

# KVANTUM FŐNIX – HULLÁMCSOMAG-DINAMIKA AZ INTERNETEN

Vancsó Péter, Biró László Péter, Márk Géza István  
MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet  
Nanoszerkezetek Osztály

A kvantummechanika ismerete alapvető fontosságú, hogy megértsük a körülöttünk lévő természetet, annak működését. Az elektronok mozgásának, az atomok és molekulák tulajdonságainak leírásához a klasszikus fizika törvényei (már) nem elegendők. Habár az a mikroszkopikus méret- és időtartomány, amelyben a kvantummechanika törvényei érvényesek, távol esik emberi világunk méret- és időskálájától, ez a tudomány mégsem csupán a kutatók birodalma. A 21. század elején az embereket a mindennapokban körülvevő modern technikai eszközök [1] – például tranzisztor, lézer – működésének megértésénél is nélkülözhetetlenek a kvantummechanikai ismeretek. Ezeknek az ismereteknek az átadása az oktatás feladata, legyen szó középiskolai vagy egyetemi szintű oktatásról [2].

A kvantummechanika oktatása az egyik legnehezebb feladat a fizika tanítása folyamán, mivel a diákok túl absztraktnak, matematikailag túl bonyolultnak tartják [3]. Ez érthető is, ha végiggondoljuk, hogy a

klasszikus fizika fogalmkörének és törvényeinek megértésénél segítségünkre vannak mindennapi tapasztalataink, mindenki által könnyen elvégezhető kísérletek. Ezzel szemben a kvantummechanika mérettartományában végzett mérések többnyire közveettek és nehezen értelmezhetők.

Matematikai szempontból ahhoz, hogy klasszikus mechanikai leírását adjuk egy részecske (tömegpont) mozgásának, 6 paramétert kell megadnunk:  $\mathbf{r}(t)$  és  $\mathbf{p}(t)$ , azaz a hely és a lendület  $x$ ,  $y$  és  $z$  komponensét az idő függvényében. Ezek határozzák meg a többi dinamikai változót, például az energiát. A Newton-törvények ismeretében kiszámíthatjuk az  $\mathbf{r}(t)$  és  $\mathbf{p}(t)$  függvények értékeit minden pillanatra, ha ismerjük a függvények értékét valamely tetszőleges  $t_0$  kezdeti pillanatban, azaz adottak az  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(t_0)$  és  $\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}(t_0)$  kezdeti hely- és lendületértékek, továbbá ismerjük a részecskére ható erőket. A kvantummechanikai leírás mód ennél bonyolultabb. A részecske állapotát  $t$  pillanatban egy hullámfüggvény adja meg,  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , amely

tartalmazza az összes információt, amit a részecskéről tudni lehet. Látható tehát, hogy a 6 paraméter helyett, most végtelen számú paraméterünk van: a  $\psi$   $3+1=4$  változós függvény értékei a tér minden pontjában, minden időpontban. A  $\psi(\mathbf{r}, t)$  függvényt valószínűségi amplitúdónak nevezzük, mert

$$\rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}^3 = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}^3$$

annak a valószínűségét adja meg, hogy a részecske  $t$  időpontban egy  $\mathbf{r}$  pont körüli  $d\mathbf{r}^3$  térfogatelemben található,  $\rho(\mathbf{r}, t)$  pedig a megtalálási valószínűségi sűrűség. A hullámfüggvény időfejlődését az időfüggő Schrödinger-egyenlet írja le, amely egy homogén lineáris parciális differenciálegyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t).$$

Ez az az egyenlet, amely mai ismereteink szerint az atom- és molekulafizika, a szilárdtestfizika, sőt a kémia és a biológia összes (nem-relativisztikus) jelenségét kormányozza. Következésményeit számtalan kísérlet igazolta az egyenlet megalkotása óta eltelt több, mint 80 év folyamán.

