünk, az absztrakt vektort pedig a vonatkoztatási rendszertől függetlenül létező négyesvektornak nevezzük. Ez azt jelenti, hogy ha a fizikai törvényektől elvárjuk, hogy egymáshoz képest egyenes vonalú egyenletes mozgást végző vonatkoztatási rendszerekben azonos alakúak legyenek (hasonlóan ahhoz, ahogy feljebb amellelt érveltünk, hogy például a koordinátatengelyek elforgatására ne legyenek érzékenyek), akkor azokat négyesvektorok, illetve azokon alapuló fogalmakon át kell tudnunk felírni.

(*Megjegyezzük*, hogy a fentiek szerint bevezetett absztrakt vektorfogalom a differenciálgeometriában matematikailag precízen is definiálható. Egy sima sokaság (legyen az például a 3-dimenziós, akár görbült tér, vagy az események 4-dimenziós tér-idő kontinuum) valamely P pontjában definiált vektorok a pont egy nyílt környezetén átmenő összes lehetséges sima görbe ekvivalenciaosztályait jelentik, ahol az ekvivalenciát a görbék azok paraméterei szerinti deriváltjainak egyenlősége adja a P pontban. A definícióból logikusan következik, hogy az így definiált vektorok nem függenek attól, hogy a pont szóban forgó nyílt környezetében hogyan koordinátázzuk a sokaságot. Az általuk, mint ekvivalenciaosztályok által kifejeztett lineáris teret a P pont érintőterének hívjuk.)

Kvantummechanika és reprezentáció

A klasszikus fizikában bevezetett absztrakt vektorok és reprezentációik közötti megkülönböztetés a kvantummechanika történetileg két nevezetes megfogalmazása kapcsolatának megértésében is segít. A Schrödingeri hullámmechanika és a Heisenbergi mátrixmechanika Dirac-féle egyesítése azt állítja, hogy a két megközelítés ugyanannak az absztrakt lineáris térnek két különböző reprezentációja. Az elmélet szerint *Schrödinger* és *Heisenberg* is egy-egy adott konkrét koordináta-rendszert definiál ahhoz, hogy például a harmonikus oszcillátor spektrumát meghatározza, de egy kvantumfizikai rendszer jellemzői ezen reprezentációktól teljesen függetlenek. *Dirac* azt feltételezte, hogy egy részecske lehetséges kvantumállapotai egy absztrakt, végtelen dimenziós, komplex, lineáris tér (Hilbert-tér) elemei, amelyeket ket-vektoroknak, a hozzá tartozó duális tér elemeit pedig bra-vektoroknak nevezett el. Ezek nyilvánvalóan egymásra egyértelműen leképezhetők, hiszen egy Hilbert-tér izometrikusan izomorf a saját duálisával. Egy adott diszkrét

bázison a bra-vektorok sor-, míg a ket-vektorok oszlopvektorokkal reprezentálhatók (Heisenberg-ábrázolás, l_2 tér). Folytonos bázison a bra-vektorok egy komplex függvénnyel adhatók meg, a ket-vektorok pedig ennek komplex konjugáltját adják (Schrödinger-ábrázolás, \mathcal{L}_2 tér), amit hullámfüggvénynek nevezünk. A kvantummechanikai állapotot időben fejlődő Schrödinger-egyenletet viszont reprezentációtól függetlenül is érvényesnek várjuk, ugyanúgy, ahogy a Newton-törvény sem függhetett attól, hogy milyen koordináta-rendszerben írjuk fel az erő és a gyorsulás komponenseit. A klasszikus fizikai törvények absztrakt vektorokkal való felírásával analóg módon most is azt gondoljuk, hogy ha egy adott reprezentációban (például schrödingeri) megtaláltuk a kvantummechanikai állapot időbeli fejlődését leíró egyenletet, akkor az az absztrakt vektorokra, és így azok bármilyen más reprezentációira vonatkozóan is érvényes kell legyen. Így aztán rajtunk áll, hogy milyen ábrázolásban („koordináta-rendszerben”) szeretnénk dolgozni, és nyugodtan választhatunk olyat, ami jól illeszkedik az adott problémánkhoz.

