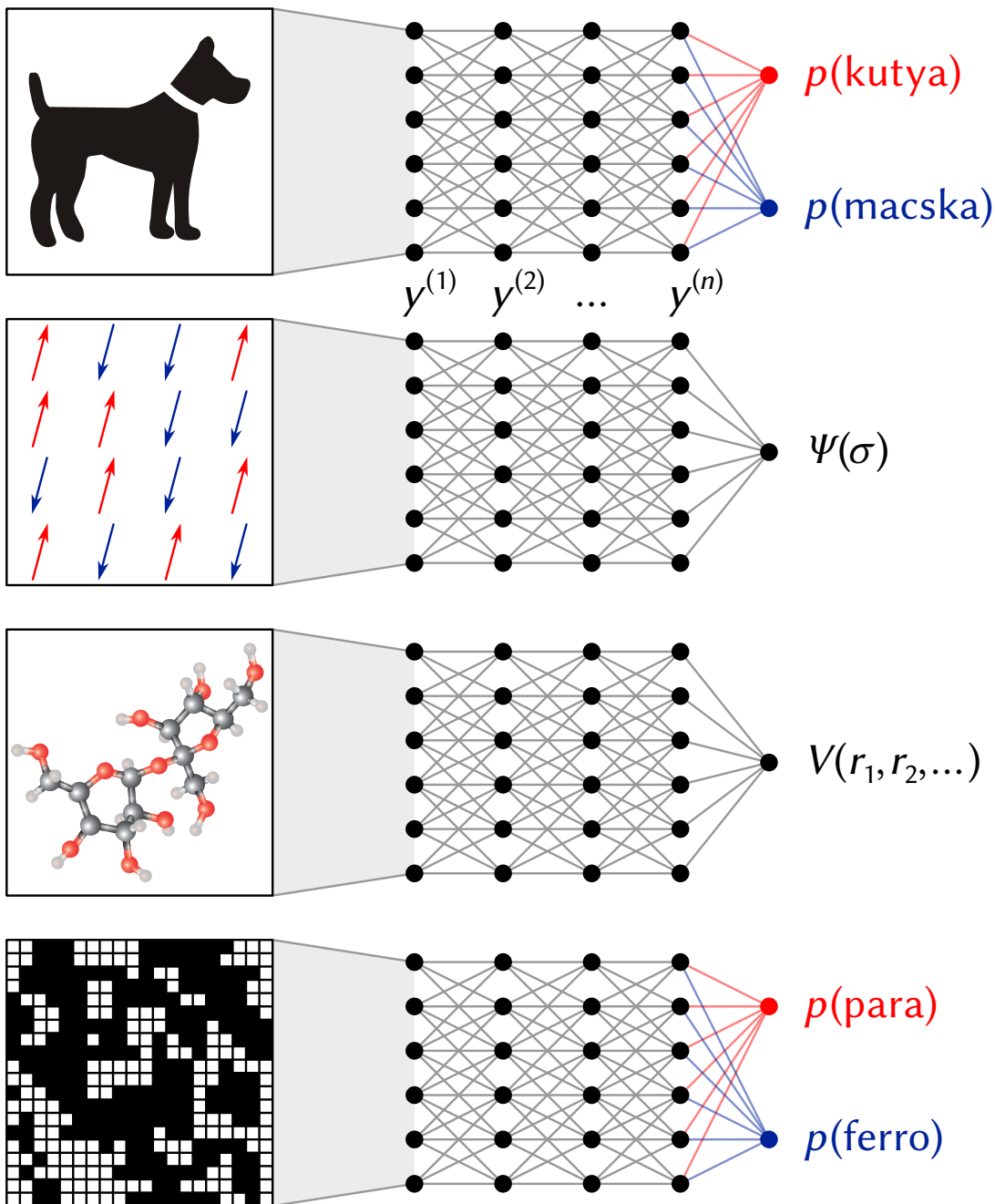


fizikai szemle

100 év kvantumfizika – hova jutottunk...



2025/7–8

nka

Fizikai Szemle

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A Matematikai és Természettudományi Értesítész Akadémia 1882-ben indította
A Matematikai és Fizikai Lapokat Eötvös Loránd 1891-ben alapította

SZERKESZTŐSÉG

Felelős szerkesztő: Iglói Ferenc főszerkesztő

Olasz szerkesztő: Bodrog Zoltán

Technikai szerkesztő: Hock Gábor

SZERKESZTŐBIZOTTSÁG

Asbóth János, Biró László Péter, Csengeri Kamilla, Czitrovsky Aladár, Gyürky György, Horváth Dezső, Horváth Gábor, Járasi-Szabó Ferenc, Kiss Ádám, Kopasz Katalin, Neda Zoltán, Ormos Pál, Pálfalvi László, Pásztor Gabriella, Sándor Bulcsú, Simon Ferenc, Simon Péter, Sódor Ádám, Sükösd Csaba, Szabó Gábor, Takács Gábor, Trócsányi Zoltán, Ujvári Sándor

A beküldött tudományos, ismeretterjesztő és fizikatanítási cikkek a Szerkesztőbizottság, illetve az általa felkért, a témában elismert szakértő jóváhagyó véleménye után jelenhetnek meg.

Kiadja és terjeszti az Eötvös Loránd Fizikai Társulat,
1092 Budapest, Ráday utca 18. földszint III.

Telefon/fax: (1) 201-8682

Felelős kiadó: Újfalussy Balázs főtítkár

A Társulat és a folyóirat honlapja:

<http://fizikaizsemla.elft.hu>,

e-postacíme: elft@elft.hu

A folyóirat szerkesztőségi e-mail címe:

fisz_szerkesztok@elft.hu. A lapba zánt írásokat erre a címre kérjük. Kéziratokat nem őrzünk meg és nem küldünk vissza. A szerzőknek tiszteletpéldányt küldünk.



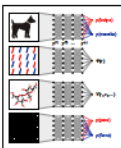
Nyomdai előkészítés: Hock Gábor. *Nyomdai munkálatok:* OOK-PRESS Kft., *felelős vezető:*

Szathmáry Attila ügyvezető igazgató.
Előfizethető a Társulatnál vagy postautalványon a 10200830-32310274-00000000 számú egyszámlán.
Az egyes számok ára: 1800,- Ft (a dupla számoké 3600,- Ft) + postaköltség.

HU ISSN 0015-3257 (nyomtatott)

HU ISSN 1588-0540 (online)

A lapot az MTA Magyar Tudományos Művek Tára (MTMT) archiválja



A címlapon:

Szabó Attila cikke:

Neurális hálózatok lehetséges alkalmazásai

TARTALOM

KVANTUMFIZIKAI SZÁM

Vendégszerkesztő: Asbóth János

<i>Asbóth János:</i> Kvantumfizika 100 – szerkesztői előszó	217
<i>László István:</i> Werner Heisenberg és a mátrixmechanika	219
<i>Szabó Gábor:</i> Kvantumelmélet és kauzalitás	225
<i>Polónyi János:</i> A kvantum és klasszikus tartományok határán	228
<i>Diósi Lajos:</i> Módosul-e a kvantumelmélet a makrovilágban?	232
<i>Németh Dániel:</i> A világegyetem kvantumgeometriája a gravitáció rácselméletével	236
<i>Dávid Gyula, Cserti József:</i> Zitterbewegung – egy kevésbé ismert általános kvantum mozgásforma	243
<i>Schranz Ágoston, Solymos Balázs, Márton Botond László, Udvary Eszter, Kis Zsolt:</i> Kvantum véletlenszám-generátorok	249
<i>Kriváchy Tamás:</i> Fordulat a kvantumhálózatokban: a mérések szerepe átalakul	255
<i>Werner Miklós, Kapás Kornél:</i> Új perspektívák a kvantum rendszerek klasszikus szimulációjában	260
<i>Gyenis András:</i> Az áramkörök kvantálása és a szupravezető kvantumszámítógépek	264
<i>Rakya Péter:</i> Kihívások a variációs kvantumáramkörök optimalizálásában	269
<i>Szabó Attila:</i> Kölcsönható kvantumrendszerek szimulációja gépi tanúlással	272
<i>Pozsgay Balázs:</i> Integrálható modellek a kvantumszámítógépen	277
<i>Rakovszky Tibor:</i> Véletlen kvantum áramkörök	282
<i>Kürtösy Olivér, Csonka Szabolcs, Makk Péter:</i> Szupravezető kvantumáramkörök a BME-n	288

KÖNYVESPOLC

<i>Horváth Dezső:</i> Sean Carroll: „The biggest ideas in the Universe: Space, time, and motion”	292
--	-----