A Schrödinger-egyenlet determinisztikus; adott  $\psi_0(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}, t=t_0)$  kezdőállapot esetén a hullámfüggvény kiszámítható bármely  $t$  időpontra. A véletlenszerűség, az indeterminizmus, a fizikai mennyiség mérése folyamán jelenik meg a kvantummechanikában. A Schrödinger-egyenlet megoldásához a kezdő állapot ismeretén kívül szükséges az adott fizikai rendszert meghatározó  $\mathbf{H}$  Hamilton-operátor. Konzervatív rendszerek esetén  $\mathbf{H} = \mathbf{K} + \mathbf{V}$ , ahol  $\mathbf{K}$  a kinetikus,  $\mathbf{V}$  pedig a potenciális energia operátora, tehát a rendszert végső soron a  $\mathbf{V}$  potenciáloperátor írja le. Ha ez a potenciál lokális, akkor a potenciális energia operátor hatása egy egyszerű  $V(\mathbf{r})$  potenciálfüggvénnyel adható meg.

Látható tehát, hogy a kvantummechanika matematikai nyelvezetének megértése szintén nem egyszerű feladat, és további probléma, mint említettem, hogy a jelenségeket nem tudja a diák a mindennapi tapasztalataihoz kapcsolni –  $\psi(\mathbf{r}, t)$  komplex értékű függvény(!) –, a mérések pedig mindig közvetettek: maga a hullámfüggvény nem mérhető, csak a belőle származtatott mennyiségek, az úgynevezett megfigyelhető mennyiségek, mint például  $\langle \mathbf{r} \rangle$ , a hely várható értéke:

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \langle \psi | \mathbf{r} | \psi \rangle = \int \int \int \psi^* \mathbf{r} \psi dx dy dz.$$

Ahhoz, hogy mégis szemléletes képet tudjunk adni a diákoknak a Schrödinger-egyenlet „működéséről”, egy nagyon hasznos eszközt alkalmazhatunk: a számítógépes szimulációt. A mai személyi számítógépek sebessége és tárolókapacitása már bárki számára lehetővé teszi egyszerű kvantummechanikai rendszerek numerikus vizsgálatát. Ha például a háromdimenziós hullámfüggvényt egy  $x, y, z$ -ben egyaránt 256 pontból álló felosztáson modellezzünk, a hullámfüggvény (duplapontos komplex) tárolásához 256 Megabyte tárolókapacitás szükséges – egy mai köznapi PC-ben

általában több mint 1024 Megabyte memória található. Ha a számítást két dimenzióra korlátozzuk és/vagy kihasználjuk az adott rendszer szimmetriáit, akkor még kevesebb memória elegendő a számításokhoz.

## Web-Schrödinger

Az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet Nanoszerkezetek Osztályán, belga kutatókkal együttműködésben kifejlesztett Web-Schrödinger egy olyan interaktív számítógépes szimuláció, amely szemléletesen teszi az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldását. A numerikus számítás maga egy alkalmazsszerveren fut, így a felhasználónak nem kell telepíteni semmit a saját számítógépén, egyszerű web-böngésző segítségével használhatja a programot (<http://www.nanotechnology.hu/online/web-schroedinger/index.html> címen). A program interaktív voltából adódóan pedig a felhasználó betöltheti az előre elkészített példákat, és változtathat azok beállításain, továbbá készíthet teljesen új példákat, amelyek mentése szintén lehetséges. Ahhoz, hogy megértsük hogyan „kormányozhatja a hullámfüggvényt” a felhasználó a szimuláció során, kicsit részletesebben meg kell ismerkednünk a programmal.

A szimuláció három lépésből áll:

- Először meg kell határozni a  $\psi_0(\mathbf{r})$  kezdőállapot- és a  $V(\mathbf{r})$  potenciálfüggvényeket, és beállítanunk néhány számolási paramétert, mint például a szimulált időintervallumot.
- Ezután a program kiszámítja a hullámfüggvény időfejlődését.
- Végül megjeleníti a megtalálási valószínűség időfejlődését.

## A hullámcsomag-dinamikai módszer

*Erwin Schrödinger* 1926-ban [4] azzal a céllal alkotta meg a kvantummechanikai hullámcsomag fogalmát, hogy hidat építsen a klasszikus és a kvantummechanika között. A hullámcsomag egy térben lokalizált hullámfüggvény, azaz olyan kvantumállapotot ír le, amikor a részecske nagy valószínűséggel egy adott pont közelében található. A Schrödinger-egyenletből levezethető, hogy a hullámcsomag tömegközéppontja jó közelítéssel úgy mozog, mint egy klasszikus tömegpont, ha a potenciál lassan változik a hullámcsomag méretéhez képest. A hullámcsomag leggyakrabban alkalmazott formája a Gauss-hullámcsomag – a Web-Schrödinger program is ezt használja kezdőállapotként:

$$\psi_0(\mathbf{r}) = N \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) \exp\left(-\frac{[\mathbf{r} - \mathbf{r}_0]^2}{a^2}\right),$$

ahol  $\mathbf{k}_0 = (2\pi/\lambda)\mathbf{n}$  a hullámcsomag hullámszámvektora,  $\lambda$  a de Broglie hullámhossz,  $a$  pedig a hullámcsomag szélessége – minél nagyobb  $a$ , annál szélesebb a hullámcsomag. Az  $\mathbf{n}$  vektor a részecske haladási irá-