Az alábbiakban ezt a széles körben ismert és elfogadott képet szeretnénk árnyaltabbá tenni, és amellet érvelni, hogy valójában félrevezető a kvantummechanika absztrakt vektorfogalmát és azok reprezentációit párhuzamba állítani azok klasszikus fizikai párjaival. Úgy véljük, hogy amennyire sokat segíthet ezen analógia segítségével megérteni a bra- és ket-vektorok, és azok reprezentációinak szerepét a kvantummechanikában, annyira sok fogalmi zavarhoz és későbbi paradoxonhoz is vezethet.

Nemkorlátos operátorok

A probléma ott kezdődik, hogy a kvantummechanikában a fizikai mennyiségek a Hilbert-téren ható, valós spektrummal rendelkező operátorokkal azonosítandók, és mint ilyenek, általában nemkorlátosnak kell lenniük. Egy részecske helye, impulzusa, vagy akár az energiája értelemszerűen nem szorulhat véges értékek közé, vagyis ezeket a mennyiségeket nemkorlátos operátorokkal kell leírni. A funkcionálanalízisben azonban a zárt gráf tétel kimondja, hogy minden, a teljes Hilbert-téren értelmezett szimmetrikus operátor szükségszerűen korlátos, amiből az következik, hogy a fizikában előforduló fizikai mennyiségek egy jelentős részéhez olyan operátor tartozik, amely nem értelmezhető a teljes Hilbert-téren. Ez pedig azonnal azt a következtetést vonja maga után, hogy a Hilbert-térben vannak olyan elemek, amelyek bár tökéletesen normálhatók, és így elvben megfelelnek a valószínűségi értelmezésnek, mégsem lehetnek fizikaiak. A legtöbb, amit tenni lehet, hogy a szóban forgó nemkorlátos operátor(oka)t a Hilbert-tér egy mindenütt sűrű részhalmazán definiáljuk úgy, hogy az operátor(ok) hatása nem vezet ki ebből a halmazból [2].

Tekintsük például 1-dimenzióban a hely- és impulzusoperátorokat schrödingeri ábrázolásban, ahol a

helyoperátor a hullámfüggvény argumentumával való szorzással, az impulzusoperátor pedig az a szerinti deriválás műveletével (a komplex egységgyökfaktor-tól és a \hbar -tól eltekintve) azonosítható. Az ehhez a reprezentációhoz tartozó konkrét \mathcal{H} Hilbert-tér a négyzetesen integrálható függvények \mathcal{L}_2 tere, és a kérdés az, hogy miként lehet egy olyan mindenütt sűrű részhalmazt találni ezen a téren, amely a hely- és impulzusoperációk tetszőleges kombinációjával szemben invariáns. Könnyen belátható, hogy ez a részhalmaz olyan tetszőlegesen sokszor differenciálható függvényekből áll, amelyek maguk és deriváltjaik is minden hatványnál gyorsabban tartanak nullához a végtelenben (Schwartz-tér, Φ). Matematikailag a Dirac-féle bra- és ket-vektorok ezen tér topologikus duálisának (Φ^+) elemei, előbbiek antilineáris, utóbbiak lineáris funkcionálok, amelyek egymással kölcsönösen egyértelműen megfeleltethetők. A konstrukcióból következik, hogy a bra- és ket-vektorok valójában temperált disztribúciók, az imént megkonstruált (Φ , \mathcal{H} , Φ^+) hármast pedig az angol nyelvű irodalom rigged Hilbert-térnek vagy Gelfand-tripletnek nevezi [3]. Megjegyzendő, hogy \mathcal{H} sűrű Φ^+ -ban (Φ nyilván sűrű \mathcal{H} -ban), a Φ -n értelmezett operátorok (például hely vagy impulzus) pedig kiterjeszthetők Φ^+ -ra, amin már létezhetnek sajátvektorai. Ezek általában valóban nem \mathcal{H} -ban, hanem tényleg Φ^+ -ban vannak (folytonos spektrum esete), valamint belátható, hogy megfelelő értelemben létezik rájuk teljességi összefüggés, vagyis az egységoperátort spektrálisan elő lehet belőlük állítani. Ez egyúttal a Hilbert-terek elméletéből ismert spektrálmérték egy (nem unikális) konkrét megvalósítását adja, és ez felel meg annak a naiv, pusztán formális diraci leírásnak, amelyben egy kvantumállapotot folytonos bázison, integrállal állítunk elő.