HÍREK, ESEMÉNYEK

<i>A kvantumok világa, előadás-sorozat 2025. szeptemberben</i>	B3
--	----

~~~~~

|                                                                                                   |  |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
| <i>J. Asbóth:</i> Quantum physics 100 – Foreword of the editor                                    |  |
| <i>I. László:</i> Werner Heisenberg and matrix mechanics                                          |  |
| <i>G. Szabó:</i> Quantum theory and causality                                                     |  |
| <i>J. Polónyi:</i> At the interface of the quantum and classical regimes                          |  |
| <i>L. Diósi:</i> Should quantum theory be modified in a macroscopic world?                        |  |
| <i>D. Németh:</i> Quantum geometry of the Universe through a lattice field theory of gravitation  |  |
| <i>Gy. Dávid, J. Cserti:</i> Zitterbewegung, a ubiquitous yet underrecognized quantum motion      |  |
| <i>Á. Schranz, B. Solymos, B. L. Márton, E. Udvary, Zs. Kis:</i> Quantum random number generators |  |
| <i>T. Kriváchy:</i> Quantum networks: Measurements in a new role                                  |  |
| <i>M. Werner, K. Kapás:</i> New perspectives in simulation of quantum systems                     |  |
| <i>A. Gyenis:</i> Quantization of circuits and superconducting quantum computers                  |  |
| <i>P. Rakya:</i> Challenges in optimization variational quantum circuits                          |  |
| <i>A. Szabó:</i> Simulation of interacting quantum systems using machine learning                 |  |
| <i>B. Pozsgay:</i> Integrable models on quantum computers                                         |  |
| <i>T. Rakovszky:</i> Random quantum circuits                                                      |  |
| <i>O. Kürtösy, Sz. Csonka, P. Makk:</i> Superconducting quantum circuits at BME                   |  |

### BOOKREVIEW

|                                                                                               |  |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------|--|
| <i>D. Horváth:</i> Sean Carroll: „The biggest ideas in the Universe: Space, time, and motion” |  |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------|--|

### NEWS, EVENTS

|                                                                |  |
|----------------------------------------------------------------|--|
| <i>The World of Quantum – Lecture series in September 2025</i> |  |
|----------------------------------------------------------------|--|

Fizikai Szemle

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

megjelenését támogatják:



KEFEVERÉSI ÉS  
JÓVAVÁCIÓS  
MINISZTERIUM

nka  
Nemzeti Kulturális Alap

group  
m v m



# KVANTUMFIZIKA 100 – SZERKESZTŐI ELŐSZÓ

Asbóth János<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>BME, Elméleti Fizika Tanszék, <sup>2</sup>HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest

E-mail: asboth.janos@ttk.bme.hu

A 2025-ös évet az ENSZ „A Kvantum Nemzetközi Évének” nyilvánította, megünnepelendő a kvantummechanika születésének 100. évfordulóját, és felhívva a figyelmet a kvantumfizika és kvantumtechnológia érdekességére, hasznosságára. Ebből az ünnepségből a *Fizikai Szemle* is kiveszi a részét: a nyári duplaszámot a kvantumfizikának szenteltük. Nyugaton és itthon kutató fizikus kollégákat kerestünk meg, hogy számoljanak be arról, hogyan használják a kvantumfizikát, illetve hogyan fejlesztik tovább. A kvantumfizika legendásan furcsa, különös fogalmait (szuperpozíció, összefonódás) mennyire értjük ma? Milyen technológiát lehet ezekre építeni?

Mi is történt 1925-ben, miért tesszük ekkorra „a kvantummechanika születését”? A jelen szám első cikke ezen születés előtt tiszteleg. 1925 előtt már többen próbálták kvantumokra, diszkrét adagokra bontani a folytonosnak tűnő természetet, sőt, ezért Nobel-díjat is kapott már Max Planck (1918), Albert Einstein (1921), és Niels Bohr (1922). Azonban ahhoz, hogy ezekből a próbálkozásból koherens elmélet álljon össze – az „új kvantummechanika” – teljesen új fogalmak, új egyenletek kellenek. Ezeket gyors egymásutánban 1925-ben dolgozta ki Werner Heisenberg, Max Born, Pascual Jordan, Erwin Schrödinger – és persze sokan mások. Ahogy egy új elméletnél sokszor előfordul, az eredeti cikkek (magyarul a „Kvantummechanika” c. 1971-es könyvben<sup>1</sup>) sokszor nehezen olvashatóak. A jelen folyóiratszám első cikkében *László István* (BME) segít megérteni a cikkeket és kontextusukat.

Hogyan lehet összeegyeztetni a fura kvantumos fogalmakat a jól megszokott hétköznapi fogalmainkkal? Cikkeink egy csoportja ezzel az ún. kvantum-klasszikus átmenettel foglalkozik. *Szabó Gábor* filozófus azt mutatja meg, hogyan lehet az oksági viszonyt kvantumosan általánosítani, és ez hogyan segít értelmezni a kvantumos összefonódást. *Polónyi János* a renormalizációs csoport fénytörésében vizsgálja, hogyan tud kiemelkedni egy klasszikus makrovilág egy kvantumos mikrovilágból.

<sup>1</sup> Jánossy Lajos (szerk.), Györgyi Géza (ford.): Kvantummechanika. Cikkgyűjtemény. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1971.



Asbóth János a BME Elméleti Fizika Tanszékének docense és a HUN-REN Wigner FK Kvantumoptika és Kvantuminformatika Osztályának tudományos főmunkatársa. A BME-n kvantumos hibajavításos elméleti kutatásaival az „OpenSuperQPlus” EU-s projekthez járul hozzá, amely egy szupravezető 1000 kvantumbites, EU-s kvantumszámítógép építését célozza.

Mi a kapcsolata a világegyetem nagy léptékű szerkezetét leíró relativitáselméletnek és a mikrovilágot jól leíró kvantumfizikának? *Diósi Lajos* azt a lehetőséget vizsgálja meg, hogy a Schrödinger-egyenletet újabb tagokkal kiegészítve közelítsük az elméleteket, amivel el lehet kerülni a hullámfüggvény „beugrását” (redukcióját) is. *Németh Dániel* a másik irányból közelít: abba ad betekintést, hogyan lehet a kvantum Monte Carlo-módszereket használni a téridő kvantumstatisztikai leírására az úgynevezett kauzális dinamikus háromszögeléssel. *Dávid Gyula* és *Cserti József* a relativisztikus kvantummechanika egy 1930-ban Schrödinger által felismert következményéről ír: a részecskék „reszkető mozgásáról”, a Zitterbewegungról és arról, ez hogyan jelenik meg napjaink egyik sztáryanagában, a grafénban.

Hogyan segít a kvantumtechnológia véletlen számok előállításához, és miért fontos ez? *Schranz Ágoston* és szerzőtársai az optikai elven működő kvantum véletlenszám-generátorokat tekintik át, és beszámolnak arról a rendszerről, amelyet a BME-n fejlesztenek. *Kriváchy Tamás* a kvantumos összefonódást használó új elméleti ötletekről számol be, amelyekkel sokszereplős hálózatok tagjai tudnak egymással biztonságos módon véletlen kulcsokat megosztani.

Hogyan alkalmazhatunk gépi tanulást és más matematikai trükköket a kölcsönható részecskék hírhedt, exponenciálisan bonyolult hullámfüggvényeivel való számoláshoz? *Werner Miklós* és *Kapás Kornél* az úgynevezett mátrixszorzat-állapotokkal való közelítést mutatja be, amivel rugalmasan lehet az adott fizikai modellhez legjobban illeszkedő pályákat kiválasztani, és ami betekintést ad a modellben megjelenő összefonódás szerkezetébe. *Szabó Attila* a gépi tanulási módszereket tekinti át, amelyekkel a hullámfüggvény fontos adatait egy számítógépen megvalósított neurális háló tömöríti be – ezt ábrázolja címlapunk is.

Miért akarunk ma kvantumszámítógépet építeni, és hogyan? A „kvantumtechnológia” szóról sokaknak ugrának be ezek a kérdések, amelyekkel nemcsak akadémiai kutatóintézetek, hanem nagy techcégek és startupok is foglalkoznak ma világszerte, és ami dollármilliárdokat mozgat meg a tőzsdéken is. Számunkban öt cikk foglalkozik ezzel a témával.

Hogyan működnek a szupravezető nanoáramkörökkel megvalósított kvantumszámítógépek, hogyan építik ezeket? *Gyenis András* azt ismerteti, hogyan kell a kvantummechanikát ilyen szupravezető nanoáramkörök leírására használni, és hogyan vezet ez a kvantumbitek transzmonos és fluxóniumos megvalósításához. A mikroszkopikus alkotóelemek kvantum leírása az ilyen milliméteres eszközök esertében reménytelen, úgyhogy

más útra van szükség: az áramkör klasszikus egyenleteinek kvantálására. *Kürtössy Olivér és szerzőtársai* azt írják le, hogyan valósítják meg, és milyen mérésekkel vizsgálják ezeket az áramköröket a BME-n, illetve, hogy milyen újfajta, topologikus kvantumbitekkel kísérleteznek ott.

Milyen programokat érdemes futtatni a kvantumszámítógépeken? *Rakya Péter* azt írja le, hogyan lehet gyorsítani az általa fejlesztett szoftverrel (SQUANDER) az egyik ilyen programtípust, az úgynevezett variációs kvantumáramköröket – amelyek kvantumkémiai és egyéb alkalmazásokkal kecsegtetnek. *Pozsgay Balázs* arról számol be, hogy már a mai meglehetősen zajos kvantumszámítógép-prototípusokkal is lehet új felfedezéseket tenni az integrálható kvantummodellek szimu-

lálása révén. *Rakovszky Tibor* azt mutatja meg, milyen új kérdések és új összefüggések tárulnak fel, ha a statisztikus fizika eszközeivel vizsgáljuk a teljesen véletlenszerű kvantumszámítógépes programokat (véletlen kvantumáramköröket).

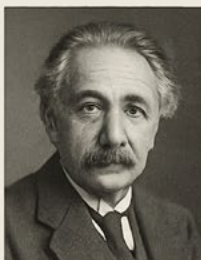
Amint az a fenti összegzésből is látható, a *Fizikai Szemle* még egy ilyen dupla számmal is csak betekintést tud adni néhány új kvantumos kutatási irányba, eredménybe. Az érdeklődőknek figyelmébe ajánljuk még a „Kvantumok világa” ismeretterjesztő előadássorozatot, amely idén szeptemberben az MTA-n lesz – erről is olvashatnak még számunkban. További kvantumos cikkek vannak még előkészület alatt – remélhetőleg még az idei évfordulós évben találkozhatnak majd ezekkel a *Fizikai Szemle* olvasói.

## A KVANTUMMECHANIKA ÚTTÖRŐI

SZÁZÉVES A KVANTUMOK VILÁGA, 2025



Max Planck



Albert Einstein



Niels Bohr



Arnold Sommerfeld



Max Born



Werner Heisenberg



Pascual Jordan



Hans A. Kramers



Erwin Schrödinger



Louis de Broglie



Wolfgang Pauli



Paul A. M. Dirac



IYQ2025

# WERNER HEISENBERG ÉS A MÁTRIXMECHANIKA

László István

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Elméleti Fizika Tanszék, Budapest

E-mail: laszlo@eik.bme.hu

Amikor az egyetemen a kvantummechanikát tanuljuk, először a Schrödinger-egyenlettel és rajta keresztül a hullámmechanikával ismerkedünk meg. A mátrixmechanika vázlatos ismertetésére szinte a bevezető kurzus vége felé kerül sor az operátorok mátrixelemeinek ismertetésével a Hilbert-téren, amikor már megoldottuk az összes alapvető kvantummechanikai problémát. Ekkor adódik a kérdés, hogy Heisenberg hogyan tudta kitalálni a mátrixmechanikát anélkül, hogy ismerte volna az operátorok és a Hilbert-tér szerepét a kvantumos jelenségek leírására. Nem beszélve arról, hogy hogyan kerültek elő neki a mátrixok, amikor nem ismerte azok fogalmát sem. A következőkben ezekre a kérdésekre próbálunk választ adni.

## A „régí kvantummechanika”

A kvantummechanika felfedezéséhez vezető út röviden a következő [1]. Max Planck a feketetest hőmérsékleti sugárzását annak feltételezésével tudta megmagyarázni 1900-ban, hogy az üregbe zárt  $\nu$  frekvenciájú sugárzás energiája csak a  $h\nu$  mennyiség egész számú többszöröse lehet, vagyis nem folytonos, hanem kvantált. Itt  $h$  a Planck-állandó. Így jött ki a kísérleti eredmény, és Planck reménykedett, hogy valamikor megtalálja a helyes magyarázatot. Ezt a gondolatot Albert Einstein 1905-ben alkalmazta a szabadon terjedő elektromágneses hullámokra, és a fényelektromos jelenséget úgy értelmezte, hogy a  $\nu$  frekvenciájú fény  $h\nu$  energiát ad át a fémbe zárt elektronnak. A  $h\nu$  energiacsomag neve lett később a foton. Ezzel Einstein a fényt részecske tulajdonsággal ruházta fel, és ezért kapta Nobel-díját 1921-ben.

Niels Bohr 1922-ben kapott Nobel-díjat 1913-ban közölt munkájáért, amelyben úgy írta le a hidrogénatom elektromágneses sugárzását, hogy posztulálta, ha az elektron impulzusmomentuma a  $\hbar = (h/2\pi)$  mennyiség egész számú többszöröse, akkor az atom, szemben a klasszikus elmélettel, nem sugároz. Ezeket a pályákat nevezte stacionárius pályáknak, és sugárzás kibocsátása vagy elnyelése akkor történik, amikor az elektron átke-

rül egyik stacionárius pályáról a másikra. A kisugárzott vagy elnyelt sugárzás  $\nu$  frekvenciájára pedig igaz, hogy  $h\nu$  megegyezik a két pálya energiájának a különbségével.

Amikor Louis de Broglie 1923-ban a hullám-részecske kettős természetet kiterjesztette az addigi részecskékre is, létrejött a *régí kvantummechanika*.

A régi kvantummechanikához tartoztak a Bohr-modellből kiolvasott, úgynevezett Kramers-szabályok. Ezek azt mondják meg, hogy hogyan kell megváltoztatni a klasszikus fizikai formulákat, hogy a kísérleti eredményeket le tudják írni. A Bohr–Kramers–Slater-elmélet [2] alapján feltételezték továbbá, hogy bár az atomok stacionárius állapotban nem sugároznak, de stacionárius állapotok közötti átmenetek során és „virtuális rezgéseket végezve” sugárzást bocsátanak ki, illetve nyelnek el.

A régi kvantummechanikának sikerült néhány atomi tulajdonságot megmagyarázni, de nem adott számot például a molekulák és a szilárdtestek elektromos vezetési tulajdonságairól, ráadásul tele volt *ad hoc* lépésnek tűnő mesterséges gondolattal, fogalommal.

## Az „új kvantummechanika” születése: Heisenberg

A napjainkban is ismert *új kvantummechanikának* a megszületését Werner Heisenberg (1901–1976) 1925-ben közölt mátrixmechanikájától és Erwin Schrödinger (1887–1961) 1926-ban közölt hullámmechanikájától számítjuk. Megjelenésük után hamarosan bebizonyították, hogy a két kvantummechanika ugyanaz, csak más matematikai formában vannak megfogalmazva.

Werner Heisenberg Würzburgban született, és édesapja 1909-től a müncheni egyetemen bizantinológusként a közép- és újjörög nyelv tanára volt. Így fia már gimnazistakorában görögül olvasta Platont. Heisenberg Sommerfeldnél doktorált 1923-ban. A doktori vizsga nem sikerült valami fényesre [3], mert az 1911-ben Nobel-díjjal jutalmazott Wien a kísérleti részre a lehető leggyengébb, de még nem a bukást jelentő jegyet adta, viszont Sommerfeld az elméleti rész kidolgozása miatt a lehető legjobbat. A disszertáció témája igen nehéz volt: „Folyadékok áramlásának stabilitása és turbulenciája”. Heisenberg apja megkérte James Franckot, az 1925. év Nobel-díjasát, hogy tanítsa meg fiának a kísérleti fizikát. Néhány laboratóriumi látogatás után Franck kijelentette, hogy szerinte az lesz a legjobb, ha patronáltja elméleti fizikus lesz.

Heisenberg attól tartott, hogy gyenge vizsgája miatt Max Born nem fogja őt asszisztensként alkalmazni, mint Pauli utódja. Born látva Wien trükkös kérdéseit,



László István fizikus, címzetes egyetemi tanár a BME Fizikai Intézet Elméleti Fizika Tanszékén, az MTA doktora. Kutatási területe a molekulafizika, fullerének, nanocsövek, kémiai gráfelmélet és szoros kötésű molekuladinamikai számítások.

felfogadta őt, és később így emlékezett róla: „Úgy nézett ki, mint egy parasztfiú, rövid nadrágban, szőke hajjal, fényes tekintettel és elragadó megjelenéssel. Feladatait komolyabban vette, mint Pauli, és nagy segítség volt nekem. Hihetetlen gyorsasága és pontossága lehetővé tette számára, hogy hatalmas munkát tudott elvégezni különösebb erőfeszítés nélkül” [4]. Born első feladatként az anomális Zeeman-effektus problémáját adta Heisenbergnek, amit ő sikeresen megoldott. Kortársai furcsának tartották, hogy  $\frac{1}{2}$  értékű kvantumszámot vezetett be. Itt, Göttingenben habilitált 1924-ben, és több alkalommal dolgozott 1924–26-ban Niels Bohr asszisztenseként a koppenhágai egyetemen.