File	Edit	Time development	Results	Help & more
Mesh	Potential	Initial state	Calculation parameters	

Mesh parameters  
 $E_0 = 384$ ,  $E_1 = 384$ ,  $\omega_0 = -64 \text{ \AA}$ ,  $\omega_1 = -64 \text{ \AA}$ ,  $\omega_2 = 328 \text{ \AA}$ ,  $\omega_3 = 328 \text{ \AA}$

Objects

Def	Type	V <sub>min</sub>	V <sub>max</sub>	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>
Def1	plane	4.81	0	18.8	0	0	0	18.8
Def2	circle	4.81	0	0	0	0	0	0
Def3	circle	0	0	0	0	0	0	0
Def4	circle	4.81	0	0	0	0	0	0
Def5	plane	4.81	0	0	0	0	0	0

Grayscale image of the 2D potential

- Click the checkboxes before the object to remove the object
- Give object potential values in eV
- Give all length values in Angstroms
- Give the angle in Degree

1. ábra. STM tű – szén nanocső – hordozó felület potenciál konstukciója a Web-Schrödingerben – a Web böngésző ablakából kimentett képernyőkép. Láthatjuk, hogyan lehet összerakni az STM leképezés szimulációjához használt potenciált a különféle objektumokból. A jobboldali kép az így elkészült potenciált mutatja: a fehér szín a nulla potenciál, a fekete  $-9,81 \text{ eV}$ , ezt a potenciálkád mélységet a grafit Fermi-energiájából és kilépési munkájából számítottuk ki, lásd [5]. A nanocső átmérője  $1 \text{ nm}$ , ez megfelel egy tipikus egyfalú szén nanocső átmérőjének. A méreteket a programban ángströmökben ( $1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$ ), az energiákat elektronvoltban kell megadni.

nyát adja meg,  $N$  pedig egy normálási faktor. A hullámszám a részecske lendületéből így számítható ki:  $\mathbf{k}_0 = \mathbf{p}_0/\hbar$ ,  $\hbar = h/2\pi$ , ahol  $h$  a Planck-állandó.  $\mathbf{r}_0$  adja meg a részecske helyét – a negatív kitevőjű exponenciális függvény miatt ezen a helyen maximális a  $\psi$  hullámfüggvény abszolút értéke,  $\mathbf{r}_0$ -tól távolodva gyorsan csökken. Mivel  $\rho = |\psi|^2$  adja a megtalálási valószínűségi sűrűséget a hely függvényében, azonnal láthatjuk, hogy a Gauss-hullámcsomag valóban lokalizált állapotot ír le: a részecske megtalálási valószínűsége az  $\mathbf{r}_0$  pontban a legnagyobb, attól távolodva rohamosan csökken – lásd a 2. ábrát!

Mint azt korábban részletesen leírtuk [5], a hullámcsomag-dinamikai módszerben egy adott potenciáltérben vizsgáljuk meg a hullámcsomag mozgását (szimulált szórás kísérlet). Ennek szemléltetése pedig kiemelkedő fontosságú, ugyanis a diákok nehezen tudják elképzelni, hogyan terjed egy elektron, mi történik, ha potenciálgáttal érintkezik, hogyan megy végbe a kölcsönhatás stb.

## Paraméterek

Elsőként a felhasználó a számolási doboz méretét, illetve annak felosztását tudja beállítani. Jellegzetes nanofizikai alkalmazásoknál a számolási doboz mérete néhány nanométer, a felosztást pedig úgy kell megadni, hogy a szimulációban előforduló de Broglie hullámokat jól mintavételezze. Elektronvolt nagyságrendű energiáknál ez – elektronra –  $0,01\text{--}0,1 \text{ nm}$  lépésközt jelent.