Vegyük észre, hogy a Dirac-elmélet matematikai precizitással történő konstrukciója során elveszítjük annak eredeti eleganciáját, többé nem tudunk absztrakt terekkel dolgozni. Ahhoz, hogy például a nemkorlátos hely- és impulzusoperátorok megfelelő értelmezési tartományait megtaláljuk, a schrödingeri ábrázolásból kell kiindulnunk. Ezen értelmezési tartomány(ok) megadása absztrakt módon nehezen képzelhető el, nem tudjuk megmondani, hogy az operátorok milyen állapotokon értelmezhetők egészen addig, amíg egy konkrét reprezentációban meg nem állapítjuk, hogy az előbbieknek milyen hatásuk van a Hilbert-tér egyes elemeire. Mindezek szerint a Dirac-elmélet állapotvektorai, bár fogalmilag nagyon hasonlónak tűnhetnek a klasszikus fizikai vektorfogalomhoz, és például a hullámfüggvény az absztrakt állapot egy reprezentációkénti értelmezése is csábító, az derül ki, hogy ez a megközelítés túlságosan naiv. Mivel egy fizikai rendszerhez határfeltételeket a valós háromdimenziós térben tudunk megfogalmazni, az operátorok értelmezési tartományainak megkonstruálása végett a kvantummechanika már első lépésben egy adott „ábrázolást” jelöl ki, ez pedig a schrödingeri. Fontos kihangsúlyozni, hogy ezt a választást nemkorlátos operátorok bevezetésének szüksége kényszeríti

ránk, ahogy azt is, hogy maga a Hilbert-tér és a benne kijelölendő sűrű részhalmaz is valójában operátorfüggő. Ez a megfigyelés szintén az irányba mutat, hogy egy teljesen általános absztrakt Hilbert-tér nem adhatja a kvantumelmélet megfelelő matematikai alapját, és talán kijelenthető, hogy a kvantummechanika sokkal inkább természetes megalapozása az alapjaiban *Neumann János* által lefektetett operátorgyűrűk elméletén, és az idevonatkozó C^* -algebrán keresztül történik. Ez esetben sem a fizikai mennyiségek, sem a fizikai állapotok definiálásához nincs szükség Hilbert-térre, jöllehet annak létezése következményként kiadódik a leírásból [4]. Ennek részletei és kapcsolata a Gelfand-triplettel történő megfogalmazással viszont már nem képezi jelen ismeretterjesztő írás tárgyát.

Kvantummechanikai paradoxonok

Az alábbiakban áttekintünk három meghökkentően egyszerű paradoxont, amelyek az absztrakt állapotter vektoraival történő számítások pusztán formális és matematikai szigorú nélkülöző alkalmazásai miatt jelennek meg a kvantumelméletben. Ezzel a Dirac-formalizmus használatához szükséges elkerülhetetlen körültekintésre és óvatosságra szeretnénk felhívni a figyelmet [5].