## Heisenberg első cikke a mátrix-mechanikáról

Heisenbergnek a mátrixmechanikáról szóló első cikke 1925-ben jelent meg, melynek címe *Kinematikai és mechanikai összefüggések kvantumelméleti átvértelmezéséről* [5, 6]. Erről a közleményről a következőt írta Steven Weinberg, aki 1979-ben kapott Nobel-díjat az elektromágnességet és a gyenge kölcsönhatást egyesítő elektromágneses kölcsönhatás elméletének a kidolgozásáért: „Ha az ember misztikusnak találja, amit Heisenberg tett, nincs egyedül. Én már több alkalommal megpróbáltam elolvasni azt a cikket, amit Heisenberg írt visszatérve Helgolandra, és bár úgy gondolom, hogy értem a kvantummechanikát, sohasem értettem meg motivációit, melyek a cikkében található matematikai lépéseket indokolták. Az elméleti fizikusok legsikeresebb munkáikban a következő szerepek egyikét játszik: ők vagy bölcsek vagy mágusok... Általában könnyű megérteni a bölcs fizikusokat, de a mágus fizikusok cikkei gyakran érthetetlenek. Ilyen értelemben Heisenberg 1925-ös cikke tiszta mágia” [7]. Jammer megállapítja [8], hogy az átmenet a régi kvantummechanikából az újba rendkívül gyors volt, és nem egyetlen gondolatfolyamat volt, nem is „felfelé haladó lépcső”, hanem „összefüggő síkatorok szövevénye”.

MacKinnon feltételezte [9], hogy Heisenberg 1925 júniusában és júliusában, amikor híres cikkéhez készítette a számításokat, valójában a virtuálisoszillátor-modellt próbálta alkalmazni a hidrogénatomra. Feltételezését Heisenberg Kronighoz 1925. június 5-én írt levelével indokolja. Ebben a levélben van egy ábra [9, 10], amely szerint a  $K$  Coulomb-erőt számolta ki egy  $P$  pontban, melytől  $a$  távolságra merőlegesen rezgett egy dipólusoszillátor. Heisenberg itt megmutatta, hogy az oszcillátor  $x(t)$  kitérésének Fourier-együtthatóival ki lehet fejezni a  $K$  erő Fourier-sorát az oszcillátor kitérésének függvényében. Ez egy tipikus gondolat a virtuális rezgéseket tartalmazó Bohr–Kramers–Slater-elmélet szellemében. MacKinnon szerint Heisenbergnek nem sikerült a hidrogénatom spektrumát megmagyarázni. Ekkor egyszerűsítette a feladatot, és csak a rezgésekkel foglalkozott. Miután elvégezte a számításokat, akkor vette észre, hogy

egy általános módszert talált az új kvantummechanikára. Valószínű, ez a feltételezés nem lehet távol a valóságtól, mert MacKinnon cikke végén köszönetet mondott Heisenbergnek, hogy elolvasta annak egyik változatát. Ha nem értett volna egyet az abban foglaltakkal, bizonyára tiltakozott volna. Maga Heisenberg is írja Pauli tiszteletére írt emlékcikkében [11], hogy „Először 1925 tavaszán próbáltam meg a hidrogén spektrumának intenzitási képletéhez eljutni a Kepler-pálya Fourier-sorának tanulmányozásával, hogy könnyebben kitalálhassam a helyes kvantumelméleti intenzitásképleteket. A Kepler-probléma túl nehéznek bizonyult ehhez, de felmerült az ötlet, hogy az *átmeneti elemek összessége* éppúgy reprezentálja az elektron koordinátáit, mint a klasszikus fizikában a Fourier-sor”.

Heisenberg cikkének elején kijelenti, hogy „a formális szabályokkal szemben, melyeket általában a kvantumelméletben megfigyelhető mennyiségek (pl. a hidrogénatom energiája) kiszámítására használnak, az a súlyos kifogás emelhető, hogy e számítási szabályok lényeges alkotóelemként olyan mennyiségek között fennálló összefüggéseket tartalmaznak, amelyek – úgy látszik – elvileg megfigyelhetetlenek (mint pl. az elektron helye, keringési ideje)” [5, 6].

A megfigyelhető mennyiségek közti alapösszefüggésként Heisenberg a Bohr-féle frekvenciafeltételre épít. Ennek értelmében amikor az elektron egy  $n$ -edik stationárius pályáról (energiája  $W(n)$ ) egy  $(n - \alpha)$ -edik stationárius pályára (energiája  $W(n - \alpha)$ ) megy át (ahol  $n$  és  $n - \alpha$  egész szám), akkor sugárzást bocsát ki, aminek  $\nu(n, n - \alpha)$  frekvenciáját, azaz  $\omega(n, n - \alpha)$  körfrekvenciáját így adjuk meg:

$$\frac{\omega(n, n - \alpha)}{2\pi} = \nu(n, n - \alpha) = \frac{1}{h} [W(n) - W(n - \alpha)]. \quad (1)$$

Itt és a továbbiakban is Heisenberg jelöléseit alkalmazzuk, kivéve a gót betűket, melyeket a megfelelő latin betűkkel helyettesítünk.

A Bohr-féle frekvenciafeltétel akkora szakítást jelent a klasszikus mechanikával, hogy a klasszikus mechanika érvényessége megszűnik a legegyszerűbb kvantumelméleti problémák (atomi tulajdonságok) tárgyalása esetén is. A klasszikus mechanikával való kapcsolatra mégis szükség van, e tekintetben Heisenberg Born cikkére [12] hivatkozik, ahol a szerző csak úgy tudja a korrespondenciaelvel megkapni a helyes kvantummechanikai kifejezéseket, ha a nagy kvantumszámok esetén szükséges deriválásokat kis kvantumszám estén differenciáhányaddal helyettesíti [8, 12]. Vagyis

$$\frac{\partial \Phi(n)}{\partial n} \leftrightarrow \frac{\Phi(n + \alpha) - \Phi(n)}{\alpha}, \quad (2)$$

ahol  $\Phi$  valamely kvantumszámtól függő mennyiség.

Heisenberg az atom sugárzásának leírását célozta az új kvantumelméleti mechanika megalkotásával, a Kramers-féle diszperziós elméletre alapozva. Kramers [13] a Bohr–Kramers–Slater-elmélet [2] alapján az atomok

polarizációjára kapott egy kifejezést, miközben az atomról feltételezte, hogy különböző frekvenciájú oszcillátorokból épül fel. A klasszikus fizika törvényei alapján kiszámolta a polarizációt, majd az oszcillátorok frekvenciáit az (1) Bohr-féle frekvenciafeltétellel helyettesítette, ügyelve a korrespondenciaelvre, azaz arra, hogy nagy kvantumszámok esetén megkapja a klasszikus formulát.

Heisenberg a továbbiakban megadja, hogy a klasszikus fizikában hogyan néz ki a mozgó elektron sugárzása a hullámmozgásban. Vagyis

$$\mathbf{E} = \frac{e}{r^3 c^2} \mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{v}}) \quad (3)$$

és

$$\mathbf{H} = \frac{e}{r^2 c^2} \dot{\mathbf{v}} \times \mathbf{r} \quad (4)$$

az elektromos és a mágneses térerősség első rendben. Ezekhez a következő közelítésben további tagok járulnak, például

$$\frac{e}{rc^3} \dot{v}v, \quad (5)$$

illetve magasabb rendben

$$\frac{e}{rc^4} \dot{v}v^2 \quad (6)$$

alakú tagok. Az elektron töltése  $e$ ,  $v$  a sebessége és  $r$  a távolsága a kiszemelt ponttól, ahol a sugárzást megadjuk.

Ezután következik néhány mondat, amelyek problémát okozhatnak első olvasásra. „A klasszikus elméletben az (5)–(6) magasabb rendű közelítések egyszerűen kiszámíthatók, ha az elektron mozgása, illetve annak Fourier-előállításra adott, így tehát valami hasonlót várunk a kvantumelméletben is. [...] A kérdés a legegyszerűbb alakban így fogalmazható meg: Legyen adott az  $x(t)$  klasszikus mennyiség helyére lépő kvantummechanikai mennyiség! Mely kvantummechanikai mennyiség foglalja el ekkor  $x(t)^2$  helyét?” Itt Heisenberg sejteti gondolatmenetének indokait, miközben néhány mondattal korábban azt tanácsolta, hogy fel kell adni reményünket az eddig meg nem figyelt mennyiségek – mint az elektron helye – megfigyelésére, és csak megfigyelhető mennyiségek között fennálló összefüggésekkel foglalkozunk. Most mégis az  $x(t)$  és  $x(t)^2$  klasszikus mennyiség helyére lépő kvantummechanikai mennyiségeket keresi?

Heisenbergnek, miközben Kramers-szel elkészítette közös cikküket [14], támadhatott az a gondolata, hogy ha a klasszikus  $E$  elektromos tér Fourier-sora

$$E(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} E_{\alpha}(n) e^{i\omega(n)\alpha t}, \quad (7)$$

akkor ennek kvantummechanikai alakja a Kramers-elmélet [11] szerint

$$E(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} E(n, n-\alpha) e^{i\omega(n, n-\alpha)t}. \quad (8)$$

Az  $|E(n, n-\alpha)|^2$  pozitív  $\alpha$  esetén a sugárzás kibocsátásának, negatív  $\alpha$  esetén pedig sugárzás elnyelésének az intenzitása. Heisenberg nem írja fel a (8) egyenletet, mert szerinte ennek nincs értelme, de végig úgy számolt,

mintha felírta volna minden  $n$ -re. Helyette azt mondja, hogy az

$$E(n, n-\alpha) e^{i\omega(n, n-\alpha)t} \quad (9)$$

mennyiségek sokasága fejezze ki az elektromos tér kvantummechanikai alakját. Most persze egy kicsit előreszaladtunk. Kollégáimhoz írt levelei alapján valószínű, hogy Heisenberg ekkor még nem látta ilyen világosan a kvantummechanika előállításának szabályát, de cikkét könnyebben megértjük, ha a fentieket előrebocsátjuk.

Tehát Heisenberg, amikor azt mondja, hogy az új kvantummechanikában nem foglalkozunk olyan mennyiségekkel, melyeket nem figyelhetünk meg, ezen azt érti, hogy ezeket valami kvantummechanikai mennyiségekkel kell helyettesíteni, és amivel felhagyunk, ezek klasszikus értelmezése. Ezt abból látjuk, ahogyan felépíti kvantummechanikáját. Először veszi az adott mennyiség klasszikus alakját, azt Fourier-sorba fejti, majd a Kramers-szabályok és az (1) Bohr-féle frekvenciafeltétel alapján elkészíti a megfelelő kvantummechanikai mennyiséget.

Ha tehát csak egydimenziós rendszerekkel foglalkozunk, akkor

$$x(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) e^{i\omega(n)\alpha t} \quad (10)$$

fejezi ki a mozgást klasszikus értelemben. A (10) Fourier-sorhoz a kvantummechanikában rendeljük hozzá az

$$a(n, n-\alpha) e^{i\omega(n, n-\alpha)t} \quad (11)$$

mennyiségek sokaságát. Heisenberg itt megjegyzi, hogy a (8) egyenletnek megfelelő alak azért nem értelmes, mert az  $n$  és az  $n-\alpha$  mennyiségek egyenrangúak (11)-ben. Vagyis a (10)-ben  $n$  rögzített, és  $n-\alpha$  változik, szemben a (11)-gyel, ahol mindkét index változik. Ennek ellenére a (11) matematikai tulajdonságait a (10) matematikai tulajdonságaiból olvassa le, és amikor  $x(t)$ -ről beszél, akkor gondolatban felírja (10)-et minden  $n$ -re. Ez is arra utal, hogy Heisenberg eredetileg a Bohr–Kramers–Slater-elmélet alapján az  $n$ -edik nívó körüli virtuális rezgéseket írta fel. Így, ha az  $x(t)^2$  Fourier-sorára igaz, hogy

$$x(n, t)^2 = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \sum_{\gamma=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) e^{i\omega(n)\alpha t} a_{\gamma}(n) e^{i\omega(n)\gamma t}, \quad (12)$$

és ha  $\beta = \alpha + \gamma$ , akkor

$$x(n, t)^2 = \sum_{\beta=-\infty}^{\infty} b_{\beta}(n) e^{i\omega(n)\beta t}, \quad (13)$$

és így

$$b_{\beta}(n, t) e^{i\omega(n)\beta t} = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) a_{\beta-\alpha}(n) e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t}. \quad (14)$$

A (12)–(14) egyenletekből Heisenberg „mágus” azt olvasta ki, hogy az  $x(t)^2$  kvantummechanikai mennyiségét a következő módon kaphatjuk meg  $x(t)$  kvantummechanikai mennyiségéből:

$$\begin{aligned} b(n, n-\beta) e^{i\omega(n, n-\beta)t} \\ = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a(n, n-\alpha) a(n-\alpha, n-\beta) e^{i\omega(n, n-\beta)t}. \end{aligned} \quad (15)$$

Itt Heisenberg feltételezte, hogy igaz az

$$\omega(n, n - \beta) = \omega(n, n - \alpha) + \omega(n - \alpha, n - \beta) \quad (16)$$

Bohr-féle frekvenciafeltétel. Ezzel elérte, hogy a kvantummechanikai mennyiségekre ugyanazok az algebrai összefüggések érvényesek, mint a klasszikus mennyiségekre. Rájött arra is, hogy a (15) egyenlettel definiált szorzás nem kommutatív.

A (11) és (15) kvantummechanikai mennyiségek definiálása után látszik, hogy  $x(t)$  (11) kvantummechanikai mennyiségének ismeretében annak idő szerinti deriválásiával megkapjuk a  $v = \dot{x}(t)$  klasszikus sebesség

$$i\omega(n, n - \alpha)a(n, n - \alpha)e^{i\omega(n, n - \alpha)t} \quad (17)$$

kvantumos alakját, és az (5)–(6) mennyiségek kvantumos alakjának hozzáadásával az elektromos tér kvantumos alakja megmarad a (9) egyenlettel felírt alakban.

## Dinamika

Heisenberg az

$$\ddot{x} + f(x) = 0 \quad (18)$$

mozgásegyenlet kvantummechanikai megoldásával foglalkozik, és feltételezi, hogy a mozgás periodikus. Bohr után feltételezi továbbá, hogy a mozgásra igaz a

$$\oint p dq = \oint m \dot{x} dx = J = nh \quad (19)$$

kvantumfeltétel. Az egyedüli változtatás Bohr eredeti gondolatmenetéhez képest, hogy az  $x(t)$  és a  $v = \dot{x}(t)$  klasszikus mennyiségek helyett a (11) és (17) kvantummechanikai mennyiségeket alkalmazza a Kramers-szabályok figyelembevételével.

Foglalkozunk először a kvantumfeltétellel! Feltételezve a periodikus mozgást, klasszikusan írhatjuk:

$$x(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) e^{i\omega(n)\alpha t}. \quad (20)$$

Ezt az alakot behelyettesítve (19)-be adódik, hogy

$$\oint m \dot{x} dx = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} |a_{\alpha}(n)|^2 \alpha^2 \omega(n) = nh. \quad (21)$$

Heisenberg szerint (21) jobb oldala az  $n$ -től való függés miatt nem felel meg a korrespondenciaelvnek, ezért ennek  $n$  szerinti deriváltját veszi, vagyis

$$2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \alpha \frac{d}{dn} (|a_{\alpha}(n)|^2 \alpha \omega(n)) = h. \quad (22)$$

Áttérve a kinematikai részben definiált kvantummechanikai változókra (22)-ből kapjuk, hogy

$$2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \alpha \frac{d}{dn} (|a_{\alpha}(n, n - \alpha)|^2 \omega(n, n - \alpha)) = h. \quad (23)$$

A bal oldal deriváltját (2) szerint átalakítva kapjuk a Bohr-féle kvantumfeltétel alakjára, hogy

$$4\pi m \sum_{\alpha=0}^{\infty} \left[ |a(n + \alpha, n)|^2 \omega(n + \alpha, n) - |a(n, n - \alpha)|^2 \omega(n, n - \alpha) \right] = h. \quad (24)$$

Ezután Heisenberg legegyszerűbb példaként az anharmonikus oszcillátor kvantummechanikai problémájával foglalkozik. Itt a klasszikus (18) egyenlet alakja

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^3 = 0. \quad (25)$$

Ennek elkészíti a kvantummechanikai alakját a (11) kvantummechanikai alaknak és idő szerinti második deriváltjának behelyettesítésével. A kapott egyenlet és a (24) Bohr-féle kvantumfeltétel segítségével  $\lambda$  szerint perturbációs számítást alkalmazva kapja az  $a(n, n - \tau)$  átmeneti együtthatókat.

Az irodalomban többen próbálták rekonstruálni Heisenberg gondolatmenetét, például Tomonaga [15], Mehra és Rechenberg [16], valamint Aitchison, MacManus és Snyder [17]. Ezen utóbbi szerzők véleménye szerint azért nehéz Heisenberg eredeti cikkét megérteni, mert nem ismerjük azokat a számításokat, melyeket elvégzett, ezért közlik a szerintük fontos számításokat. Az átmeneti együtthatók ismeretében Heisenberg kiszámítja az

$$\frac{m\dot{x}^2}{2} + m\omega_0^2 \frac{x^2}{2} + \frac{m\lambda}{4} x^4 = w \quad (26)$$

teljes energiát a (11) kvantummechanikai mennyiségek felhasználásával, és azt kapja, hogy a  $\lambda^2$  nagyságrendű tagokig az energia diagonális elemeinek értéke

$$w = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right) h \omega_0}{2\pi} + \lambda \frac{3 \left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) h^2}{64\pi^2 \omega_0^2 m} - \lambda^2 \frac{h^3}{512\pi^3 \omega_0^5 m^2} \left(17n^3 + \frac{51}{2}n^2 + \frac{59}{2}n + \frac{21}{2}\right), \quad (27)$$

majd megjegyzi, hogy néhány nem diagonális energiaelemre nulla értéket kapott, de nem tudja bebizonyítani, hogy minden nem diagonális elem nulla. A  $\lambda = 0$  értékre megkapjuk a harmonikus oszcillátor kvantummechanikai energiáját a nullponti energiával együtt.

Fontos megjegyezni, hogy akkor még nem lehetett tudni, hogy mi a kvantummechanikai helyes energia. Heisenberg onnan gondolta, hogy jó nyomon jár, hogy a kapott (27) kifejezés megegyezett a Kramers–Born-féle módszerrel kapott értékkel [12].

## Heisenberg első cikkének közvetlen hatása

### Born és Jordan cikke

Amint a kézirat elkészült, 1925. július 11-én vagy 12-én, Heisenberg odaadta azt Bornnak, hogy mondjon róla véleményt, alkalmas-e publikálásra [4]. Közben megjegyezte, hogy keményen dolgozott rajta, de néhány alapvető megfontolásnál tovább nem jutott. Born megígérte, hogy megnézi, mit tud tenni, de mivel fáradt volt, csak néhány nap múlva kezdett vele foglalkozni. Későbbi visszaemlékezésében így foglalja össze Heisenberg kéziratának tartalmát:

„Amikor néhány nap múlva elkezdtem olvasni, elbűvölőnek tartottam. Heisenberg bevezette az átmeneti amplitúdó fogalmát, és kifejlesztett egy rájuk vonatkozó számítási módszert analógiában a klasszikus rezgő rendszerekkel és azok harmonikus komponenseivel (Fourier-sorok). [...] Ezután javasolta, hogy felejtünk el mindent a sorokról, és csak az átmeneti amplitúdókat tekintsük, és a rájuk talált szorzási szabályt. [...] A legmerészebb lépése az volt, hogy átmeneti amplitúdót rendelt a  $q$  koordináthoz és a  $p$  impulzushoz is. Mély benyomást keltettek bennem Heisenberg megfontolásai, melyek nagy lépést jelentettek abban a tudományos programban, amin dolgoztunk.” [3]

Abban az időben írta Einsteinnek: „Heisenberg hamarosan megjelenő munkája nagyon misztikusnak tűnik, de biztos, helyes és mély...” [3].