A második lépés a potenciálfüggvény megadása, voltaképpen ezzel határozzuk meg azt a fizikai rendszert, amelyet vizsgálni akarunk. A különböző potenciálokkal vagyunk tehát képesek különböző jelenségek szemléltetésére, mint például az alagutazás folyamata, a tiltott és megengedett sáv kristályokban, dobozba zárt részecske stb.

Háromfajta potenciál „építőköve” közül választhatunk; a kör, a téglalap és a félsík, amelyeket tetszőleges módon és számban helyezhetünk el a számolási dobozban, természetesen értékeik megadásával, ezáltal széles alkalmazási spektrumot kínálva a felhasználóknak. Az 1. ábrán, amely egy, a programból kimentett képernyőkép, láthatjuk, hogyan lehet bonyolult potenciálokat is egyszerűen felépíteni a programmal: ezen a képen egy szén nanocső pásztázó alagútmikroszkópos leképezésének szimulációjánál használt potenciált [5] mutatunk be. Az 1. ábrán az STM-tű – nanocső – hordozó felületnek a csőre merőleges keresztmetszetét láthatjuk: az alsó fekete félsík a hordozót, a középső gyűrű a nanocsövet (amely a Van der Waals potenciálon „lebeg” a hordozó fölött, körülbelül  $0,335 \text{ nm}$  távolságra), a felső félsík a félkör alakú kiemelkedéssel az alagútmikroszkóp tujét szimulálja. Az STM leképezésnek ezzel az egyszerű, geometriai modelljével számos kísérleti eredmény vált értelmezhetővé, amelyekről részletesen az alábbi cikkekben lehet olvasni [5–7].

A következő lépés a kezdeti hullámcsomag paramétereinek megadása. Itt tudja a felhasználó a hullámcsomag kezdeti helyét, kinetikus energiáját, szélességét és még egyéb, ehhez kapcsolódó adatokat beállítani.

Végül a már említett számolási lépésközt ( $\delta t$ ) és a szimulált időtartamot adhatjuk meg. A számolás eredményét a program képek formájában jeleníti meg (results menüpont). A képeken a megtalálási valószínűségi sűrűség,  $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  időfüggése látható.

Megismerkedvén lehetőségeinkkel, a cikk következő részében néhány példával szeretnénk bemutatni a program működését (ezek szintén megtalálhatóak a „példák” menüpont alatt).

## Példák

### Alagúteffektus

A klasszikus fizika törvényei szerint egy  $E$  energiával rendelkező részecske nem tud behatolni  $V > E$  potenciállal rendelkező térrészbe, ez számára ugyanis tiltott tartomány. Ennek szemléletes példája a mély gödör alján lévő, abból kigurulni nem tudó labda esete. A kvantummechanika azonban mást mond: hullámtulajdonságából kifolyólag a részecskének van egy véges valószínűségű esélye arra, hogy áthaladjon az energiáját meghaladó „magasságú” potenciálfalon. Ezt a jelenséget nevezzük alagúteffektusnak, ennek nem egy megjelenési formájával találkozhatunk a természetben és a technikában, a radioaktív bomlástól a villanykapcsoló működéséig. A Web-Schrödingerrel most ezt a jelenséget szeretnénk bemutatni.

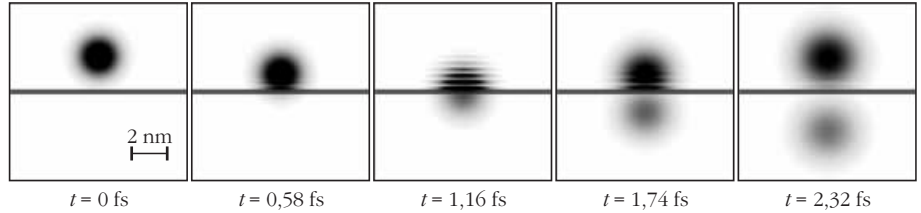
A beállítások kritériuma, hogy a potenciálfal magassága legyen nagyobb a hullámcsomag energiájánál. Ekkor az áthaladási valószínűség jó közelítéssel

$$T \sim e^{-2\kappa d},$$

ahol  $\kappa$  paraméter a részecske tömegéből, energiájából, illetve a potenciál nagyságából számítható. Innen

már látszik, hogy nem érdekes a potenciállal szélességét túl nagyra választani, mert akkor az átjutás mértéke túlságosan csökkenhet, ezáltal a jelenség kevésbé szemléletes. A példában a potenciál értéke  $V = 7$  eV, a kezdeti energia pedig  $E = 5$  eV. A potenciál vastagsága  $d = 2$  Å. Ezekkel az értékekkel az átmeneti valószínűsége  $T = 0,17$  értéket kapunk a fenti képletből, a visszaverődési valószínűség tehát  $R = 1 - T = 0,83$ .