1. paradoxon

Tekintsük az azimutszög ($\hat{\phi}$) és a z irányú impulzusmomentum (\hat{L}_z) operátorokat. Az \hat{L}_z sajátállapotok m kvantumszámmal kielégítik az $\hat{L}_z |m\rangle = \hbar m |m\rangle$ relációt, és nyilván a kommutátor $[\hat{\phi}, \hat{L}_z] = i\hbar$. Ezek után néhány látszólag azonos átalakítással arra jutunk, hogy $i\hbar$ eltűnik:

$$\begin{aligned} i\hbar &= \langle m | i\hbar | m \rangle = \langle m | [\hat{\phi}, \hat{L}_z] | m \rangle = \\ &= \langle m | \hat{\phi} \hat{L}_z | m \rangle - \langle m | \hat{L}_z \hat{\phi} | m \rangle = \\ &= m(\langle m | \hat{\phi} | m \rangle - \langle m | \hat{\phi} | m \rangle) = 0, \end{aligned}$$

ahol kihasználtuk, hogy ha $\hat{L}_z |m\rangle = m |m\rangle$, akkor $\langle m | \hat{L}_z = \langle m | m$, hiszen az impulzusmomentum bármelyik komponensének operátora önadjungált.

2. paradoxon

Tekintsük az impulzus operátort egy $[-a, a]$ intervallumon mozgó részecskére vonatkozóan. Ha $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$, akkor definíció szerint $\langle p | \hat{p}^\dagger = \langle p | p^*$, de mivel $\hat{p}^\dagger = \hat{p}$, ezért az előző kifejezést $\langle p |$ -vel, az utóbbit pedig $|p\rangle$ -vel megszorozva azt kapjuk, hogy $p = p^*$, ami szokásosan azt fejezi ki, hogy egy önadjungált operátor sajátértékei valósak. De koordináta-reprezentációban

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x},$$

egy $\sim \exp(ipx/\hbar)$ síkhullám pedig akármilyen p komplex szám esetén is \hat{p} sajátfüggvénye. Akkor lehetséges, hogy az impulzus nem valós mennyiség?

3. paradoxon

Tekintsünk az előző elrendezésben egy olyan kvantumállapotot, amelynek hullámfüggvénye arányos $\sin(x^2 - a^2)$ -tel. Az energia szórásnégyzetének szokásos $\Delta E^2 = \langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle - (\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle)^2$ kiszámításakor arra jutunk, hogy a doboz méretének változtatásakor a szórásnégyzet egy kritikus ponton nullává, azon túl pedig negatívvá válik, ami fizikailag értelmezhetetlen.

Mindegyik példában ott keresendő a probléma, hogy a Dirac-féle absztrakt megfogalmazásban sehol sem kerül elő az a tény, hogy nem korlátos fizikai mennyiségeket reprezentáló operátorok legjobb esetben is a Hilbert-tér csak egy mindenütt sűrű részhalmazán definiálhatók. Ha a bra-ket formalizmust naivul, mint végtelen hosszú sor- és oszlopvektorok közötti manipulációként képzeljük el, problémákba ütközünk. A kiutak megkereséséhez át kell gondolnunk, hogy egyáltalán matematikailag értelmes műveleteket végzünk-e el a fenti számítások során.

Feloldások

1. paradoxon feloldása

Ahhoz, hogy az $|m\rangle$ állapotokkal műveleteket végezhessünk el, meg kell határoznunk, hogy a szóban forgó operátorok egyáltalán milyen Hilbert-térbeli elemekre hathatnak. Mivel az azimutszög 2π periodikus, az

$$\hat{L}_z \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

operátor értelmezési tartománya $\mathcal{D}(\hat{L}_z) = \{\psi \in \mathcal{L}_2: \psi' \in \mathcal{L}_2, \psi(0) = \psi(2\pi)\}$. Nyilvánvalóan $\mathcal{D}(\hat{\phi} \hat{L}_z) = \mathcal{D}(\hat{L}_z)$, viszont gondoljuk meg, hogy $\mathcal{D}(\hat{L}_z \hat{\phi}) \neq \mathcal{D}(\hat{\phi} \hat{L}_z)$, hanem $\mathcal{D}(\hat{L}_z \hat{\phi}) = \{\psi \in \mathcal{L}_2: \psi' \in \mathcal{L}_2, \psi(2\pi) = 0\}$, hiszen \hat{L}_z utóbbi esetben biztosan olyan függvényre hat, amely $\phi = 0$ -ban eltűnik. Mivel a kommutátor értelmezési tartománya $\mathcal{D}([\hat{L}_z, \hat{\phi}]) = \mathcal{D}(\hat{\phi} \hat{L}_z) \cap \mathcal{D}(\hat{L}_z \hat{\phi})$, ezért arra $\mathcal{D}([\hat{L}_z, \hat{\phi}]) = \{\psi \in \mathcal{L}_2: \psi' \in \mathcal{L}_2, \psi(0) = \psi(2\pi) \equiv 0\}$ adódik. Ez azt jelenti, hogy a kommutátor nem hathat $|m\rangle$ -re, hiszen azok $\sim \exp(im\phi)$ állapotok. Ezért a „levezetés” már a második lépéstől kezdve értelmetlen.