Miután Born elküldte Heisenberg kéziratát publikálásra, elkezdett annak tartalmán gondolkodni. Az egyik reggel rájött, hogy itt valójában a mátrix fogalma lett bevezetve a kvantummechanikai mennyiségek leírására. Először Pauli kérte meg, hogy dolgozzanak együtt a felmerült problémák megoldásán. Pauli érdekesnek és fontosnak tartotta Heisenberg eredményeit, de nem annyira, hogy együttműködjön Bornnal a kérdés szerinte felesleges elmatematizálásában [3]. Érdekes, hogy akkor még mennyire szokatlan volt a mátrixok alkalmazása a fizikában. Végül Born Jordannal együttműködve dolgozott a cikkeken, átírták, kiegészítették és pontosították Heisenberg eredményeit [18].

A (11) jelölést

$$a(n, m) e^{i\omega(n, m)t} \quad (28)$$

alakban írták. Így a helykoordinátát és az impulzust a kvantummechanikában leíró  $q$  és  $p$  mátrixok mátrixelemei a következők

$$q_{nm} = q(n, m) e^{i\omega(n, m)t} \quad (29)$$

és

$$p_{nm} = p(n, m) e^{i\omega(n, m)t} \quad (30)$$

Megmutatták továbbá, hogy a (24) Bohr-féle kvantumfeltétel ekvivalens a

$$pq - qp = (\hbar/2\pi) \mathbf{I} \quad (31)$$

felcserélési relációval, ahol  $\mathbf{I}$  az egységmátrix. Ez egyúttal azt is mutatja, hogy a Bohr-modellben alkalmazott kvantumfeltétel milyen mély feltételezés volt.

## Dirac cikke

Kapica, egy szovjet fizikus, amikor Rutherford laboratóriumában tartózkodott Cambridge-ben, szervezett egy szemináriumsorozatot, ahol kötetlenül mindenki hozzászólhatott és kérdezhetett. Ez volt a Kapica-klub [19]. Itt tartott Heisenberg előadást 1925 júliusában. Előadásának címe „Termozoológia és Zeemanbotanika” volt. Bár ennek témája a Zeeman-effektus, röviden beszélt legújabb, kvantummechanikai eredményeiről is. Dirac

nem vett részt az előadáson, de eljutott hozzá Heisenberg cikkének egy kéziratához. Először nem tűnt neki érdekesnek, azonban kb. két hét múlva rájött, hogy a kvantummechanika szempontjából fontos dolgokat tartalmaz [3]. Miután megértette Heisenberg gondolatmenetét, ő is bevezette a mátrixjelöléseket – anélkül, hogy megemlítené volna ezt a fogalmat. A kvantummechanikai mennyiségek szorzását Heisenberg-szorzásnak nevezte, és sok dologra rájött, amit Born és Jordan is felfedezett [18]. Új eredménye [20], hogy a Born-féle kvantumfeltétel általános alakja

$$\mathbf{AB} - \mathbf{BA} = \frac{i\hbar}{2\pi} \{A, B\} = \frac{i\hbar}{2\pi} \left( \sum_r \left( \frac{\partial A}{\partial q_r} \frac{\partial B}{\partial p_r} - \frac{\partial B}{\partial q_r} \frac{\partial A}{\partial p_r} \right) \right), \quad (32)$$

ahol  $\mathbf{A}$  és  $\mathbf{B}$  az  $A$  és  $B$  klasszikus fizikai mennyiségek kvantumos alakja és  $\{A, B\}$  a Poisson-féle zárójeles kifejezés. Tehát

$$\begin{aligned} q_r q_s - q_s q_r &= 0, \\ p_r p_s - p_s p_r &= 0, \\ q_r p_s - p_s q_r &= \delta_{rs} \frac{i\hbar}{2\pi} \mathbf{I}. \end{aligned} \quad (33)$$

Ezeket most Heisenberg-féle felcserélési relációknak hívjuk.

## A hárommembers cikk

Born, Heisenberg és Jordan általánosította Heisenberg  $f = 1$  szabadsági fokra vonatkozó alapfeltevéseit tetszőlegesen sok,  $f > 1$  szabadsági fokú rendszerekre [21]. Kidolgozták a perturbációelméletet kvantummechanikai rendszerekre. Ők is belátták a (33) összefüggéseket. Kanonikus transzformációkat vezettek be, melyekre továbbra is fennállnak a (33) összefüggések. Megmutatták, hogy ha ez a transzformáció diagonális alakra hozza az energia kvantummechanikai alakját, akkor a diagonális mátrixelemek megegyeznek a kvantummechanikai rendszer energianívóival. Ezzel bevezették a sajátérték meghatározásának feladatát a kvantummechanikában. Felírták az impulzusmomentum mátrixát, és megoldották annak sajátérték-problémáit. Erre a cikkekre később mások úgy hivatkoztak, mint a hárommembers munka (Dreimännerarbeit).

## Pauli cikke

A hárommembers cikknek és az összes többi, az új kvantummechanikát tárgyaló eddigi közleménynek volt egy zavaró hiányossága. Az új kvantummechanika módszereivel eddig még nem sikerült kiszámítani a hidrogénatom energiaszintjeit. Heisenberg első, a mátrixmechanikáról szóló publikációjában már megemlíti az ezzel kapcsolatos problémát [5]. Az okozta a nehézséget, hogy a hidrogénatomnál a kinetikus energia periodikus mozgásnak felel meg, de a  $k/r$  alakú potenciális energia nem periodikus. Így a kinetikus energiát Fourier-sorba fejthetjük, de a potenciális energia felírásához Fourier-in-

tegrálra lenne szükség. A kinetikus energia felírásához tehát diszkrét, a potenciális energiához pedig folytonos indexű mátrixokra lenne szükség. Ezt a problémát először Paulinak sikerült megoldania [22]. Azt használta ki, hogy a  $k/r$  potenciál esetén az

$$\mathbf{A} = \mathbf{p} \times \mathbf{L} - mk(\mathbf{r}/r) \quad (34)$$

Lenz-vektor is mozgásállandó. Itt  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{L}$  és  $\mathbf{r}$  a klasszikus impulzus-, impulzuszórántum- és helykoordináta-vektor. Heisenberg a következő szavakkal reagált az új eredményre: „Valószínűleg nem kell neked leírnom, hogy mennyire örülök a hidrogénatom új elméletének.” [3] A fizikusok többségét Pauli cikke győzte meg, hogy igaz a kvantummechanika új elmélete.

## Schrödinger hullámmechanikája és a mátrixmechanika kapcsolata

Miközben folyt Heisenberg gondolatainak értelmezése és továbbfejlesztése, megjelent Schrödinger cikke, melyben egy teljesen más leírást adott a kvantummechanikai jelenségek tárgyalására [23]. Ez volt a hullámmechanika, és azon belül a Schrödinger-egyenlet megjelenése. A munka a következő gondolattal kezdődött: „Ebben a közleményben mindenekelőtt azt kívánom kimutatni a hidrogénatom legegyszerűbb (nem relativisztikus és perturbátlan) esetére, hogy a szokásos kvantumfeltétel helyettesíthető egy olyan követelménnyel, amelyben nincs szó *egész számokról*. Így sokkal természetesebb módon, a rezgő húr csomópontjainak számához hasonlóan adódik az egészszámúság.” Tehát, szemben a mátrixmechanikával, itt már az első közleményben megjelenik a hidrogénatom problémájának a megoldása. Schrödinger hamarosan közli következő cikkét, sokatmondó címmel: *A Heisenberg–Born–Jordan-féle kvantummechanika kapcsolata az enyémmel* [24]. Az egyik lábjegyzetben megjegyzi, hogy elméletének kidolgozására az ösztönzést de Broglie disszertációja [25] és Einstein végtelenül messzire tekintő megjegyzései adták, majd kitér arra, hogy miért nem hivatkozott korábban Heisenberg cikkére: „Nem tudok arról, hogy elméletem Heisenbergével bármiféle genetikus kapcsolatban állna. Elméletéről természetesen tudomásom volt, az azonban a transzcendes algebra igen nehézkesnek látszó módszerei és a szemléletesség hiánya folytán elriasztó, hogy azt ne mondjam: visszataszító hatást tett rám.” [24] Végül sikerült legyőznie ellenállását, és operátorok bevezetésével megmutatta, hogy a két elmélet matematikailag ekvivalens. Megmutatta, hogy a  $\mathbf{q}_i$  hely- és  $\mathbf{p}_i$  impulzusoperátoroknak ki kell elégíteniük a (33) felcserélési relációkat, és a többi operátor, köztük az energia operátora is – ami bizonyos feltételek esetén a  $\mathbf{H}$  Hamilton-operátor – előállítható ezen operátoroknak a klasszikus fizikában megismert függvényei segítségével. A Heisenberg által bevezetett kvantummechanikai mennyiségek a megfelelő fizikai mennyiségekhez rendelt operátoroknak egy

teljes ortogonális függvényrendszeren vett mátrixai. Amikor korábban az adott klasszikus mennyiséghez rendelt kvantummechanikai mennyiségekről beszéltünk, beszélhettünk volna operátorokról is, de ezt Heisenberg még nem tudhatta.

Hátra van még, hogy belássuk, a Heisenberg által bevezetett mátrixok éppen a megfelelő kvantummechanikai operátorok mátrixai. A következőkben a napjainkban szokásos jelölést használjuk.

Az időtől függő Schrödinger-egyenlet teljes rendszerre a

$$\Psi_i = \Phi_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \quad (35)$$

alakban írható, ahol  $\Phi_i$ , illetve  $E_i$  a  $\mathbf{H}\Phi = E\Phi$  sajátérték-probléma (időtől független Schrödinger-egyenlet) sajátfüggvénye és sajátértéke. Ha most  $\mathbf{O}$  egy tetszőleges operátor, akkor a fenti bázison vett mátrixelemei

$$\begin{aligned} \langle \Phi_n e^{-(i/\hbar)E_n t} | \mathbf{O} | \Phi_m e^{-(i/\hbar)E_m t} \rangle \\ = O(n, m) e^{(i/\hbar)(E_n - E_m)t} \\ = O(n, m) e^{i\omega(n, m)t}. \end{aligned} \quad (36)$$

A (11), (28)–(30) egyenletekből látjuk, hogy Heisenberg a Fourier-sorokból a Kramers-szabályok alkalmazásával a fizikai mennyiségek mátrixait – anélkül, hogy tudta volna – éppen az energia-sajátfüggvények bázisán írta fel, és az  $O(m, n)$  átmeneti mátrixelemeket a mozgásegyenletek és a felcserélési relációk segítségével kapta meg.

## Következmények

Heisenberg „a kvantummechanika megalkotásáért” Nobel-díjat kapott 1932-ben. Állítólag meglepődött, hogy egyedül kapta, nem pedig Bornnal és Jordannal megosztva. Born másik tanársegédje, Pauli is Nobel-díjat kapott 1945-ben, „az úgynevezett Pauli-féle kizárási elv felfedezéséért”. Vajon mit érezhetett Born professzor, amikor azt tapasztalta, hogy tanársegédjei sorra kapják a Nobel-díjakat? Végül ő is kapott egyet 1954-ben, „a hullámfüggvény statisztikus értelmezéséért”. Schrödinger Heisenberget követve és Dirackal megosztva kapta meg a Nobel-díjat 1933-ban, „az atomelmélet új, termékeny formájának felfedezéséért”. Az 1969-es Oppenheimer-díj átvételekor Dirac visszagondolva fiatal éveire így fogalmazott: „Az ezerkilencszázhuszonötten kezdődő néhány évet a fizika aranykorának lehet nevezni. Ebben az időben alapvető elgondolásaink igen gyorsan fejlődtek, és mindenki számára volt bőven tennivaló. Ma már világosan látjuk az ezen aranykor folyamán kimunkált gondolatok korlátait is. Mindannyian azt reméljük, hogy beköszönt majd egy új aranykor, amelyet valami igen nagy hatású gondolat fog elindítani, s mely majd újból a felgyorsult fejlődés korszaka lesz, nagy reményekkel és félelmekkel.” [26]

1. Simonyi Károly: A fizika kultúrtörténete. Akadémiai Kiadó, Ötödik, javított, bővített kiadás, 2011.
2. N. Bohr, H. A. Kramers, J. C. Slater: Über die Quantentheorie der Strahlung. *Zeitschrift für Physik*, 24 (1924) 69.
3. B. L. van der Waerden (ed.): Sources of Quantum Mechanics. Amsterdam, North-Holland, 1967.
4. D. Ch. Cassidy: Uncertainty: The life science of Werner Heisenberg. W. H. Freeman and Company, 1992.
5. W. Heisenberg: Über quantentheoretischer Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zeitschrift für Physik*, 33 (1925) 879. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 13 (1965) 447.
6. Jánossy Lajos (szerk.), Györgyi Géza (ford.): Kvantummechanika. Cikkgyűjtemény. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1971.
7. S. Weinberg: Dreams of a final theory. New York, Pantheon, 1992.
8. M. Jammer: The conceptual development of quantum mechanics. New York, McGraw-Hill, 1966.
9. E. MacKinnon: Heisenberg, models and the rise of matrix mechanics. *Hist. Stud. Phys. Sci.*, 8 (1977) 137.
10. A. Blum, M. Jähner, Ch. Lehner, J. Renn: Translation as heuristics: Heisenberg's turn to matrix mechanics. *Studies in Hist. and Phyl. of Mod. Phys.*, 60 (2017) 3.
11. W. Heisenberg: Erinnerungen an die Zeit der Entwicklung der Quantenmechanik. In: Theoretical physics in the twentieth century. A memorial volume to Wolfgang Pauli (ed. by M. Fierz, V. F. Weisskopf), Interscience Publishers Inc. New York, 1960.
12. M. Born: Über Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 26 (1924) 379.
13. H. A. Kramers: The law of dispersion and Bohr's theory of spectra. *Nature*, 113 (1924) 673.
14. H. A. Kramers, W. Heisenberg: Über die Streuung von Strahlung durch Atome. *Zeitschrift für Physik*, 31 (1925) 681.
15. S.-I. Tomonaga: Quantum Mechanics. Volume 1, Old Quantum Theory, Amsterdam, North-Holland, 1962.
16. J. Mehra, H. Rechenberg: The Historical Development of Quantum Theory. Vol. 2. New York, Springer-Verlag, 1982.
17. I. J. R. Aitchison, D. A. MacManus, T. M. Snyder: Understanding Heisenberg's 'magical' paper of July 1925: A new look at the calculation details. *American Journal of Physics*, 72 (2004) 1370.
18. M. Born, P. Jordan: Zur Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 34 (1925) 858. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 13 (1965) 530.
19. R. Rhodes: Az atombomba története. Park Könyvkiadó, 2013.
20. P. A. M. Dirac: The fundamental equations of quantum mechanics. *Proc. R. Soc. London A*, 109 (1925) 642. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 14 (1966) 171.
21. M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan: Zur Quantenmechanik II. *Zeitschrift für Physik*, 35 (1926) 557. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 14 (1966) 35.
22. W. Pauli: Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 36 (1926) 336. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 14 (1966) 272.
23. E. Schrödinger: Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen der Physik*, 79 (1926) 361. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 2 (1954) 567.
24. E. Schrödinger: Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen. *Annalen der Physik*, 79 (1926) 22. és *Magyar Fizikai Folyóirat*, 14 (1966) 359.
25. L. de Broglie: Recherches sur la théorie des quanta (Thèses, Paris 1924). *Annales de Physique*, 3 (1925) 22.
26. P. A. M. Dirac: A kvantumelmélet kibontakozása. *Fizikai Szemle*, 23 (1973) 289.

# KVANTUMELMÉLET ÉS KAUZALITÁS

Szabó Gábor

HUN-REN Bölcsészettudományi Kutatóközpont, Filozófiai Intézet, Budapest

E-mail: szabogabor@abtk.hu

*A Bell-egyenlőtlenségek köztudottan kizárják az EPR-korrelációk lokális, konspirációmentes, közösok-típusú magyarázatát. De vajon létezik a közös okoknak olyan kvantumossal általánosítása, amely lehetővé tesz egy ilyen magyarázatot?*

## 1. Bevezetés

Ha egy városba vezető autótutak forgalmát tanulmányozzuk, sokféle korrelációra lehetünk figyelmesek. Regge-

lenként például az utakon megnő a városba igyekvő autók száma, az esti órákban pedig a városból kiáramló autóké. Máskor az egyik úton akadózik a forgalom, a másikon pedig megélénkül. A sokféle korreláció magyarázata azonban mindig kétfajta oksági mintázatba illeszkedik. Az utakon esténként megnövekedő forgalom oka a munkaidő vége; az egyik úton megnövekedett forgalomnak pedig a másik út akadozó forgalma, amelyről az autósok a rádióból értesülhetnek. Úgy is fogalmazhatunk, hogy az első esetben a korrelációt egy további esemény, egy közös ok magyarázza, a második esetben pedig a korreláló események közötti közvetlen oksági kapcsolat.

Hogy egy korreláció magyarázata mikor milyen kauzális típusba esik, arra nincsen általános szabály. Némely esetben nyilvánvaló, más esetekben pedig valószínűtlen a közvetlen kauzális kapcsolat a korreláló események között. Kizárni a közvetlen oksági viszonyt azonban csak akkor lehetséges, ha azt valamilyen természettörvény tiltja. Teljes általánosságban ilyen természettörvényt csak egyet ismerünk: a relativitáselméletnek azt az állítását, hogy minden kauzális hatás terjedési sebessége



Szabó Gábor a HUN-REN Bölcsészettudományi Kutatóközpont Filozófiai Intézetének tudományos tanácsadója. Kutatási területe a modern fizika filozófiai kérdései, valamint a valószínűség és a kauzalitás metafizikája.

kisebb a fénysebességnél. Ha tehát két korreláló esemény térszerűen szeparált, akkor a korreláció magyarázata csak közös okok segítségével lehetséges.

A kvantumelmélet EPR-korrelációi pontosan ilyen térszerűen szeparált események közötti korrelációk, amelyek kizárják a direkt típusú kauzális viszonyt. Magyarázatukhoz tehát olyan közös okokat kell keresni, amelyek egyfelől a korreláló események közös kauzális múltjában fekszenek, másfelől a korreláció közös okainak minősülnek. De milyen események minősülnek közös oknak?

## 2. A közös ok fogalma

A közös ok fogalmához elégséges feltételt nehéz volna megadni, de egy nagyon fontos szükséges feltétel a rendelkezésünkre áll. A feltétel a tudományfilozófus Hans Reichenbachtól származik, aki a közös ok fogalmát először definiálta valószínűségi fogalmak segítségével (Hofer-Szabó et al., 2013). Reichenbach gondolatának lényege, hogy a közös ok, amennyiben feltételként kezeljük, a korreláló eseményeket leárnyékolja egymástól, vagyis a korreláló eseményeket feltételesen függetlenné teszi. Legyen  $A$  és  $B$  két esemény,  $A \wedge B$  a két esemény konjunkciója és