A megtalálási valószínűsége időfejlődése a 2. ábrán látható. Mivel a kezdeti hullámcsomagnak egy  $-y$  („lefelé”) irányú lendületet adtunk, megfigyelhetjük, hogy időfejlődése során a  $-y$  irányba halad – amíg csak el nem éri a potenciálfalat. A további képek azt mutatják, ahogyan a hullámcsomag kölcsönhatásba lép a potenciálfallal, az utolsó kép pedig a kölcsönhatás lezajlása utáni végállapotot ábrázolja. A teljes folyamat  $2,32$  fs =  $2,32 \cdot 10^{-15}$  s időt vesz igénybe. A vízszintes csíkokat a visszavert és beérkező hullámok interferenciája okozza. Látható hogy bár a részecske elég nagy eséllyel visszaverődik, mégis véges valószínűséggel átjuthat a potenciálfalon (szürke folt a potenciál túloldalán). Így tehát szemléletes képet sikerült alkotnunk az alagutazás folyamatáról.



2. ábra. Hullámcsomag alagutazása, a  $\rho(x,y;t)$  megtalálási valószínűsége függvény különböző pillanatokra. A felülről lefelé haladó kezdeti hullámcsomag nekiütközik az  $E$  energiájánál nagyobb  $V_0$  magasságú potenciálfalnak. Az áthaladás valószínűségét (az alagutazást) a potenciálfal túloldalán megjelenő hullámcsomag mutatja, a potenciálfal felső oldalán pedig a visszavert hullámcsomagot láthatjuk. A vízszintes sötét sáv a potenciálfalat jelképezi. A szürkeskálájú ábrázolásban a sötétszürke jelenti a legnagyobb, a fehér a nulla megtalálási valószínűséget. Nemlineáris szürkeskálát alkalmaztunk, hogy a nagyobb és kisebb megtalálási valószínűségértékek egyaránt jól látszanak az ábrán.

A 3. ábrán bemutatott szimulációban a potenciálok megegyeznek, de a kezdeti állapotok energiái eltérőek, így szemléltetve a tiltott és megengedett sáv hatását. Láthatjuk, hogy a szimulációban a tiltott sáv esetén is van egy kis áthaladás és a megengedett sáv esetén is egy kis visszaverődés. Ez abból adódik, hogy a hullámcsomag nem egy energia-sajátállapot, azaz van egy bizonyos  $\Delta E$  energiaszórása. Ezért a tiltott (megengedett) sávba eső hullámcsomag – kis valószínűséggel – áthaladhat (visszaverődhet) a kristály-potenciálon. A hullámcsomag  $\Delta E$  energiaszórását természetesen tetszőleges mértékben csökkenthetjük, de ez csak azon az áron lehetséges, hogy a  $\Delta r$  térbeli kiterjedését megnöveljük (azaz egyre inkább közelítünk a síkhullám határesethez). Ám a hullámcsomag térbeli kiterjedésének növelése megnöveli a számolási doboz méretét is.

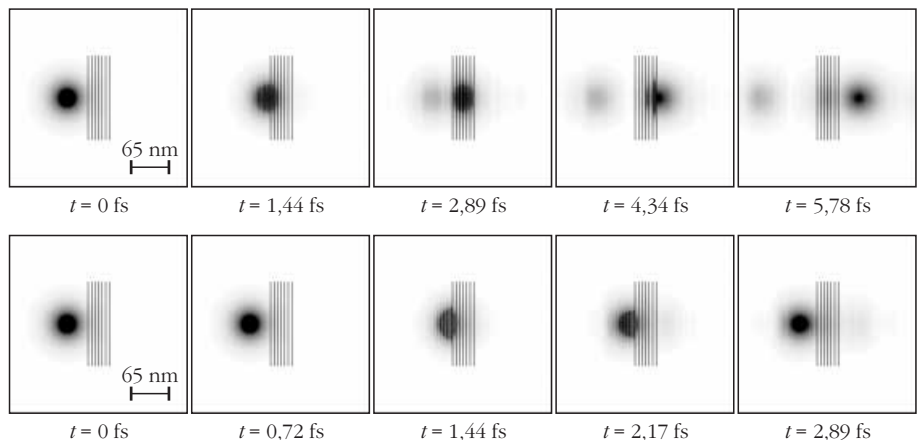
### Tiltott és megengedett sáv kristályokban