2. paradoxon feloldása

Gondoljuk át, hogy \hat{p} -nek mi lehet az értelmezési tartománya. Szeretnénk, hogy $\hat{p} = \hat{p}^\dagger$ legyen, ezért csábítóan tűnik előírni, hogy \hat{p} olyan állapotokra hathasson, amelyekre teljesül, hogy $\psi(a) = 0 = \psi(-a)$. Ez abból következik, hogy ahhoz, hogy koordináta-reprezentációban a

$$\langle \phi | \hat{p} | \psi \rangle = \int \phi^* (\hat{p} \psi) \equiv \int (\hat{p} \phi)^* \psi$$

azonosság teljesülhessen, szükséges, hogy parciális integrálás után a kiintegrált rész nulla legyen. Így $\mathcal{D}(\hat{p}) = \{\psi \in \mathcal{L}_2: \psi' \in \mathcal{L}_2, \psi(a) = 0 = \psi(-a)\}$. Eszerint viszont \hat{p} nem is hathat $|p\rangle$ -re, de ekkor egyik paradoxonból a másikba jutunk, ugyanis így \hat{p} -nek nincs sa-

játvektora, spektruma pedig üres, miközben fizikailag tudjuk, hogy a utóbbi a valós számoknak valamilyen részhalmaza kell legyen. A létrejött új látszólagos el-
lentmondás oka az, hogy a fenti értelmezési tartományal definiált impulzusoperátor nem önadjungált.

Ezen a ponton meg kell különböztetnünk az önadjungált és hermitikus operátorokat. Hermitikus az az operátor, amelyre teljesül a fenti szimmetricitás, azaz balra és jobbra is „hathat”. Viszont csak az a hermitikus operátor önadjungált, amelyre az adjungált operátor értelmezési tartománya megegyezik az eredetivel. Könnyen meggondolható, hogy \hat{p} esetében ez nem igaz. Mint az ismeretes, az adjungált operátor, \hat{p}^\dagger , a

$$\int \psi^*(\hat{p}\phi) = \int \tilde{\psi}^* \phi \text{ és } \tilde{\psi} = \hat{p}^\dagger \psi$$

összefüggésekkel definiálható. Rögtön látszik, hogy ha $\phi \in \mathcal{D}(\hat{p})$, akkor $\hat{p}^\dagger = \hat{p}$, viszont $\mathcal{D}(\hat{p}^\dagger) \neq \mathcal{D}(\hat{p})$, ψ -től ugyanis már semmilyen határfeltételt nem kell megkövetelni, vagyis $\mathcal{D}(\hat{p}^\dagger) = \{\psi \in \mathcal{L}_2; \psi' \in \mathcal{L}_2\}$. A tétel, amely szerint önadjungált operátorok spektruma valós, \hat{p} -re nem teljesül.