$$p(A \wedge B) \neq p(A)p(B)$$

a közöttük levő korreláció egy klasszikus valószínűségi térben. Az eseménytér egy  $\{C_k\}$  partícióját – vagyis olyan események halmazát, amelyek páronként kizárják egymást és uniójuk a teljes eseménytér – a korreláció közös okának nevezzük, amennyiben minden  $k$ -ra az alábbi feltételes függetlenség teljesül:

$$p(A \wedge B | C_k) = p(A | C_k)p(B | C_k),$$

ahol

$$p(A | C_k) := \frac{p(A \wedge C_k)}{p(C_k)}$$

a klasszikus feltételes valószínűséget jelöli. A fenti feltételes függetlenség azt fejezi ki, hogy a korreláció az  $A$  és  $B$  események között eltűnik, amennyiben a valószínűségeket a közös okokra kondicionáljuk. A bevezető példánkra alkalmazva: ha a napot a munkaidő szempontjából releváns napszakokra osztjuk fel, akkor a különböző utak forgalma között nem lesz korreláció. Se reggel, se délben, se este *külön-külön* nem tapasztalunk korrelációt, hiszen a forgalom minden úton a napszaknak megfelelően rögzített. Korrelációt csak akkor kapunk, ha a forgalmat a teljes napra összegezzük.

Az 1960-as évek talán legmeglepőbb felfedezése az volt, hogy az EPR-korrelációk nem magyarázhatók közös okokkal. A felfedezés, amelynek elméleti és filozófiai jelentőségét alig lehet túlbecsülni, John Stewart Belltől (1964/2004) származott, és a híres Bell-egyenlőtlenségekben öltött testet. A Bell-egyenlőtlenségek és a kö-

zös okok viszonya azonban némi pontosításra szorul. Először is az EPR-korrelációk kísérleti szinten maguk is feltételes korrelációk, mivel különböző mérésválasztásokhoz tartozó kimenetek közötti korrelációkat jelentenek. Ezekről a mérésválasztásoktól Bell megkövetelte, hogy statisztikusan függetlenek legyenek a közös okoktól. Ez az ún. *no-conspiracy* feltétel mintegy a szabad mérésválasztást garantálja. Másodszor Bell azt is megkövetelte, hogy a különböző mérésválasztásokhoz tartozó kimenetek közötti korrelációkat ne más-más közös okok magyarázzák, hanem ugyanazok a közös okok – vagyis, hogy a közös okok ún. *közös* közös okok legyenek. Ezek mellett a természetes elvárások mellett az EPR-korrelációk közösok-típusú magyarázata már valóban kizárható.

Az elmúlt hatvan évben számos próbálkozás történt a közös ok fogalmának módosítására, illetve a járulékos feltételek lazítására (E. Szabó, 2002). Ezek a próbálkozások azonban sikertelennek bizonyultak. A Bell-egyenlőtlenségek sérülése a kvantumelméletben azt bizonyította, hogy az EPR-korrelációk nem illeszthetők be egy olyan kauzális mintázatba, amely egyben a relativitás-elmélet követelményeinek is megfelel.

## 3. Kvantumos közös okok

Szigorú értelemben azonban a relativisztikus lokalitás feltétele nem fogalmazható meg a Bell-egyenlőtlenségek szokásos keretei között. A Bell-egyenlőtlenségek ugyanis tisztán valószínűségi állítások, amelyek az események téridőbeli lokalizációját csak közvetve, valószínűségi függetlenségek formájában reprezentálják. A közös ok pontos lokalizációja és a lokalitási feltétel vizsgálata csak egy olyan fizikai elméleten belül lehetséges, amely egyszerre képes számot adni az események valószínűségéről és lokalizációjáról. Ilyen elmélet a térelmélet.

Azt a kérdést, hogy az algebrai kvantumtérelméletben érvényes-e a *közös ok* elve – vagyis térszerűen szeparált korrelált eseményekhez mindig található-e közös ok –, először Rédei Miklós (1997) tette fel. Rédei megmutatta, hogy az elv lokálisan végtelen szabadságfokú térelméletben mindig érvényes, és a közös ok lokalizálható a korreláló események kauzális múltjának uniójában (de a metszetében nem). Az is hamar kiderült azonban, hogy Rédei eredménye nem érvényes minden kvantumtérelméletben, például az Ising-modellben, vagyis a közös ok elve érzékenyen függ az algebra típusától (Hofer-Szabó, Vecsernyés 2012). Felvetődött a kérdés, hogy vajon lehetséges-e a közös ok fogalmát úgy általánosítani, hogy az elv érvényes legyen a kvantumtérelméletek szélesebb körében is. A keresés a kvantumos közös ok irányába mutatott. Miről is van szó?

A klasszikus valószínűségelmélet mögött egy klasszikus eseménytér áll, ahol az események a klasszikus logika szabályainak engedelmeskednek. A kvantumelmélet eseménytere azonban nem klasszikus, és így a ráépülő

valószínűségelmélet sem az. A kvantumelméletben az eseményeket egy Hilbert-tér projektoraival reprezentáljuk, a valószínűséget pedig egy állapottal (egyre normált, pozitív lineáris funkcionállal). Legyen  $\hat{A}$  és  $\hat{B}$  két eseményt reprezentáló projektor,  $\phi$  pedig egy állapot a Hilbert téren. A két esemény közötti korrelációt ekkor a

$$\phi(\hat{A}\hat{B}) \neq \phi(\hat{A})\phi(\hat{B})$$

egyenlőtlenség reprezentálja. (A szokásos braketjelölésben a  $\phi(\hat{A})$  valószínűség  $\langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle$  volna. Mi itt mégis az előbbi jelölést használjuk, mivel ez jobban mutatja a klasszikus és kvantumos valószínűség közötti szoros kapcsolatot.)

A klasszikus esethez hasonlóan a kvantumelmélet eseményterének egy partícióját is olyan események alkotják, amelyek páronként kizárják egymást, és uniójuk a teljes eseménytér. A Hilbert-téren egy ilyen partíciót páronként merőleges és az egységre összegződő projektorok reprezentálnak. Ennélfogva a *kvantumos közös ok* a Hilbert-tér egy olyan  $\{\hat{C}_k\}$  partíciója, ahol minden  $k$ -ra az alábbi feltételes függetlenség teljesül:

$$\phi(\hat{A}\hat{B}|\hat{C}_k) = \phi(\hat{A}|\hat{C}_k)\phi(\hat{B}|\hat{C}_k),$$

ahol

$$\phi(\hat{A}|\hat{C}_k) := \frac{\phi(\hat{C}_k\hat{A}\hat{C}_k)}{\phi(\hat{C}_k)}$$

a kvantumos feltételes valószínűség.

Első látásra a kvantumos közös ok definíciója nem sokban különbözik a klasszikus közös ok definíciójától. Mindkét esetben a közös ok olyan események halmaza, amelyekre kondicionálva a korreláció eltűnik. A nem klasszikus eseménytérben azonban a közös okok nem feltétlenül mérhetők egyszerre (kompatibilisek) a korreláló eseményekkel. Formálisan ez azt jelenti, hogy a közös okokat reprezentáló projektorok nem feltétlenül kommutálnak a korreláló eseményeket reprezentáló projektorokkal (jóllehet maguk a térszerűen szeparált korreláló események projektorai kommutálnak egymással). A kvantumos közös okokat éppen ez a nem kommutativitás teszi általánosabbá a klasszikus közös okoknál (Hofer-Szabó, Vecsernyés 2018).

A közös ok kvantumos általánosítása két szempontból is eredményesnek bizonyult. Egyrészt kiderült, hogy a kvantumos közös okok bevezetésével a közös ok elve tágabb körben, például az Ising-modellben is érvényben marad, másfelől – igen csak meglepő módon – az is kiderült, hogy a Bell-egyenlőtlenségeket maximálisan sértő EPR-korrelációkhoz mégis csak adható közösok-típusú magyarázat, ráadásul olyan, amely a közös okot a korreláló események közös múltjában lokalizálja.

Ez utóbbi eredmény azonban ellentmondani látszott a Bell-egyenlőtlenségek szokásos értelmezésének. Hogyan lehetséges ugyanis az EPR-korrelációk közösok-típusú, ráadásul relativisztikus magyarázata, ha a Bell-egyenlőtlenségek épp az ilyen magyarázatokat zárják ki?

A válasz a nem klasszikus feltételes valószínűségeknek a klasszikustól eltérő viselkedésében rejlik. A klasszikus valószínűségelméletnek ugyanis fontos tétele az ún. teljes valószínűség tétele, amely azt garantálja, hogy bármely esemény valószínűsége mintegy visszaépíthető bármely teljes körű feltételrendszerből. Formálisan:

$$p(A) = \sum_k p(A|C_k) p(C_k).$$

A közös okokra vonatkoztatva ez azt jelenti, hogy a korreláló események valószínűsége rekonstruálható lesz a közös okokra vett feltételes valószínűségek súlyozott összegeként. Ismét csak a bevezetőben már említett példát említve: bármely úton a napi forgalom nagysága, vagyis az autók relatív gyakorisága, rekonstruálható az egyes napszakokra vetített forgalom súlyozott összegeként.

Bár a teljes valószínűség tétele rejtve marad a közös ok definíciójában, mégis fontos szerepet játszik a korrelációk magyarázatában. Azt biztosítja ugyanis, hogy a jelenség egy olyan finomabb leírása, amely a közös okokat is figyelembe veszi, kompatibilis legyen a felszíni, megfigyelhető korrelációkkal. A felszíni korrelációk tehát mintegy a jelenségek durvább leírásaként jelentkeznek. Korrelációt akkor látunk, ha elfeledkezünk a jelenség mélyebben fekvő okairól.

A teljes valószínűség tétele azonban nem érvényes a kvantum-valószínűségelméletben. Tipikus esetben ugyanis

$$\phi(\hat{A}) \neq \sum_k \phi(\hat{A}|\hat{C}_k) \phi(\hat{C}_k),$$

és pontosan ez teszi lehetővé, hogy a kvantumos közös okokból ne lehessen levezetni a Bell-egyenlőtlenségeket. A Bell-egyenlőtlenségekben ugyanis éppen a teljes valószínűség tétele révén tudunk következtetni a háttérben álló közös okok statisztikájából a felszíni korrelációkra. A teljes valószínűség tételének feladásával ez a logikai lánc a közös ok és a felszíni korrelációk között megszakad. A kvantumos közös okok segítségével tehát csak azon az áron magyarázhatjuk az EPR-korrelációkat, ha feladjuk a felszíni korrelációk rekonstruálhatóságát a közös okokból.

Kérdés, mekkora ez az ár, amit a klasszicitás feladása miatt meg kell fizetnünk.

## 4. Kritikák és nyitott kérdések

A közös ok fogalmának általánosítása éppen a Bell-egyenlőtlenségek megkerülése miatt nem maradt kritika nélkül. Az egyik kritika éppen a fent említett teljes valószínűség tételének feladását érintette (Lazarovici, 2014). Elfogadható-e egy olyan magyarázat, amely nem képes visszaadni a magyarázni kívánt események valószínűségét? Egy másik kritika a közös okok egy bizonyos alosztályának, a szorzatállapotoknak a trivialitását

hangsúlyozta (Cavalcanti, Lal, 2014). Harmadrészt, az sem teljesen világos, hogy pontosan hogyan is interpretálhatók a kvantumozs közös okok. Ha a közös okok nem kompatibilisek az okozatokkal, akkor vajon realizálhatók-e egyszerre? A teljes valószínűség tételének sérülése nem épp azt fejezi-e ki, hogy vagy egy olyan kísérleti elrendezést választunk, amelyikben az eredeti  $\phi(\hat{A})$ ,  $\phi(\hat{B})$  és  $\phi(\hat{A}\hat{B})$  valószínűségeket kapjuk, de ekkor a közös okokat nem mérhetjük meg; vagy pedig egy olyan kísérleti elrendezést, amelyikben a közös okokat megmérve a  $\phi(\hat{A}|\hat{C}_k)$ ,  $\phi(\hat{B}|\hat{C}_k)$  és  $\phi(\hat{A}\hat{B}|\hat{C}_k)$  valószínűségeket kapjuk, de ezekből nem vezet út a korreláló események eredeti valószínűségéhez? A szituáció nagyban hasonlít a kétréses kísérlethez, ahol szintén választanunk kell az interferencia fenntartása és a részecskék útjának meghatározása között. Ezeket a kritikákat fontos szem előtt tartani, de talán nem perdöntőek a kvantumozs közös okok szempontjából. Megmutatható ugyanis, hogy bár a teljes valószínűség tétele valóban nem analitikus igazság a kvantum-valószínűségelméletben, bizonyos esetekben a kvantumozs közös ok alkalmas megválasztásával mégis csak teljesül (Hofer-Szabó, Szalay, 2025). A teljes valószínűség tételének teljesülése tehát a leárnýekolási tulajdonság mellett egy további kritérium lehet a tényleges közös okok kiválasztásához.

A kvantumozs közös okok számos tulajdonsága még feltérképezésére vár, de egy fontos probléma kezelése különösen sürgető. Amint említettük, a kvantumvalószínűségek a szokásos operacionalista értelmezésben klasszikus feltételes valószínűségek, amelyek adott mérésválasztások mellett a kimenetek statisztikáját rögzítik (E. Szabó, 2001). A kvantumozs közös okos magyarázat tehát csak akkor lehet teljes, ha illeszkedik ebbe az operacionalista értelmezési keretbe. Ennek az értelmezési keretnek azonban, amint azt láttuk, fontos része a mérésválasztások és a közös okok statisztikus függetlenségi követelménye, vagyis a no-conspiracy feltétel. Az, hogy a kvantumozs közös okok valóban teljesítik-e

ezt a feltételt, azaz az EPR-korrelációk konspirációmentes magyarázatát adják-e, egyelőre nyitott kérdés.

## Irodalom

- Bell J. S. (1964/2004): On the Einstein–Podolsky–Rosen paradox. In: *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Cavalcanti E., Lal R. (2014): On modifications of Reichenbach’s principle of common cause in light of Bell’s theorem. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 47, 424018.
- E. Szabó L. (2001): Critical reflections on quantum probability theory. In: M. Rédei, M. Stoeltzner (eds.), *John von Neumann and the Foundations of Quantum Physics*. Kluwer: Dordrecht, 2001.
- E. Szabó L. (2002): A nyitott jövő problémája. Budapest, Typotex.
- Hofer-Szabó G., Rédei M., E. Szabó L. (2013): *The Principle of the Common Cause*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Hofer-Szabó G., Vecseryés P. (2012): Reichenbach’s common cause principle in algebraic quantum field theory with locally finite degrees of freedom. *Foundations of Physics*, 42, 241–255.
- Hofer-Szabó G., Vecseryés P. (2018): *Quantum Theory and Local Causality*. Dordrecht: Springer Brief Press.
- Hofer-Szabó G., Szalay Sz. (2025): Noncommuting common causes revisited. *Quantum*, <https://arxiv.org/abs/2411.05468>
- Lazarovici D. (2014): Lost in translation: A comment on ‘noncommutative causality in algebraic quantum field theory’. In: Galavotti, M. C. et al. (eds.) *New Directions in the Philosophy of Science*. Springer International Publishing.
- Rédei M. (1997): Reichenbach’s common cause principle and quantum field theory. *Foundations of Physics*, 1309–1321.

# A KVANTUMOS ÉS KLASSZIKUS TARTOMÁNYOK HATÁRÁN

Polónyi János<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Institut Pluridisciplinaire Hubert Curien, Université de Strasbourg, Strasbourg

<sup>2</sup>HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest

E-mail: polonyi@iphc.cnrs.fr



Polónyi János a Strasbourgi Egyetem emeritusz professzora, Magyarországon, Németországban, az Egyesült Államokban és Franciaországban végezte kutatásait. Jelenlegi érdeklődési területe a nyitott rendszerek dinamikája, melyet a kvantumtérelmélet és a renormálási csoport módszereivel vizsgál.

## 1. Mikroszkopikus-makroszkopikus átmenet

A kvantummechanika száz év alatt teljesen váratlan javaslatgyűttesből a fizika egyik pillérévé vált, melyet az azóta végzett mérések kivétel nélkül megerősítettek. Ezzel fizikai világunk két szintre, mikroszkopikus és makroszkopikus jelenségekre hasadt, melyek alapfeltevései teljesen különbözőek. Ugyanakkor meg vagyunk győződve arról, hogy világunk egy és oszthatatlan. Mennyiben békíthető ki ez a két szint?

Összeférhetőségüket kizárólag egy olyan fogalmi rendszer segítségével ellenőrizhetjük, amely interpolál a kvantumos és a klasszikus tartomány határán, és ezért mindkét szinten alkalmazható.

Hol is keressük a kvantumos-klasszikus átmenetet? A kvantummechanika egyik meglepő eredménye az elemi részecskék definíciója. A dinamikát lineáris terekben megvalósító formalizmusban természetes módon azonosíthatók a dinamikai folyamatok elemi, diszkrét lépései a szimmetriák irreducibilis ábrázolásai segítségével. Ennek megfelelően a klasszikus fizikából kiindulva megfigyeléseink csak akkor érik el a kvantumos szintet, amikor felbontásuk eleget az egyes elemi gerjesztések követéséhez. Akkor azonban a mérés olyan pontosságúvá válik, hogy a mérőeszköz elkerülhetetlen kölcsönhatása a mért rendszerrel – elkerülhetetlen, hiszen ennek alapján beszélhetünk egyáltalán mérésről – befolyásolja a mérés eredményét. Ezzel pedig a determinizmus empirikus ellenőrzése lehetetlenné vált, hiszen definíció szerint nem ismerjük mérőeszközünk kezdeti feltételét.

A kvantumos-klasszikus átmenet megértését célzó és az alábbiakban vázolt javaslat abból áll, hogy a kvantum-klasszikus átmenet helyett a mikroszkopikus-makroszkopikus átmenetre fordítsuk figyelmünket – az iskolában megismert zárt rendszerek helyett nyitott rendszerek megfogalmazásában. Ennek megfelelően fogalmazzuk meg úgy a törvényeket, hogy azok tartalmazhassák a megfigyelést elkerülő, de a megfigyelt rendszerrel kölcsönható dinamikai szabadságfokok hatását.