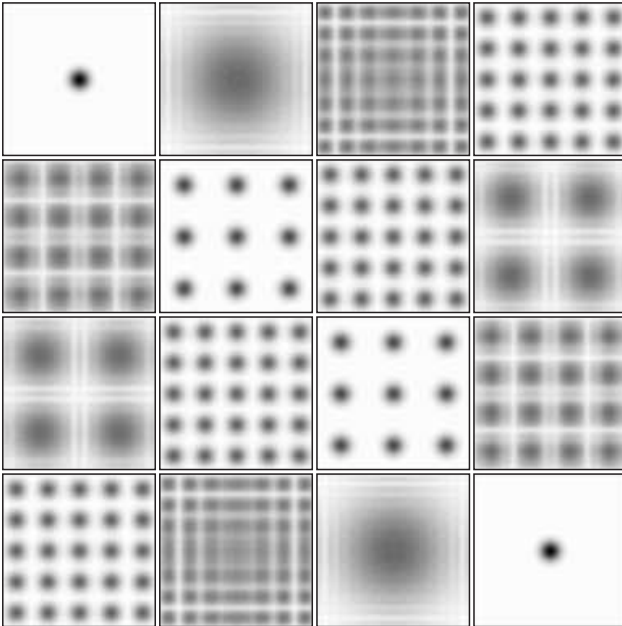
Az ideális kristály a térben ismétlődő, azonos szerkezetű egységekből álló rendszer. Ha egy hullám, amelynek hullámhossza összemérhető a kristály periodicitásával, kölcsönhatásba lép a kristállyal, akkor fellép a diffrakció jelensége. A diffrakció pedig erősen függ a hullámhossztól, ezáltal bizonyos hullámhosszú hullámok át tudnak hatolni a kristályon (megengedett sáv), míg mások visszaverődést szenvednek (tiltott sáv). Ha elektronok szóródnak, akkor ez a jelenség alakítja ki többek között az elektronok sávszerkezetét – ezen alapul a félvezető eszközök működése –, látható fény szóródásánál pedig különböző színek megjelenését tapasztalhatjuk. Azokat a kristályokat, amelyek periodicitása a látható fény hullámhosszának nagyságrendjébe esik, fotonikus kristályoknak nevezzük, és bizonyos ásványoknál és élőlényeknél ez okozza a szín-pompás megjelenést. Ezzel részletesen az alábbi cikk foglalkozik [8].

### A kvantum főnix

A szabad térbeli kvantummechanikai hullámcsomag – azaz, ha a részecske nem hat kölcsön semmi mással – alapvető tulajdonsága a szétfolyás, azaz a megtalálási valószínűség az idő előrehaladtával egyre nagyobb térrészre terjed ki. Megfelelő potenciál alkalmazásával

3. ábra. Megengedett és tiltott sáv. A felső sorban a bejövő hullámcsomag energiájának középértéke 10,61 eV, amely a megengedett sávba esik, ezért a hullámcsomag áthalad a kristályon. Az alsó sorban az energia 14,88 eV, ez egy, a tiltott sávba eső érték, ezért a hullámcsomag visszaverődik. Szürke színnel továbbra is a hullámcsomag megtalálási valószínűsége ábrázoltuk, a sötét vonalak pedig a kristály periodikus potenciálját mutatják. A kristály ebben a szimulációban hét darab, 0,53 Å vastag, 9,81 eV magas potenciálfalból állt, amelyek 5,3 Å távol vannak egymástól. A szórási folyamat a kisebb energiájú hullámcsomag esetén lassabb.