Felmerül a kérdés, hogy akkor milyen operációt, pontosabban milyen értelmezési tartománnyal rendelkező operátort kell az impulzussal azonosítani. Általánosabban: ha van egy hermitikus operációnk, akkor értelmezési tartománya kiterjeszthető-e olyan módon, hogy az önadjungálttá váljon? A választ Neumann János idevonatkozó tétele adja, amely a $(\hat{p} \pm i\mathbb{1})$ operátorok tulajdonságairól szól. Az úgynevezett defektindexek az előbbi operátorok magtereinek dimenziói: $n_+ = \dim \text{Ker}(\hat{p} + i\mathbb{1})$, és a tétel szerint akkor és csak akkor létezik önadjungált kiterjesztés, ha $n_+ = n_-$. A kiterjesztett operátorra teljesül, hogy $n_+ = n_- \equiv 0$, a sajátértékek pedig ekkor már szigorúan valósak. Ha $n_+ \neq n_-$, akkor egy hermitikus operátor nem terjeszthető ki önadjungált módon.

Az impulzus esetére azt lehet találni, hogy ha

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x},$$

akkor \hat{p} csak olyan esetekben önadjungált, ha $\mathcal{D}(\hat{p}) = \{\psi \in \mathcal{L}_2; \psi' \in \mathcal{L}_2, \psi(-a) = e^{i\alpha} \psi(a)\}$, ahol α valós szám. Látszik, hogy $\alpha = 0$ -ra megkapjuk a szokásos szimmetrikus határfeltételt, amely fizikailag plauzibilis, de matematikai hátterét az előbb leírtak adják. A határfeltétel diszkrété és egyúttal valóssá teszi a lehetséges sajátértékeket, vagyis a valós spektrumra vonatkozó, fizikailag motivált elvárásaink így már teljesülnek.

Érdeemes meggondolni az $a \rightarrow \infty$ esetet is. Ekkor az impulzus lehetséges diszkrét értékei a határátmenet során folytonossá válnak, \hat{p} -nek pedig nem lesznek sajátvektorai és sajátértékei a Hilbert-térben. A \hat{p} operátor spektrumának azonban a valós számok halmaza továbbra is a része marad olyan értelemben, hogy a $(\hat{p} - p\mathbb{1})^{-1}$ operátor – bár $a \rightarrow \infty$ esetén létezik – nem korlátos (ha nem is létezne, akkor beszélhetnénk p sajátértékről). Ahogy erre cikkünk első felében kitértünk, ez esetben \hat{p} a Hilbert-téren ható lineáris funkcionál-

lok halmazára terjesztendő ki, vagyis a sajátérték-probléma kivezet \mathcal{L}_2 -ből, és a sajátvektorok a temperált disztribúciók között keresendők [3, 4].

3. paradoxon feloldása

Az utolsó paradoxon feloldása az előzőek fényében már nem túl bonyolult. A problémát az okozza, hogy a

$$\langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{4m^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \right) \psi$$

kifejezés nem állítja elő az energia négyzetének átlagos értékét, ami definíció szerint

$$\langle E^2 \rangle = \sum_i p_i E_i^2,$$

ahol p_i az i -edik energiaszint (E_i) valószínűsége a ψ állapotban. Ez arra, az olvasó által is könnyen ellenőrizhető állításra vezethető vissza, hogy a formális

$$\hat{H}^2 | \psi \rangle = \sum_i c_i E_i^2 | \psi_i \rangle$$

összefüggés jobb oldalán látható összeg divergens (itt $| \psi \rangle = \sum_i c_i | \psi_i \rangle$ és $| \psi_i \rangle$ az E_i -hez tartozó állapot). Vagyis az egyenlet mindkét oldalát $\langle \psi |$ -vel beszorozva, nem kapunk értelmes eredményt, és főleg nem tudjuk levezetni a $\langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle = \langle E^2 \rangle$ szokásos összefüggést.