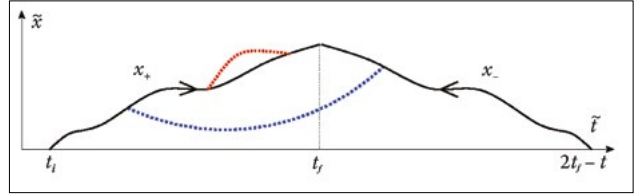
## 2. Nyílt rendszerek

A nyílt rendszerek leírása két egymástól függetlennek tűnő problémát tartalmaz. (a) A környezet általában sokkal nagyobb, összetettebb, mint a megfigyelt rendszer. Hogyan találjuk meg a rendszer számára fontos környezeti szabadságfokokat? (b) Hogyan illeszthetjük be ezeket a megfigyelt rendszer dinamikájába?

Mindkét fent vázolt probléma egyidejű megoldását először a klasszikus fizikában tárgyaljuk, az  $x$  és  $y$  koordinátákkal leírt rendszer és környezet együttesének zárt dinamikáját leíró  $S[x, y]$  hatásból kiindulva [1]. A (b) kérdés megválaszolása, a nyílt rendszer mozgásegyenletének levezetése két lépésből áll. (i) Oldjuk meg a környezet  $\delta S[x, y]/\delta y = 0$  mozgásegyenletét tetszőleges  $x(t)$  trajektóriára! (ii) Az így kapott  $y[x](t)$  trajektóriát helyettesítjük be a rendszer variációs mozgásegyenletébe:  $\delta S[x, y]/\delta x|_{y=y[x]} = 0$ . A nyílt dinamika formális problémája abban nyilvánul meg, hogy ezt a nyílt mozgásegyenletet nem lehet a természetesnek tűnő  $S_{\text{eff}}[x] = S[x, y[x]]$  hatásból származtatni, hiszen

$$\left. \frac{\delta S[x, y]}{\delta x} \right|_{y=y[x]} \neq \frac{\delta S[x, y[x]]}{\delta x}. \quad (1)$$

A probléma megoldása kézenfekvő: használjunk két koordinátát a rendszer minden szabadságfokára,  $x \rightarrow (x, x')$ ,



1. ábra. A mozgást kétszer követjük végig, egyszer oda, majd a végpontban végrehajtott időirány megfordítása után, vissza az időben. A zárt kölcsönhatás (felső szaggatott vonal) az oda vagy a vissza meneten belül történik, a nyitott kölcsönhatás (alsó szaggatott vonal) a kétfajta mozgás között lehet jelenik meg

$S_{\text{eff}}[x, x'] = S[x, y[x']]$ , melyeket csak a mozgásegyenlet megoldása után teszünk egyenlővé. Az új koordinátát válasszuk meg úgy, hogy ez a megkettőződés formális maradjon, azaz mindkét koordinátára ugyanazt a trajektóriát eredményezze a variációs mozgásegyenlet! Ennek érdekében kétszer követjük végig a mozgást. Először előre haladva az időben, majd a végén megfordítjuk az időirányt, és visszafelé is végigkövetjük az időtükrözött mozgást, míg a kezdeti időig visszajutunk. Ez persze felesleges megkettőződés zárt dinamika esetében, de várjunk egy kicsit a javaslat elbírálásával!

A hatás megválasztása érdekében az így kapott és az ábrán vázolt  $\tilde{x}(\tilde{t})$  trajektóriát két részre bontva  $\tilde{x}(\tilde{t}) \rightarrow (x_+(t), x_-(t)) = (x(t), x(2t_f - t))$  vezetjük be a megkettőződést. A hagyományos  $S[x]$  hatással leírt zárt dinamika esetén az  $S[x_+, x_-] = S[x_+] - S^*[x_-]$  hatást választjuk, ahol a negatív előjel a  $t \rightarrow -t$  időtükrözésből fakad, és a komplex konjugálás a Green-függvények érdekében a hatásban bevezetett (itt az egyszerűség miatt nem tárgyalt) infinitezimális képzetes tagok miatt szükséges. A trajektóriák variációját pedig olyan trajektóriahalmazon végezzük el, melyet mindkét trajektóriára kirótt fizikai kezdeti feltétellel és a végső időpontban kiszabott  $x_+(t_f) = x_-(t_f)$  lezárással definiálunk. Innen ered a módszer zárt időpálya (Closed Time Path, CTP) elnevezése.

Vegyük észre, hogy ebben a rendszerben minőségleg új kölcsönhatások vezethetők be, ugyanis a szokásos  $x_{\pm} \leftrightarrow x_{\pm}$  kölcsönhatás mellett a zárt rendszerekben ismeretlen  $x_{\pm} \leftrightarrow x_{\mp}$  kölcsönhatásra is lehetőség van. Mivel  $x_{\pm}$  környezetét  $x_{\mp}$  képviseli, ez utóbbi a rendszer-környezet kölcsönhatásnak felel meg. Így oldódik meg a fentebb említett (a) probléma: a rendszer számára fontos környezet pont annyira összetett, mint maga a rendszer. Ez jól látható az

$$S[x_+, x_-] = S_1[x_+] - S_1[x_-] + S_2[x_+, x_-]$$

felbontásban, ahol az egyetlen koordinátára vonatkozó  $S_1[x]$  és a koordinátpárok közti kölcsönhatást tartalmazó  $S_2[x_+, x_-]$  a zárt, illetve nyitott kölcsönhatást írja le.

A kvantummechanikában a szabadságfokok megkettőzésének bevezetése a következő gondolatmenettel történik. Egy nyitott kvantumrendszer állapota tipikusan kevert, ezért a nyitott kvantumdinamikát a sűrűségmátrix segítségével kell leírni. Tetszőleges fizikai  $A$  mennyiség várható értékét tekintve,

$$\langle A \rangle = \text{Tr}[A\rho] = \int dx_+ dx_- \langle x_- | A | x_+ \rangle \rho(x_+, x_-), \quad (2)$$

de amennyiben a rendszer tiszta állapotban van, a sűrűségmátrix faktorizálódik,  $\rho(x_+, x_-) = \langle x_+ | \psi \rangle \langle \psi | x_- \rangle$ , így a fenti várható értékben a  $\langle \psi |$  bra és a  $|\psi \rangle$  ket állapotok kvantumfluktációi,  $\langle \psi | x_- \rangle$  és  $\langle x_+ | \psi \rangle$  függetlenek. Azonban egy kevert állapot sűrűségmátrixa,

$$\rho(x_+, x_-) = \sum_n \langle x_+ | \psi_n \rangle p_n \langle \psi_n | x_- \rangle, \quad n=1, 2, \dots$$

nem faktorizálható, ezért nyílt rendszerekben a bra és a ket komponens kvantumfluktációi korreláltak.

A pályaintegrálos formalizmusban ez a szabadságfokok klasszikus mechanikában megfigyelt megkétszereződéséhez vezet [2]. Az így kialakult formalizmus már jó fél évszázada ismert a kvantumelméletben [3–5], csupán általánosságának és jelentőségének felismerése váratott magára.

Az  $S[x_+, y_+, x_-, y_-]$  hatásra alapuló pályaintegrálból elindulva a környezet szabadságfokainak integrálásával kapott  $S_{\text{eff}}[x_+, x_-]$  hatás a nyílt dinamikát írja le. A környezeti szabadságfokok eliminálását a renormálási csoport módszerével lehet módszeresen végrehajtani. Ily módon a klasszikus, kvantum, zárt és nyitott dinamikát egyaránt leíró hatásfunkcionál felhasználásával új lehetőség nyílik a kvantum-klasszikus átmenet leírására.

### 3. A mikroszkopikus folyamatok sajátos jellemzői

Mielőtt fő célunkat, a makroszkopikus határesetet tárgyalnánk, megemlítünk két olyan kvantum jelenséget, melyeknek el kell tűnniük ahhoz, hogy a klasszikus fizikához eljérjünk.

Egyik a makroszkopikusan különböző kvantumállapotok között fellépő interferencia, melynek elnyomását dekoherenciának hívják. Ez a környezettel való kölcsönhatásból fakad, és jól megértett folyamat. Tekintsünk például egy bútor darabot, melynek a legcsekélyebb áthelyezése a szobában lévő levegőmolekulák mikroszkopikus átrendeződéséhez vezet. Nem nehéz belátni a bútor és a levegő közös zárt dinamikájában, hogy mindegyik molekula állapotának megváltozása egy egynél kisebb abszolút értékű komplex számszorzóval csökkenti a bútor két állapota közti interferenciát, amely ennél fogva teljesen eltűnik a termodinamikai határesetben. A dekoherencia eredményeképp a sűrűségmátrix nem diagonális elemei nagyon kicsivé válnak, ez azonban bázisfüggő. A koordinátabázisban a dekoherenciát a rendszer és a környezet összefonódását jellemző  $S_2[x_+, x_-]$  tag képzetes része írja le, amely sokrészecskés rendszerekben a kvantumtérelmélet perturbációs számítása segítségével egyszerűen azonosítható és számítható.

A másik kérdéses jelenség a kvantum világot jellemző indeterminizmus (kvantumfluktációk), melyek elnyomása is feltétele a determinisztikus klasszikus tör-

vények megjelenésének. A determinizmus két változatban szokott megjelenni a köztudatban.  $A$  és  $B$  jelenség determinisztikus logikai kapcsolatban van,  $A \leftrightarrow B$ , ha elmondható, hogy  $A$  akkor és csak akkor jelenik meg amikor  $B$ . A determinizmus a filozófusok számára inkább az ok-okozat, röviden okság törvényeként ismeretes, semmi sem történik ok nélkül. Ez annak felel meg, hogy ha  $A$  megtörtént akkor  $B$  is bekövetkezik,  $A \rightarrow B$ . Kant óta elfogadott feltételezés, hogy ez csupán gondolkodásunk rendezőelve. A filozófusok által használt ok és okozat különbsége, azaz hogy az ok időben megelőzi az okozatot, nehezen értelmezhető a klasszikus fizikában, amely csupán egy mozgás, illetve folyamat két különböző időpontban felvett állapota közti összefüggésekre szorítkozik. A klasszikus determinisztikus törvények szerint a két állapot közül az egyik szükségképpen meghatározza a másikat, függetlenül az időbeli sorrendtől.

A kvantummechanikában nem valósul meg sem a determinizmus, sem pedig az okság elve. A determinizmus hiánya a Heisenberg-féle határozatlansági reláció alapján érthető meg. Két fizikai mennyiség kompatibilis, ha az azokat leíró operátorok kommutálnak. A határozatlansági reláció szerint egy rendszeren két nem kompatibilis fizikai mennyiség egymás után mért értéke között csak valószínűségi, nem pedig determinisztikus kapcsolat van. Az okság elvének megsértése pedig legkönnyebben az ún. EPR-paradoxon [7] példáján keresztül érthető meg. Tekintsünk két mikroszkopikus rendszert, melyek egy pillanatban kölcsönhatnak, és ennek folyamán állapotuk összefonódik! A kvantummechanika szerint a két rendszeren egyidejűleg elvégzett mérések eredménye korrelált az ún. Bell-egyenlőtlenségek sérülése miatt, függetlenül a két rendszer távolságától. A jelenség kísérleti ellenőrzésére számos technikai probléma megoldása után csak 48 évvel később került sor, melyet számos további mérés követett az elképzelhető hibaforrások kiküszöbölésével.

Ezek szerint az egyik mérés által kapott információ a fénysebességnél gyorsabban módosítja a másik rendszert. A speciális relativitáselmélet szerint a térszerűen szeparált mérések időbeli sorrendje függ attól, hogy milyen sebességgel mozog a sorrendet felállító megfigyelő, azaz tetszőleges. Tehát a két mérés eredménye közt nem állhat fenn oksági kapcsolat – Kant feltevését megerősítve – helyette egy régebben megtörtént és a megfigyelést elkerülő kölcsönhatást kell feltételeznünk. Erről lásd még a *Fizikai Szemle* jelen számában Szabó Gábor cikkét a „kvantum közös ok” hipotéziséről. Klasszikus fizikai mérések esetén az okság ilyen megkerülése nyilvánvalóan illuzórikus, például a szinkronizált órák korrelált viselkedése triviális jelenség, de az említett mikroszkopikus kísérlet esetében biztosak lehetünk abban, hogy csak a mérés által, a mérés idejében kiváltott folyamatok korrelációjáról van szó. A cikk további részében azt fogjuk tárgyalni, hogyan megy át a mikroszkopikus indeterminizmus makroszkopikus determinizmusba.

## 4. Valószínűség-elmélet

Folytassuk most gondolatmenetünket, mellyel az indeterminisztikus mikroszkopikus törvények determinisztikus makroszkopikus törvényekbe történő átalakulását követjük! Ennek az átmenetnek megértése az indeterminisztikus jelenségek matematikai leírásán, a Kolmogorov által megfogalmazott axiómákra alapuló valószínűség-számításon alapul.

Mit is jelent egy jelenség valószínűsége? Objektívnek mondható, ha a jelenséget jellemzi, szubjektívnek pedig, ha a jelenséget vizsgálóra vonatkozik. A Bayes-tétel szokásos értelmezése arra utal, hogy a valószínűség az ismereteket gyűjtő gondolkodót jellemzi.

Az objektív jelleget helyezi előtérbe a nagy számok törvénye: egy véletlen  $X$  jelenség egymástól független megvalósulásait vizsgálva a relatív gyakoriság, egy adott érték megjelenésének  $N_r$  és az összes megfigyelés  $N_t$  hányadosa,  $p_{\text{rel}} = N_r/N_t$ , a jelenség  $p(X)$  valószínűségéhez tart az  $N_t \rightarrow \infty$  határátmenetben. Sajnálatos módon ez a valószínűségnek egy körkörös definíciójához vezet, és csupán azt biztosítja, hogy a relatív gyakoriság és a valószínűség eltérése a valószínűség,  $p(p_{\text{rel}} - p(X))$  kellően nagy  $N_t$ -re tetszőlegesen kicsi.

A valószínűség eredetének kérdésében Kolmogorov axiómái sem segítenek, ezek csupán a legegyszerűbb, azaz elemi események valószínűsége ismeretében szabják meg az összetettebb események valószínűségét. Az elemi események valószínűsége eredetének kérdése pedig túlmutat a matematikán, és a jelenségek részletesebb ismeretét, fizikai megközelítést igényel. Jaynes értelmezése szerint a valószínűségszámítás a logika kiterjesztése [8]. Fontos megjegyezni, hogy ugyan a klasszikus fizika valószínűségei kielégítik Kolmogorov axiómáit, kvantumfolyamatok esetén ez csak teljes dekoherencia esetén történik meg.

A determinisztikus klasszikus fizikában nincs helye objektív bizonytalanságnak. Tehát itt a valószínűség szubjektív, a megfigyelés véges felbontásából vagy pedig a megfigyelő véges információfeldolgozási képességéből fakad. Ez persze nem azt jelenti, hogy bárki bármit állíthat; azonos részleges információval rendelkező gondolkodóknak azonos következtetésre kell jutniuk.

A valószínűség a kvantummechanikában objektív módon, konstruktív definícióval jelenik meg a Born-szabály révén, amely egy mérés lehetséges eredményeinek előfordulási valószínűségét szabja meg. Ez a valószínűség nem a megfigyelés hiányosságaiból ered, és ennél fogva objektív annak ellenére, hogy empirikus ellenőrzése a nagy számok törvényén alapul. Ennek belátására elegendő elképzelni két kölcsönható részecske tiszta állapotát melyben a két komponens összefonódik. A kvantumállapot információnk összegzéseként fogható fel, tehát a tiszta állapot tartalmazza az adott rendszerről megszerezhető maximális információt. Azonban ennek a birtokában sem tudunk sem-

mit egyetlen részecske állapotáról amennyiben az összefonódott egy másikkal. Más szóval a mérés folyamán, amikor a mért rendszer és a mérőeszköz kölcsönhat és összefonódik, információt nyerünk és veszünk, nem tudjuk kinyerni a teljes információt a mért rendszert alkotó részecskékről. Ezen a ponton kapcsolódik össze az információelmélet és a kvantummechanika, melynek szabályai a részleges információ optimális és módszeres alkalmazásának tűnnek. Tehát a klasszikus fizikát a kvantummechanikából származtatva elkerülhetetlennek tűnik az indeterminizmus.

## 5. A központi határeloszlás-tétel és a méréselmélet

Hogy lehet elképzelni a determinisztikus törvények megjelenését az előző fejezet végkövetkeztetése fényében? Keressük a választ a valószínűségszámítás központi határeloszlás-tétele segítségével, mely olyan numerikus értékű  $\xi$  valószínűségi változóra alkalmazható, melynek mind a  $\bar{\xi}$  várható értéke, mind pedig az attól való eltérés négyzetének a várható értéke,  $\sigma^2 = (\xi - \bar{\xi})^2$ , véges. A tétel szerint  $N$  független megvalósulás átlagának eloszlása olyan normális eloszláshoz tart, melynek várható értéke  $\bar{\xi}$ , és az attól való eltérés négyzetének várható értéke  $\sigma^2/N$ . Tehát az átlag fluktuációja az eredeti szórás  $1/\sqrt{N}$ -szere-se, ez pedig kellően nagy  $N$ -re tetszőlegesen kicsi lehet.

Ez a tétel az egyensúlyi statisztikus fizika megalapozásában döntő fontosságú, mert segítségével válnak értéketővé a termodinamikai határesetben a véletlenszerű fluktuációkból kiemelkedő determinisztikus törvények, melyeket a termodinamika intuitív módszerével is fel lehet térképezni. A tétel alkalmazása lokális fizikai mennyiségekre azért korlátozott, mert ezek a mennyiségek általában nem függetlenek. Ezt a feltételt kerüli meg a renormálási csoport módszere, mely felfogható a központi határeloszlás tételének olyan általánosításaként, ahol a valószínűségi változó megvalósulásai között megengedett a korreláció.

Mint említettük, a megfigyelt kvantumjelenségek annál a távolságskálánál olvadnak be a klasszikus fizikába, ahol a mérőeszköz felbontása túl durvává válik az egyes elemi gerjesztések követésére. Alkalmazható-e a központi határeloszlás-tétel a makroszkopikus mérőeszköz számára követhetetlen, nagyszámú kvantum fluktuációkra is? A válasz nem nyilvánvaló, mert a fluktuációkat komplex valószínűségi amplitúdó írja le egy adott bázisban, azonban a valószínűség, melyre a tétel vonatkozik, általában amplitúdók összegének abszolútérték-négyzete, melyből ráadásul a dekoherencia elnyomhatja az interferenciát. A tétel érvényben maradása nemcsak a determinizmus megjelenése szempontjából érdekes, a statisztikus fizika sokaságra alapuló leírásának jobb megértéséhez is elvezethet izolált kvantumrendszerek esetében [9]. A központi határeloszlás tételének bizonyítása pár sor a generálófüggvény