4. ábra. 7 nm széles dobozba zárt részecske időfejlődése látható a képeken, amely jól meghatározott idő – esetünkben 71 fs – után ismét felveszi a kezdeti állapotot, azaz újjászületik. Ennek az időnek a tört részeinél ( $1/2$ ,  $1/3$ ,  $1/4$  ...) a tört újjászületek ( $2\times$ -es,  $3\times$ -os,  $4\times$ -es) figyelhetők meg. Az időfejlődést egy újjászületesi periódus (revival time) hosszúságban ( $T_R = 71$  fs) szimuláltuk és  $T_R/15$  időközönként mintavételeztük. A  $3/15$  és  $6/15$  képeken az ötszörös, az  $5/15$  képen a háromszoros újjászületesést figyelhetjük meg. A mintázatok  $T_R/2$  időtől fordított sorrendben ismétlődnek. A kétszeres újjászületesést nem látjuk, mert a  $T_R/2$  idő nem esik pontosan egyik időfelosztás pontra sem. De a  $7/15$  és  $8/15$  képeken megfigyelhetjük a hullámcsomag alakját a kétszeres rekonstrukció előtt és után kis idővel.

azonban megfordíthatjuk ezt a folyamatot! Azt a jelenséget, amikor a kezdeti hullámcsomag időfejlődése folyamán újra kialakul a kezdeti állapot, quantum revivalnek (kvantumállapot újjászületes) nevezünk. Egy végtelesen mély potenciáldoboz esetén a folyamat érdekessége továbbá, hogy az a periódusidő, ami alatt a hullámfüggvény visszatér kezdeti állapotába, független a kezdeti hullámcsomag paramétereitől, csak a doboz méretei határozzák meg, ami szöges ellentétben áll a klasszikus szemlélettel. Ezt nevezik revival-paradoxonnak, további részletek erről az alábbi cikkben található [9]. Érdemes megemlíteni, hogy hasonló jelenség (Talbot-effektus) már 1836 óta ismert az optikában!

A kvantumállapot újjászületes bemutatásához a „dobozba zárt részecske” modellből indulunk ki, amelyben a hullámcsomag egy kétdimenziós potenciálgödörbe van lokalizálva.  $\rho(x,y;t)$  időfejlődését láthatjuk a 4. ábrán, ahol a szimuláció teljes időtartama egy újjászületesi periódus. Megfigyelhetjük, hogy a kezdeti hullámcsomag először elkezd szétfolyni, majd visszaverődik a potenciálfalról, interferencia-mintázatok alakulnak ki. A szimuláció végére rekonstruálódik a kezdeti állapot. Ám a közbeni időkben is bámulatoson érdekes jelenséget figyelhetünk meg, a többszörös (tört) újjászületeseket: a kezdeti hullámcsomag több példányban rekonstruálódik a potenciáldoboz különböző helyein. A többszörös újjászületesek szimmetriaszerkezetét a  $V(\mathbf{r})$  potenciál szimmetriája szabja meg. Mivel a 4. ábrán a potenciál  $x$  és  $y$  irányban szimmetrikus, a kezdeti hullámcsomag  $x$

és  $y$  irányban is megismétlődik. Mint a hátsó borítón látható színes kép bemutatja, az újjászületes és a többszörös újjászületesek bonyolult alakú hullámcsomagok esetén is bekövetkeznek. A 4. ábrán a fehér felel meg a nulla megtalálási valószínűségi sűrűségnek, a fekete a legnagyobb megtalálási valószínűségi sűrűségnek. Láthatjuk, ahogyan a hullámcsomag szétfolynik, úgy egyre szélesebb lesz, de egyre alacsonyabb lesz a csúcsa. Fizikailag ez azt jelenti, hogy a kezdeti, jól lokalizált állapotban a hullámcsomag az  $\mathbf{r}_0$  hely (ami a 4. ábrán az origó) kis környezetében található nagy valószínűséggel, de később már nagyobb térrészre terjed ki. A többszörös rekonstrukciók esetén, ha a rekonstrukció  $n$ -szeres, a maximális megtalálási valószínűség  $1/n^2$  arányban csökken a kiinduló állapothoz képest.

Természetesen az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásán alapuló hullámcsomag-dinamikai szimulációkat nemcsak az oktatásban, hanem a kutatásban is eredményesen lehet használni. Ennek szemléltetésére a Web-Schrödinger példái közt szerepel még egy érdekes, a hétköznapi tudományból származó példa, amellyel az 1990-es években tanulmányoztuk a szén nanocsövek alagútmikroszkópos leképezését.