Az előző esetekhez hasonlóan a szóban forgó operátor(ok) értelmezési tartományainak gondos elemzése vezet el bennünket a probléma feloldásához. Először keressük meg $\mathcal{D}(\hat{H})$ -t! Első lépésben szeretnénk látni, hogy \hat{H} hermitikus. Ennek megmutatásához kétszer kell parciális integrálást elvégeznünk, a kiintegrált részek eltűnésének minimális feltétele, hogy a hullámfüggvények eltűnjenek a határokon. Ezt az is indokolja, hogy a doboz falait végtelen magas potenciálfalként elképzelve minden fizikai hullámfüggvény $\pm a$ -ban nullához tart. Vagyis $\mathcal{D}(\hat{H}) = \{\psi \in \mathcal{L}_2, \psi'' \in \mathcal{L}_2, \psi(\pm a) = 0\}$, amiről könnyen látszik, hogy a hermiticitás mellett önadjungált operációt definiál. Hasonlóan, a \hat{H}^2 operátor is önadjungált, de itt a parciális integrálások során egy új feltételt is kapunk, a hullámfüggvények második deriváltjának is el kell tűnnie a határokon. Vagyis $\mathcal{D}(\hat{H}^2) = \{\psi \in \mathcal{L}_2, \psi'''' \in \mathcal{L}_2, \psi(\pm a) = 0, \psi''(\pm a) = 0\}$, ami azt jelenti, hogy $\mathcal{D}(\hat{H}^2) \subset \mathcal{D}(\hat{H})$.

Rögtön látszik, hogy a szóban forgó kvantumállapot, amelynek hullámfüggvénye $\psi \sim \sin(x^2 - a^2)$, nincs benne $\mathcal{D}(\hat{H}^2)$ -ben, vagyis nem lepődünk meg azon, hogy az energia négyzetének várható értékére helytelen eredményt kapunk a

$$\langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{4m^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \right) \psi$$

szabályból. Vegyük azonban észre, hogy mivel $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$, Dirac szerint az alábbi értelmezés is érvényes:

$$\langle \psi | H^2 | \psi \rangle = \langle \psi | H^\dagger H | \psi \rangle = (\langle \psi | \hat{H}^\dagger) (\hat{H} | \psi \rangle).$$

Utóbbinál viszont \hat{H}^2 meg sem jelenik a számítások során, és ez esetben könnyen meggondolható, hogy a helyes eredményhez jutunk! \hat{H} hathat $|\psi\rangle$ -re (és $\hat{H}^\dagger \langle \psi|$ -re), aminek következtében $\langle E^2 \rangle = \sum_i p_i E_i^2$ valóban előáll. A Dirac-formalizmus tehát nem ad egyértelmű kiszámítási módot különböző átlagok meghatározására. Sőt, amikor két számítási mód között egyenértékűséget tételez fel, az értelmezési tartományok tiszteletben tartásának hiányában könnyedén kiderülhet, hogy valamelyikük téves eredmény(ek)re vezethet.

Záró megjegyzések

A Dirac-féle absztrakt formalizmust a kvantummechanika jól bevált elvi és gyakorlati háttérének is szokás tekinteni. Segítségével összekapcsolódik a Heisenberg által kidolgozott mátrixmechanika és a schrödingeri hullámmechanika elmélete. Konkrét számítások során olyan analógia szerint gondolkozunk, hogy a $|\psi\rangle$ ket egy oszlopvektor, míg párja, a $\langle \psi|$ bra egy sorvektor, mint a duális tér egy eleme. Az operátorok végtelen mátrixok, és az asszociativitási tulajdonságot minden esetben érvényesnek tekintjük. Ennek megfelelően Dirac szerint például a $\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle$ mátrixelem kiszámítható $(\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle)$ vagy akár $\langle \phi | (\hat{A} | \psi \rangle)$ módon is, a két kifejezés egyenértékű. Mint arra feljebb

rámutatunk, ha az \hat{A} operátor nem korlátos, akkor az értelmezési tartományokhoz köthető problémák miatt a két kiszámítási mód eltérhet egymástól, egyik vagy másik akár teljesen értelmetlennek is bizonyulhat. Úgy véljük, hogy hasonló felismerések irányíthaták Neumann Jánost a kvantummechanika Hilbert-térrel történő megfogalmazása helyett az algebrai irányba [6, 7]. Ide vonatkozó munkáinak 100 éves évfordulója felé közeledve meggondolandó, hogy a magyarországi egyetemi szintű kvantummechanika-oktatás során – legalábbis érintőlegesen – elhangozzék a nemkorlátos operátorok általa felismert problémáinak tárgyalása.