használatával. Hasonló függvény a CTP formalizmusban is bevezethető, és szintén egyszerű módon vezet a tétel állításához [10], illetve annak korrelált általánosításához, a renomálási csoport gondolatmenetét követve.

Tegyük fel, hogy mérésünk eredménye számos szabadságfok átlagának tekinthető. Például egy ampermérő mutatójának szöge a mérőeszköz áramkörében mozgó töltött részecskék átlagos mozgásának eredményeképpen alakul ki. Tekintsük a mutató szögét a megfigyelt rendszernek, melynek környezete tartalmazza ezeket a töltéseket. A mért mennyiség klasszikus viselkedésének két elégséges feltétele van, mindkettő a környezetre vonatkozik. (i) A környezetnek elég nagynek kell lenni ahhoz, hogy könnyen gerjeszthetővé váljon. Erre azért van szükség, hogy az így beálló erős dekoherencia összhangba hozza a kvantummechanika által adott valószínűséget Kolmogorov axiómáival. A dekoherencia, a sűrűségmátrix nem diagonális elemeinek elnyomása információvesztést jelent. Ez az irreverzibilis lépés kíséri a mikroszkopikus jelenségek megjelenését a makroszkopikus szinten. (ii) Kellően sok közelítőleg független környezeti szabadságfokra legyen a rendszer-környezet kölcsönhatás átlagolva ahhoz, hogy a mérés eredményének fluktuációja elhanyagolhatóvá váljon. Ez a feltétel sérül makroszkopikus kvantumjelenségeknél, mint például a termodinamika Gibbs-paradoxonjának elkerülésénél, a Bose–Einstein-kondenzációnál, a szuperfolyékonyságnál vagy a kvantumos Hall-effektusnál. Ezekben az esetekben a kölcsönható környezeti szabadságfokok nagy száma ellenére a szabadságfokok erős korrelációja, a térbeli lokalitás sérülése lehetővé teszi egyes kvantumjelenségek makroszkopikus nagyítását.

Tehát a klasszikus világ sem determinisztikus, csupán az Avogadro-szám elképesztő nagysága a makroszkopikus jelenségekben is szükségképpen jelenlévő indetermisztikus kvantumfluktuációkat gyakorlatilag felismerhetetlenné, jó közelítéssel elhanyagolhatóvá teszi. A determinisztikus klasszikus fizika a termodinamikához hasonlóan a makroszkopikus határesetben valósul meg. Ezen a ponton válnak el visszafordíthatatlanul a gyerekkorunkban kialakított, klasszikus fizikára alapozott fogalmaink a fizikai valóságtól.

#### Köszönetnyilvánítás

Köszönet illeti Asbóth Jánost, aki számos kérdéssel és megjegyzéssel hozzásegített, hogy ez az írás olvashatóbb és érthetőbb legyen.

#### Irodalom

1. J. Polonyi: *Ann. Phys.*, 467, (2024) 169694.
2. R. P. Feynman, F. L. Vernon: *Ann. Phys.*, 24, (1963) 118.
3. H. Umezawa, H. Matsumoto, M. Tachiki: *Thermo Field Dynamics and Condensed States*. North-Holland, Amsterdam, New York, Oxford (1982).
4. J. Schwinger: *J. Math. Phys.*, 2, (1961) 407.
5. L. V. Keldysh: *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 47, (1964) 1515 (*Sov. Phys. JETP*, 20, (1965) 1018).
6. A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen: *Phys. Rev.*, 47, (1935) 777.
7. Takács Gábor: *Fizikai Szemle*, 69/2, (2019) 43.
8. E. T. Jaynes: *Probability Theory, The Logics of Science*. Cambridge University Press, (2003).
9. Kormos Márton: *Fizikai Szemle*, 75/4, (2025) 114.
10. J. Polonyi: *Universe*, 7, (2021) 315.

## MÓDOSUL-E A KVANTUMELMÉLET A MAKROVILÁGBAN?

Diósi Lajos<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest

<sup>2</sup>Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

E-mail: diosi.lajos@wigner.hu

A kvantumelmélet eredetileg az atomi világ különös törvényeit jelentette. Évtizedekig fel sem merült, hogy azon túl, a makroszkopikus világban is alkalmazni lehetne, vagy tán kellene is. Schrödinger híres 1935-ös macskaparadoxona jó előre figyelmeztetett, furcsa helyzetekre vezetne, ha makroszkopikus szuperpozíciók is



Diósi Lajos elméleti fizikus a HUN-REN Wigner FK emeritusz kutatója, az ELTE magántanára. A Londoni Egyetem vendégprofesszora (1997/98), a Wissenschaftskolleg zu Berlin tagja (1998/99), az MTA doktora (2000), az MTA Akadémiai Díj birtokosa (2012). Legismertebb munkái a kvantummechanika alapjait, a kvantumelmélet és a gravitáció megfejtendő viszonyát célozzák. Kutat a kvantumelmélet egyéb területein is: nyitott rendszerek, mérések, termodinamika, optika, informatika. Oktatóként 2001-től itthon elsőként tart kvantuminformatika-előadást, tankönyve magyarul kiadása 2017-es.

léteznének. A kvantumelmélet sorra érte el sikereit egyre újabb rendszerekre, kéz a kézben haladva a kísérletekkel. Ezek a rendszerek kivétel nélkül mikroszkopikusak, a leírt kollektív jelenségek is mikroszkopikus dinamikákon alapulnak. Az 1960-as évekre pedig megérlik a gondolat, hogy a kvantummechanika kozmológiai méreteken is érvényes következményeit kimutassuk. A kvantumgravitáció ma sem rendelkezik egységes elmélettel, és kísérleti támogatása csupán közvetett és feltételes. A mikroszkopikus világ leírásában diadalmaskvantumelméletet egyből a kozmikus méretek világára kívántuk alkalmazni, kihagyva a kettő közötti méreteket. Az 1990-es évektől tárul fel a mezoszkopikus világnak a sajátos kvantumelmélete és kísérletei. Itt lehetne értelmezni a mikro- és makrovilág határát, vizsgálni a kvantumelmélet esetleges módosulását.

|                   |           |             |
|-------------------|-----------|-------------|
| fotonok           |           |             |
| elektronok        |           |             |
| atomok, molekulák |           |             |
| atommagok         |           |             |
| elemi részek      |           |             |
| gravitáció?       |           | mezoszkópia |
|                   | univerzum |             |
|                   | kvarok    |             |
| 1900              | 1950      | 2000        |

A kozmológiában egy nemlineáris, tehát módosult kvantumelméletet használunk. Lehet, hogy az úgynevezett félklasszikus gravitáció<sup>1</sup> a jövőben megértendő kvantumgravitációnak csupán egy effektív elmélete. Lehet, hogy fundamentális. A döntéshez kozmológiai mérési adataink ma még nem elegendők. A félklasszikus gravitáció nemrelativisztikus határesetete a nemlineáris Schrödinger–Newton-egyenlet, ez lesz írásunk központjában. Ez meglepő módon a makroszkópia előtt, már a mezoszkópiában jelentős módosulást hoz az eredeti Schrödinger-egyenlet jóslataihoz képest. Tárgyalhatóvá teszi a schrödingeri paradox szuperpozíciók kérdését.

## Schrödinger–Newton-egyenlet

Jánosy Lajos felvetette 1952-ben [1], hogy az elektron hullámfüggvénye talán mégsem követi a Schrödinger-egyenletet az atomi skálán túl, a hullámfüggvénye nem terjedhet ki makroszkopikus méretre. A Schrödinger-egyenletnek módosulnia kell, méghozzá nemlineárisan, ha a hullámfüggvény kiterjedése az atomi méreteket jelentősen túllépi. Javasolta, hogy az elektron  $\Psi(\mathbf{r})$  hullámfüggvényének Schrödinger-egyenletében szerepeljen egy  $\Psi$ -függő potenciál:

$$V_{\Psi}(\mathbf{r}) = \int f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) |\Psi(\mathbf{r}')|^2 d^3r', \quad (1)$$

ahol az  $f$  függvény legyen monoton növekvő. E potenciál hatására a hullámcsomag részei egymást vonzani fogják (önvonzás). Ez valóban korlátozza, hogy  $\Psi(\mathbf{r})$  idővel mennyire terjedhet ki. Ma már tudjuk, hogy ilyen korlátozás sem elektronra sem más elemi részre nincs. A kvantumelmélet megállíthatatlanul érvényes az atomi világban. Mindmáig, legalábbis, egyetlen mérés sem kérdőjelezte meg a lineáris Schrödinger-egyenletet.

Történt viszont a kvantumelmélet első fél évszázada után, hogy tapasztalati készítés nélkül is felmerült a kozmológiai kiterjesztés. Ehhez a kvantálást a gravitációra, tehát az einsteini görbült téridőre is alkalmazni kellett volna. A kvantumgravitáció konzisztens egyenleteit még ma sem ismerjük. De ne szaladjunk ennyire előre! Még 1962–63-ban született egy félmegoldás [2]. A félklasszikus gravitációelméletben a teret görbítő anyag

kvantált, de a téridő nem, az marad klasszikus. A téridő klasszikus Einstein-egyenletének jobb oldala így módosul:

$$G_{ab} = \frac{8\pi G}{c^4} \langle \Psi | \hat{T}_{ab} | \Psi \rangle. \quad (2)$$

A bal oldalon  $G_{ab}$  továbbra is a klasszikus téridő görbületi tenzora, a jobb oldalon viszont az univerzumban levő kvantált anyag  $\hat{T}_{ab}$  energia–impulzus-tenzoroperátorának a  $\Psi$  kvantumállapotban vett várható értéke áll.  $G$  a newtoni gravitációs állandó, és  $c$  a fénysebesség. A (2) félklasszikus Einstein-egyenletben a téridőt a kvantált anyag energia–impulzus-tenzorának az átlaga görbíti. Ezen az egyenleten alapul az ősrobbanásból eredeztetett mai kozmológiai modellünk. Márpedig ez az egyenlet nemlineáris módosítja a kvantummechanikát: a kvantált anyag  $\Psi$  hullámfüggvénye nemlineáris Schrödinger-egyenletet fog követni. Könnyebb ezt a newtoni határesetben látni.

A newtoni határesetben a (2) félklasszikus Einstein-egyenletnek csak a 00 komponense releváns. A következő közelítéseket használhatjuk, ha a  $c$  fénysebességben a vezető tagokra szorítkozunk:

$$G_{00} = -\frac{2}{c^2} \Delta \Phi, \quad (3)$$

$$\hat{T}_{00} = \hat{\rho} c^2. \quad (4)$$

Itt  $\Delta$  a Laplace-féle differenciáloperátor,  $\Phi$  a Newton-potenciál,  $\hat{\rho}$  a nemrelativisztikusnak feltételezett kvantált anyag térbeli tömegsűrűség-operátora. Beírva a fenti két kifejezést a (2) egyenletbe a fénysebesség kiesik, és megkapjuk a newtoni határesetet:

$$\Delta \Phi(\mathbf{r}, t) = -4\pi G \langle \Psi(t) | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Psi(t) \rangle. \quad (5)$$

Ezúttal csak az egytest-esetet követjük. Ha  $m$  a tömeg, és  $\Psi(\mathbf{r})$  a hullámfüggvény, akkor

$$\Delta \Phi(\mathbf{r}, t) = -4\pi G m |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (6)$$

Az ilyen (Poisson-) egyenletnek a megoldása ismert:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{-Gm}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 d^3r'. \quad (7)$$

ami az alábbi önvonzó potenciált jelenti:

$$V_{\Psi}(\mathbf{r}) = \int \frac{-Gm^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\Psi(\mathbf{r}')|^2 d^3r'. \quad (8)$$

Írjuk ezt be a szabad mozgás Schrödinger-egyenletébe:

$$i\hbar \frac{d\Psi(\mathbf{r})}{dt} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}) + V_{\Psi}(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}). \quad (9)$$

Ezt nevezzük Schrödinger–Newton-egyenletnek [3]. Meglephetődhünk: a  $V_{\Psi}$  potenciál szerkezete azonos az 1952-ben javasolt (1) egyenletével, ezúttal a monoton  $f$  függvény is egyértelműen adott.

Lehetséges volna, hogy Jánosynak igaza volt? Az elektronra és bármely atomi skálájú testre semmiképp;

<sup>1</sup> A kvantumelméletben a „klasszikus” szó jelentése „nem kvantált”, elterően a relativitáselméletől, ahol „nemrelativisztikus” az értelme.

kis tömegük miatt a  $V_\Psi$  potenciáljuk elhanyagolható. Mutassuk meg ezt! Ha feltesszük, hogy  $\Psi(\mathbf{r})$  egy  $a$  jellemző szélességű sima hullámcsomag, akkor megvizsgálható, hogyan skálázódik a lineáris kinetikusenergia-tag és a nemlineáris gravitációs tag egymáshoz képest. Becsüljük meg az  $E_{\text{kin}}$  kinetikus és az  $E_{\text{grav}}$  gravitációs önvonzási potenciális energia dimenzióit:

$$E_{\text{kin}} \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad (10)$$

$$E_{\text{grav}} \sim -\frac{Gm^2}{a}. \quad (11)$$

Eszerint keskeny hullámcsomagra a kinetikus tag dominál, szélesedő hullámcsomagra viszont figyelembe kell venni az önvonzást is. Az  $a$  szélesség, ahol a két mechanizmus összemérhető, így becsülhető:

$$a_0 \sim \frac{\hbar^2}{Gm^3}. \quad (12)$$

Ez  $m \sim 10^{-26}$  g tömegnél (kb. tízezer elektrontömegnél) jelent a világegyetem méretével megegyező hullámcsomag-szélességet. Megállapíthatjuk tehát, hogy az elemi részecskék és a belőlük alkotott mikroszkopikus rendszerek kinetikus energiája mindig sok nagyságrenddel nagyobb az önvonzásnál. A (2) félklasszikus gravitációelmélet nem módosítja a mikrovilág kvantum törvényeit. Jó is, hogy ezt kaptuk, hiszen a lineáris Schrödinger-egyenlet nagy pontossággal igazolt a mikrovilág fizikájában. A Schrödinger–Newton-egyenlet története viszont nem ér itt véget.

## Mezoszkopikus tömegek

Amennyire irreleváns a mikrovilágban a gravitációs önvonzás, annyira dominánssá válik a mezoszkópiában. Ha a tömeg egy femtogramm nagyságrendű, azaz  $m \sim 10^{-12}$  g, akkor az  $E_{\text{grav}}$  gravitációs energia már akkor dominánssá válik az  $E_{\text{kin}}$  energia fölött, amennyiben a hullámfüggvény  $a$  szélessége eléri a femtométeres nagyságrendet. Itt egy apró technikai problémával is szembesülünk. A femtogrammos tömeg már nem tekinthető pontszerűnek a gravitációs önvonzásban. A (6)–(8) egyenletek pontszerű testre vonatkoztak, most viszont figyelembe kell vennünk a test saját tömegeloszlását a saját térfogatán belül. A legegyszerűbb, ha a test egy szilárd homogén  $R$  sugarú gömb. Mezoszkopikus tömegnél már akkor is dominál a gravitációs önvonzás, ha a hullámfüggvény  $a$  kiterjedése még nagyságrendekkel kisebb az  $R$  méretnél. Ebben az  $a \ll R$  tartományban a  $V_\Psi$  potenciál (8) alakját az alábbi effektív potenciál veszi át:

$$V_\Psi(\mathbf{r}) = -\frac{6Gm^2}{5R} + \frac{Gm^2}{2R^3}(\mathbf{r} - \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle)^2, \quad (13)$$

ahol

$$\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = \int \mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r \quad (14)$$

a helyoperátor várható értéke. A  $V_\Psi$  konstans tagja elhagyható, így harmonikus oszcillátort idéző potenciált kaptunk, a Schrödinger–Newton-egyenletbe már olyan jelölésekkel írjuk be:

$$i\hbar \frac{d\Psi(\mathbf{r})}{dt} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} m \omega_N^2 (\mathbf{r} - \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle)^2 \right) \Psi(\mathbf{r}). \quad (15)$$

Itt

$$\omega_N = \sqrt{Gm/R^3} = \sqrt{(4\pi/3)G\rho},$$

ezt nevezhetjük Newton-frekvenciának. (Ilyen frekvenciával oszcillál egy kis próbatest, ha a homogén gömbbe fúrt szűk átlós csatornába helyezzük, értéke csak a gömb  $\rho$  sűrűségétől függ.) Olyan harmonikus oszcillátort kaptunk, aminek a rezgési centruma a hely  $\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle$  várható értéke. Ez azt jelenti, hogy a stacionárius megoldások leolvashatók a harmonikus oszcillátor jól ismert stacionárius állapotaiból. Nézzük mindjárt az alapállapotot:

$$\Psi_0(\mathbf{r} | \bar{\mathbf{r}}) = \left( \frac{m\omega_N}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left( -\frac{m\omega_N}{2\hbar} (\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}})^2 \right). \quad (16)$$

Ez egy statikus lokalizált hullámcsomag – szoliton –, aminek az  $\bar{\mathbf{r}}$  középpontja bárhol lehet. Egy  $\exp(i\mathbf{m}\mathbf{v}\mathbf{r}/\hbar)$  szorzóval az állandó  $\mathbf{v}$  sebességgel mozgó szolitonokat leíró megoldásokat kapjuk.

A (16) szolitonok szélességnégyzete pedig

$$a_0^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_N} = \frac{\hbar}{2m\sqrt{(4\pi/3)G\rho}}. \quad (17)$$

Ha  $m = 1$  ng és  $\rho \sim 1$  g/cm<sup>3</sup> sűrűséggel számolunk, akkor  $a_0 \sim 1$  nm szélességet kapunk. Ez sokkal kisebb, mint a test  $R \sim 10$   $\mu$ m jellemző mérete, így a (13) közelítés feltétele teljesül.

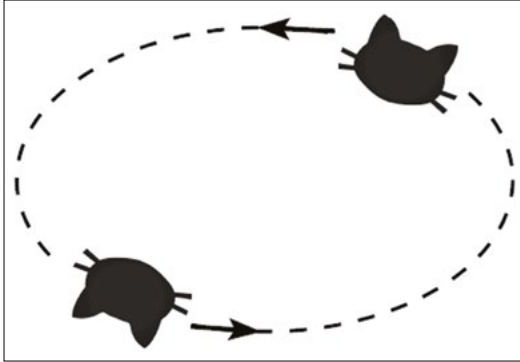
Tehát a mikrovilágot elhagyva már a mezoszkopikus testek tömege is elég erős önvonzást ad, hogy létezzen stacioner lokalizált állapotuk. Ez méginkább így van, ha továbblépünk a makrotömegek felé. Örülünk ennek, mert a makrovilágban valóban minden testnek meghatározott pozíciója van. Pedig a kvantumelmélet szerint ha lassan is, de a hullámfüggvényüknek szét kellene folyniuk, hasonlóan a mikrorészecskék hullámfüggvényéhez.<sup>2</sup>

Sajnos a Schrödinger–Newton-egyenlet nem ad eleendő magyarázatot az izolált mezo- és makrotömegek meghatározott pozíciójára. A stacioner megoldások ugyanis lehetnek gerjesztett szolitonok is, egyre nagyobb  $a$  kiterjedéssel. Ez még talán belefér a makroszkopikus képünkbe. De van, ami kevésbé, és ezek a két- és többszoliton-megoldások. Egy kétszoliton-megoldás lehet például ilyen:

$$\frac{\Psi_0(\mathbf{r} | \bar{\mathbf{r}}_1) + \Psi_0(\mathbf{r} | \bar{\mathbf{r}}_2)}{\sqrt{2}}. \quad (18)$$