## Összegzés

A kvantummechanika megértéséhez nagyon hatékony eszköz a számítógépes szimuláció, amellyel szemléletesen tudunk bemutatni különböző folyamatokat. A Web-Schrödinger egy ilyen szimulációs program, amely a szemléletesség mellett interaktív is. Ezáltal a diákok maguk készíthetnek példákat, modellezhetnek folyamatokat, amelyek segítségével mélyebben megérthetik a kvantummechanika jelenséglátát.

## Epilógus

A hullámcsomag-dinamikai szimulációk még a kvantummechanika filozófiai kérdéseit is segítenek megvilágítani – már az egyszerű alagútjelenség példája segítségével. Ugyanis a hullámcsomag, amíg nem éri el a potenciálgátat, egyenletesen halad és közben szétfolynik. A szétfolyás jelensége ellen még talán nem nagyon berzenkedik a klasszikus szemléletünk – annyi történet mindössze, hogy a részecske helyének „bizonytalansága” egyre nagyobb lesz. Ám az alagútjelenség lezajlása utáni végállapotban (2. ábra) azt láthatjuk, hogy a hullámcsomag két különálló részre oszlott, amelyek egyre távolodnak egymástól – azaz immár nem egy, hanem két hely van, amelynek környezetében nagy valószínűséggel megtalálható a részecske. Nevezük ezeket  $A$  (a potenciálfal egyik oldalán) és  $B$  (a potenciálfal másik oldalán) helyeknek. Az idő múlásával a két rész-hullámcsomag bármilyen messzire távolodhat egymástól. De – mivel az egyrészecske hullámfüggvény valójában egyetlen tömegpont megtalálási valószínűségi sűrűségét határozza meg – a részecske csak az  $A$  hely környezetében, vagy a  $B$  hely környezetében lehet, viszont az,

hogy melyik helyen találjuk meg a részecskét, csak akkor derül ki, mikor megmérjük, hogy hol van. Ám amint megmérjük, hogy például az  $A$  oldalon van-e a részecske és azt találjuk, hogy ott van (illetve nincs), ekkor abban a szempillantásban meghatározottá válik, hogy a másik oldalon nincs (illetve van). Az  $A$  és  $B$  helyeken történő részecske helymeghatározás akkor is antikorrrelációt fog mutatni, ha a két mérés között a  $t = d/c$  időnél rövidebb idő telik el, ahol  $d$  a két hely távolsága és  $c$  a vákuumbeli fénysebesség. Ezekről a kérdésekről lásd bővebben [10, 11] *Geszti Tamás* cikkeit!

## Irodalom

1. Gyulai J.: Az anyagtudomány apoteózisa. *Fizikai Szemle* 46/8 (1996) 264.
2. Márk G. I.: A modern fizika alapjai a műszaki menedzser-képzésben – *Fizikai Szemle* 47/9 (1997) 298.
3. D. F. Styer: Common misconceptions regarding quantum mechanics. *American Journal of Physics* 64 (1996) 31–34.
4. E. Schrödinger: Quantisierung als Eigenwertproblem (Zweitere Mitteilung). *Ann. Phys.* 79 (1926) 489.
5. Márk G. I.: Egy hullámcsomag kalandjai az alagútmikroszkópban. *Fizikai Szemle* 61/6 (2006) 190.
6. G. I. Márk, L. P. Biró, J. Gyulai: Simulation of STM images of 3D surfaces and comparison with experimental data: carbon nanotubes. *Phys. Rev. B* 58 (1998) 12645.
7. G. I. Márk, L. P. Biró, P. Lambin: Calculation of axial charge spreading in carbon nanotubes and nanotube Y-junctions during STM measurement. *Phys. Rev. B* 70 (2004) 115423-1.
8. Rajkovits Zs.: Szerkezeti színek az élővilágban. *Fizikai Szemle* 72/4 (2007) 121.
9. D. F. Styer: Quantum revivals versus classical periodicity in the infinite square well. *American Journal of Physics* 69/1 (2001) 56–62.
10. Geszti Tamás: Párolt macska. *Fizikai Szemle* 47/5 (1997) 157.
11. Geszti Tamás: Kvantum és klasszikus határán. *Fizikai Szemle* 58/6 (2008) 209.