Irodalom

1. Jánossy L., Tasnádi P.: *Vektorszámítás I.* Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2002.
2. F. Kronz, T. Lupher: Quantum Theory and Mathematical Rigor. *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Fall 2019 Edition), Edward N. Zalta (ed.), <https://plato.stanford.edu/archives/fall2019/entries/qt-nvd/>.
3. R. de la Madrid: The role of the rigged Hilbert space in Quantum Mechanics. *Eur. J. Phys.* 26 (2005) 287.
4. Leon A. Takhtajan: Quantum Mechanics for Mathematicians. *Graduate studies in Mathematics Vol. 95*, American Mathematical Society, 2008.
5. F. Gieres, *Rep. Prog. Phys.* 63 (2000) 1893.
6. J. von Neumann: Mathematische Begründung der Quantenmechanik [Mathematical Foundation of Quantum Mechanics]. *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse* (1927) 1–57.
7. J. von Neumann: Allgemeine Eigenwerttheorie Hermiteischer Funktionaloperatoren [General Eigenvalue Theory of Hermitian Functional Operators]. *Mathematische Annalen* (1929) 49–131.

GERGELY GYÖRGY (1923–2020)

Egy évvel ezelőtt, néhány nappal 97. születésnapja előtt halt meg *Gergely György*, Gyurka bácsi, Gyurka, Gergely doktor. Már a sok megszólítás is mutatja, hogy hosszú élete alatt a fizikus nemzedékek egész sorával sikeresen működött együtt és jó példát mutatott arra, hogy alapkutatásból indulva kell a hasznosításig eljutni. Vele a felülettudomány nemzetközileg is kimagasló művelőjét, igaz barátot és tanácsaival mindig segítségünkre álló, nagy enciklopédikus tudással bíró munkatársat, intézetünk korelnökét veszítettük el.

Gergely György 1923-ban született Vácott és ott végezte a középiskolát a Piarista Gimnáziumban. A tudományos munkát, a kutatást élethivatásának választó nemzedék tagja és ez határozta meg továbbtanulását is. 1942-ben kezdte meg egyetemi tanulmányait a József Nádor Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen. Azért jelentkezett ide, mert mindenképpen kutatással akart foglalkozni és abban az időben a Pázmány Péter Tudományegyetemen a fizika területén csak tanárképzés folyt. Utólag visszatekintve megdöbbenhetünk azon, hogy 1942–1947-ig háború, ostrom ellenére az egyetemi oktatás „gond” nélkül haladt

és jól képzett diákokat bocsátottak ki. Ez abból is látszik, hogy *Bay Zoltán*, aki csak jó tanulókkal foglalkozott, elfogadta doktori munkára és 1948 februárjában föl is vette a Tungstram Kutatóba, ami akkor a szilárdtest-fizikai kutatások központja volt. Miután Bay Zoltán emigrált, Gergely György doktori munkáját *Szigeti György* vezetésével fejezte be lumineszcencia témából. A dolgozatot *Simonyi Károly* bírálta és az olyan jó volt, hogy azt a *Journal of the Optical Society of America* folyóiratban lehetett közölni.¹ Végzése idején a Tungstram Kutatót átvette a Távközlési Kutatóintézet (TKI), és a fő feladat a Bay Zoltán által korábban indított radarkutatás lett. Itt a képernyőfejlesztésben dolgozott, ami a fényemisszió alapkérdéseitől a radar, majd a televíziós képcsövek gyártásáig húzódott. Az alapkutatásban nagytisztaságú cink-szulfid porok fényemissziójának kérdéseivel foglalkozott, és a cink-szulfidos fényforrások fejlesztésénél elérték a fizikai határt. A tudományos munka minőségét jelzi, hogy cink-szulfid kutatásaiból akkor közölt cikkeire még 2014-ben is voltak hivatkozások. Az alapkutatás

¹Elolvasható: <https://doi.org/10.1364/JOSA.40.000356>