<sup>2</sup> Ennek észlelését a makrotömegekre elkerülhetetlen környezeti zavaró hatások – az úgynevezett dekoherencia – lehetetlenné teszik, de mezo- vagy nanotömegek egyre tökéletesebb laboratóriumi izolációjával a jövőben vizsgálhatóvá is válhat.

Ez két álló szoliton szuperpozíciója, és a kettejük közti  $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$  távolság akár a test  $R$  méreténél is sokkal nagyobb lehet. Ez jó közelítéssel stacioner állapot lenne. Azért csak lenne, mert az önvonzás nemcsak a két szolitonon belül hat, hanem a két szoliton között is, a klasszikus gravitációs erő egymás felé kezdi gyorsítani őket. Még élesítve a paradoxont, a két szolitonnak kicsi, ellentétes kezdősebességeket is adhatunk. Ekkor az egy szem  $m$  tömeg két távoli része  $m/2$  tömegekként egymás körül kering majd egy kepleri ellipszisen. El nem kerülhető [4], hogy Karinthyt idézzük, aki humoreszkje végén ezt veti oda 1911-ben [5]: „Továbbá azt álmodtam, hogy két macska voltam és játszottam egymással”.



## Schrödinger macskái és kizárásuk

Mint láttuk, a félklasszikus gravitációban a nagy tömegnek létezik lokalizált stacioner (szoliton) hullámfüggvényük, ami nem folyik szét. De nem tiltottak a makroszkopikus szuperpozíciók sem. Schrödinger egy macska élő és holt állapotának szuperpozíciójával tréfálkozott. Ez lenne a hullámfüggvény és annak kollapszusa:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r} | \text{macska}) &= \frac{\Psi(\mathbf{r} | \text{élő}) + \Psi(\mathbf{r} | \text{holt})}{\sqrt{2}} \\ &\Rightarrow \begin{cases} \Psi(\mathbf{r} | \text{élő}) \\ \Psi(\mathbf{r} | \text{holt}) \end{cases}, \end{aligned} \quad (19)$$

ahol az  $\mathbf{r}$  vektor a macska és a pokolgép koordinátáit jelöli. A második sor a véletlenszerű kollapszust jelöli az élő vagy a holt állapotra, ami a tankönyvi kvantumelmélet szerint csak akkor következik be, ha a makroszkopikus szuperpozíciót külső eszközzel észleljük. Ez a bonyolult elrendezés nyilván kezelhetetlen a fizika szokásos analitikus eszközeivel. A lényege a makroszkopikus szuperpozíció, ezért minden más körülményt most elhagyva a (18) állapotot hívjuk (Schrödinger-) macska-állapotnak, ahol az  $m$  tömeg legalább mezoszkopikusan nagy:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r} | \text{macska}) &= \frac{\Psi_0(\mathbf{r} | \vec{r}_1) + \Psi_0(\mathbf{r} | \vec{r}_2)}{\sqrt{2}} \\ &\Rightarrow \begin{cases} \Psi_0(\mathbf{r} | \vec{r}_1) \\ \Psi_0(\mathbf{r} | \vec{r}_2) \end{cases}. \end{aligned} \quad (20)$$

Feltüntettük az állapot kollapszusát is. A tankönyvi kvantumelmélet szerint a kollapszus attól jön létre, ha méréssel eldöntjük, hogy a tömeg  $\vec{r}_1$  vagy  $\vec{r}_2$  körül van-e. Elhisszük ezt egy kockacukorról? A környezeti zavaró, például hőmérsékleti hatásoktól sosem tudnánk a gyakorlatban annyira elszigetelni, hogy a fenti makroszkopikus szuperpozícióba hozzuk, de az elmélet ezt nem zárja ki.

Szabadítsuk-e meg a elméletet a makroszkopikus szuperpozícióktól, a paradoxonoktól, amit a Schrödinger-macskák jelentenek? Sem kísérleti tapasztalat, sem elméleti következtetés nem kényszerít erre. De megtehetjük egy kézenfekvő lépéssel – megintcsak óvatosan módosítva a tankönyvi kvantumelméletet az atomi világnál nagyobb tömegskálákon.

A spontán kollapszus feltevése szerint a makroszkopikus szuperpozíciók maguktól is összeomlanak, ugyanúgy, mintha egy mérés hatására tennék. A konkrét modellt úgy kell megválasztani, hogy a mikrovilágban a szuperpozíciók  $\tau$  jellemző élettartama gyakorlatilag végtelen legyen, a mezoszkopikus világban – ahol kvantumtapasztalataink nem is voltak – lehet már érzékelhetően véges, a makrovilágban pedig olyan rövid legyen, hogy makroszkopikus változóban ne is jöhessen létre szuperpozíció az azonnali spontán kollapszus miatt. Lásuk a konstrukciót legalább a (18) típusú makroszkopikus szuperpozíciókra! Vegyük észre, hogy a gravitációs önvonzás potenciális energiája a kezdeti szuperpozícióban nagyobb (jelölése  $E_i^G$ ), mint a kollapszus utáni lokalizált állapotok bármelyikében (jelölése  $E_f^G$ ). Legyen a  $\Delta E^G = E_i^G - E_f^G$  energianyereség az, ami a spontán kollapszust „hajtja”. A szuperpozíció átlagos élettartamát ezért így definiáljuk:

$$\tau_{\text{DP}} = \frac{\hbar}{\Delta E^G}. \quad (21)$$

Ezt a posztulátumot tíz év különbséggel egymástól függetlenül javasolta a jelen szerző [4, 6] és Roger Penrose [7], függetlenül látszó de rokonítható indoklással [8]. Nézzük, mekkora lesz a (18) szuperpozíció élettartama! Kezdjük a kollapszus utáni állapot gravitációs energiájával! A  $\Psi_0(\vec{r} | \mathbf{r}_1)$  (vagy  $\Psi_0(\mathbf{r} | \vec{r}_2)$ ) szoliton állapotban az  $R$  sugarú homogén gömb önvonzási potenciális energiája  $E_f^G = 6Gm^2/5R$ . A kétszoliton-szuperpozícióban pedig  $E_i^G = 2 \cdot 6G(m/2)^2/5R$ . Tehát a kollapszus energianyeresége  $\Delta E^G = 3Gm^2/5R$ . A kollapszus átlagosan

$$\tau_{\text{DP}} = \frac{5\hbar R}{3Gm^2} \quad (22)$$

idő alatt bekövetkezik. Ez például  $m = 1$  mg esetén a miliszekundumos skálán lesz. Az 1 gramm kockacukorra pedig femtoszekundumos skálát kapunk, a szuperpozíció összeomlik, mielőtt létrejönne. Schrödinger macskája sem tud kettéválni előre és holtra, két fél macska sem fog Kepler-pályán keringeni egymás körül a spontán kollapszus DP-modelljében [6, 7].

## Záró gondolatok

Vonzó lenne, és nincs is kizárva, hogy a kvarkoktól a galaxisokig univerzális fizikai elmélet a kvantumelmélet, és a régi klasszikus (nem kvantált) törvények leszármaztathatók belőle megfelelő határesetekben. A feltételes fogalmazás nem véletlen. A kvantumelmélet nagyszerű egyenleteket származtat a mikrovilág jelenségeire, és ami a fő, a mikrovilág valóban ezeket az egyenleteket látszik követni. Nem úgy a kozmológiában, ahol elmélet és kísérlet nem járhatott kéz a kézben. Egyfelől a gravitáció, tehát a téridő einsteini általános relativitáselméletének kvantált egyenleteit, a kvantumgravitációt máig nem sikerült megalkotni. Másfelől nem ismerünk olyan jelenségeket, amelyek egyértelműen a gravitáció (téridőszerkezet) kvantumosságával kapcsolatosak. Ezért a kvantumgravitáció elméletéhez nincsenek egyértelmű kísérleti kapaszkodóink.

Ebben a helyzetben felvethető, hogy a kvantumelmélet módosul, ha a mikrovilágból elindulunk a makrovilág felé. Nincs erre sem elméleti kényszer, sem kísérleti bizonyíték, pusztán egy jelzés, hogy a makrokozmosz és a kvantálás viszonya még nyitott, ismeretlen. Nem véletlen, hogy az itt felvillantott Schrödinger–Newton-egyenlet és a spontán kollapszus DP-modellje a tankönyvi kvantumelméletet gravitációs megfontolásokkal módosítják. Történeti érdekesség, hogy ezek a módosítások a mezoszkopikus tömegek világában jósolnak új effektusokat, miközben a gravitációt és a kvantálást korábban csak az extrém nagyenergiás részecskefizika és az extrém görbült téridők terrénumain kapcsoltuk össze. Íme lehetséges, hogy ez a kapcsolat a mezoszkopikus világban tartogat tanulnivalót. Abban a

világban, ahol évtizedekig sem a kvantum, sem a gravitációs viselkedés fundamentumait nem vizsgáltuk. Végül az 1990-es években jött el ennek az ideje. A mezotömegek kvantumviselkedésének laboratóriumi kutatását nem utolsósorban a Schrödinger-egyenlet newtoni gravitációs módosításai inspirálták, és teszik ezt máig [9]. Geszti írta 2008-ban: „lessük a kísérleteket a senkiföldje-tömegek világából, addig is gyártjuk az elméleteket” [10]. Így lesz még jó ideig.

## Irodalom

1. L. Jánossy: The physical aspects of the wave-particle problem. *Acta Phys. Acad. Sci. Hung.*, 1 (1952) 423.
2. Ch. Møller: Les théories relativistes de la gravitation. *Colloq. Intern. CNRS* 91 (1962) 353.; L. Rosenfeld: On quantization of fields. *Nucl. Phys.*, 40 (1963) 1.
3. L. Diósi: Gravitation and quantummechanical localization of macro-objects. *Phys. Lett.*, A 105 (1984) 199.
4. L. Diósi: A quantum-stochastic gravitation model and the reduction of the wavefunction. PhD thesis, Budapest, 1986. [in Hungarian].
5. Karinty F.: Ötőrai záróra. In: Viccelnek velem. Képzőművészeti Társulat, Budapest, 1911.
6. L. Diósi: Models for universal reduction of macroscopic quantum fluctuations. *Phys. Rev. A* 40 (1989) 1165.
7. R. Penrose: On gravity's role in quantum state reduction. *Gen. Rel. Grav.*, 28 (1996) 581.
8. L. Diósi: On the conjectured gravity-related collapse rate  $\Delta E/\hbar$  of massive quantum superpositions. *AVS Quant. Sci.*, 4 (2022) 015605.
9. S. Bose, I. Fuentes, A. A. Geraci, S. M. Khan, S. Qvarfort, M. Rademacher, M. Rashid, M. Toroš, H. Ulbricht, C. C. Wanjura: Massive quantum systems as interfaces of quantum mechanics and gravity. *Rev. Mod. Phys.*, 97 (2025) 015003.
10. Geszti T.: Kvantum és klasszikus határán. *Fiz. Szemle*, 2008/6, 209.

# A VILÁGEGYETEM KVANTUMGEOMETRIÁJA A GRAVITÁCIÓ RÁCSTÉRELMÉLETÉVEL

Németh Dániel<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Radboud University, High Energy Physics, Nijmegen, Hollandia

<sup>2</sup>Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

E-mail: daniel.nemeth@ru.nl

*A kauzális dinamikus háromszögelés (CDT) módszerével egy egész kvantumuniverzumot lehet létrehozni a számítógépünkön, melynek formája és viselkedése megegyezik a világegyeterről alkotott képünkkel. Monte Carlo-szimulációk segítségével vizsgálható a különböző kvantumterek téridőre gyakorolt hatása és a kozmosz fluktuáló kvantumgeometriája is.*

## 1. Lord Kelvintől a kvantumgravitációig

„A dinamikai elmélet szépségét és tisztaságát, amely szerint a hő és a fény a mozgás egy-egy formája, jelenleg

két felhő árnyékolja be. Az első azzal az elmélettel együtt merült fel, amely a fényt hullámmozgásként írja le, és amelyet Fresnel és Thomas Young vizsgált. Ez a kérdés így szólt: hogyan mozoghat a Föld egy rugalmas szilárd közegen, amely lényegében a fényáteresztő éter? A második a Maxwell–Boltzmann-féle energiaeoszlási elv.” – Lord Kelvin

A „felhők” árnyékaira adott megoldások jelentősen megváltoztatták a világról alkotott képünket. Kiderült, hogy az éter nem létezik, helyette viszont a tér és az idő egy egységet alkot, melyet minden energiával rendelke-

ző test képes meggörbíteni. Ennek a matematikai megfogalmazása vezetett a legnagyobb testek fizikájához, az *általános relativitáselmélet*hez. Nagy skálán az egész világegyetem tágulni látszik, és a látható anyag csak egy apró szelete a teljes egésznek, melyet nagyrészt a *sötét anyag* és *energia* tesz ki. A második probléma megoldása pedig elvezetett minket a legkisebb részecskék világába, ahol a fizika fundamentálisan mérhetetlenné vált, hisz már nem lehet azt kérdezni, hogy milyen gyors és hol van, mert csak az egyikre kaphatunk pontos választ. Egyesek azt mondják, hogy a *kvantummechanikát*, mely alatt a legkisebb testek fizikáját értjük, megérteni nem, csak megszokni lehet.

### 1.1. A kvantumgravitáció szerepe

Az általános relativitáselmélet és a kvantummechanika ötvözéséből kapjuk meg a *kvantumgravitációt*. Az elmúlt évtizedek során több rendkívül érzékeny műszert sikerült építenünk, melyek a legkisebb és legnagyobb távolságokat, energiákat pásztázzák, és több olyan fizikai jelenség is létezik, amelyekre a kvantumgravitáció elmélete talán választ adhat. Mi történik a gravitációs hatásokkal, miközben az elektron a kétrés-kísérletben egyszerre megy át a két résen? Milyen módon formálta az Univerzum anyageloszlását a kvantumgravitáció az első pillanatokban? Egyáltalán, mi az az Univerzum, volt-e eleje, vagy van-e még belőle több, más fizikai törvényekkel? Elvész-e a fekete lyukakban az információ vagy sem? Lehetséges, hogy a sötét anyag és energia csak kvantumgravitációs hatás? Ezen kérdésekre a gravitáció kvantumelméletének tudnia kell válaszolni.

Több elmélet megjelent az elmúlt évtizedekben, amelyek választ ígértek a felmerült kérdésekre. A leginkább ismert ezek közül a *húrelmélet* (string theory), melynek ugyan sok matematikai áttörést köszönhetünk, viszont nem képes leírni egy olyan világot, amely hasonlít a miénkre. Az ismertebbek között van még a *hurok-kvantumgravitáció* (loop quantum gravity), mely bonyolult kvantumtérelméleti módszerekkel írja le a gravitációt mint kvantumozott mezőt, és képes bizonyos mennyiségeket kiszámítani, állításokat tenni annak természetéről. Egyik ilyen előrejelzése például a fény sebességének frekvenciától való függése, amelynek viszont a nagyenergiás asztrofizikai mérések ellentmondanak. Jelenleg nincs általánosan elfogadott elmélete a kvantumgravitációnak.



Németh Dániel BSc- és MSc-diplomáját az Eötvös Loránd Tudományegyetemen szerezte Budapesten. PhD-fokozatát a Jagiellonian University (Jagelló Egyetem) szerezte Krakóban a kauzális dinamikus háromszögelés témájában. Fő kutatási területe a kvantumgravitáció. A cikk írásának időpontjában a Radboud University posztdoktori kutatója.

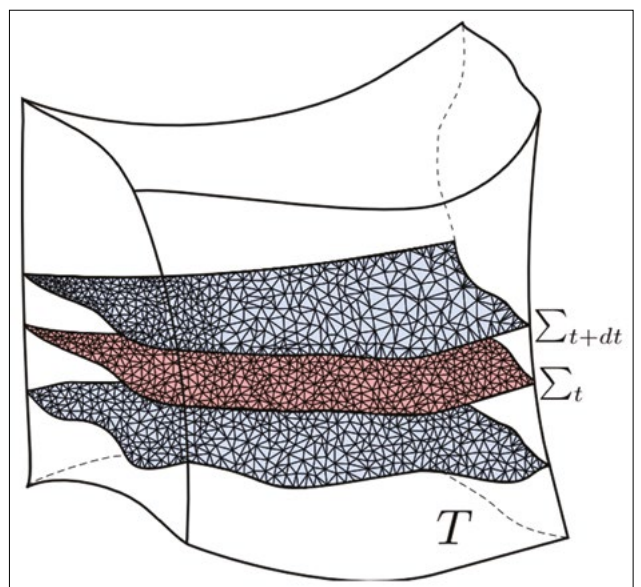
## 2. A kvantumgeometria megjelenése

A XX. század közepére a számítástechnikai eszközök fejlődése áttörést hozott számos fizikai és matematikai területen, és ebből a kvantumgravitáció sem maradt ki. Az elmúlt évtizedekben több új elmélet is született, amelyeket kifejezetten nagyméretű számítógépes szimulációk és algoritmusok tettek lehetővé. Ezek közé tartozik a jelen munka tárgyát képező *kauzális dinamikus háromszögelés (CDT)* is [1].

### 2.1. Mit értünk háromszögelés alatt?

A CDT matematikai alapját a *Regge-kalkulus* adja, amelyet *Tullio Regge* dolgozott ki [2]. Regge újragondolta az *általános relativitáselméletet*: a metrikus tenzor ( $g_{\mu\nu}$ ) helyett szabályos háromszögekből felépített diszkrét sokasággal közelítette a görbült téridőt.

A háromszög  $n$  dimenziós általánosítását *szimplex-nek* nevezzük: ez két dimenzióban háromszög, három dimenzióban tetraéder, négy dimenzióban pedig *pentachoron*. Az ilyen szimplexek összeillesztésével közelíthetők a folytonos görbült terek. A Regge-kalkulusban a lapos, görbület nélküli egyenlő élhosszú szimplexek kicsi, sima téridőszeleteket képviselnek, így alakulhat ki görbület. A Regge-kalkulus matematikai módszerét felhasználva a folytonos integrálás diszkrét összegzéssel helyettesíthető, így például egy adott sokaság térfogata nem az összes ponton való integrálással érhető el, hanem az  $n$  dimenziós szimplexek összeszámolásával, amelyek lefedik a teret. A görbület, amely az általános relativitáselméletben a metrikus tenzor bonyolult függvénye, itt a szimplexek kapcsolódási struktúrájából következik. Mivel minden építőelem sima, lapos és egyenlő oldalú, a görbület kizárólag az építőelemek számosságából és illeszkedéséből fakad.



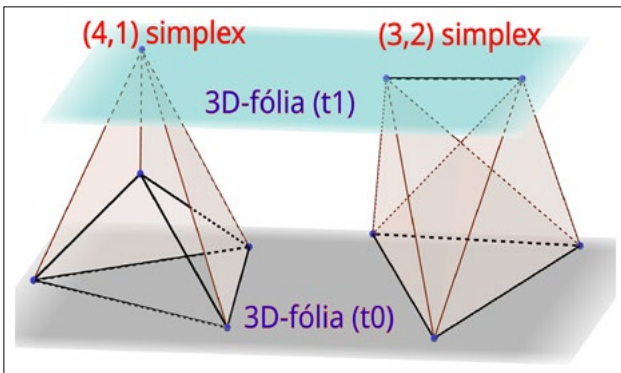
1. ábra. Háromszögelés és fóliázott téridő, amely lehetővé teszi görbült felületek időfejlődésének közelítését

A téridő szerkezetének diszkrét leírásában fontos szerepet játszik a *fóliázás*, azaz a téridő háromdimenziós térszerű szeletekre és egy időirányra történő bontása (ennek reprezentációja látható az 1. ábrán). Ez a megközelítés az *Arnold–Deser–Misner* (ADM) formalizmusból ered [3], amely jól illeszthető a CDT logikájába is.

## 2.2. Miért kauzális a CDT?

A speciális relativitáselmélet óta téridőnk *Lorentz-metrikával* írjuk le, ahol az idő és tér különböző előjellel járul hozzá a távolságfogalomhoz. Ezzel szemben az *euklideszi térben* minden koordináta térszerű, a távolságokhoz pozitív járulékot ad. A kettő közötti átjárást az úgynevezett *Wick-forgatás* biztosítja, amely során az időkoordinátát a képzetes egységgel megszorozzuk, így az is térszerűvé válik. Ez a módszer lehetővé teszi, hogy a bonyolult számításokat statisztikai fizikai eszközökkel egyszerűbben kezeljünk.

A CDT egyik kulcseleme a *kauzalitás* beépítése. A fóliázással és a Regge-kalkulussal diszkrét téridőt tudunk felépíteni, amely kauzalisan háromszögelhető: a téridő-szeletek (időszerű sorrendben egymás után következő háromdimenziós terek) között meghatározott kauzális kapcsolatok állnak fenn, melyet jól reprezentál az 1. ábra is. A térszerű kapcsolatot térszerű, a kauzális kapcsolatot pedig időszerű élekkel reprezentálhatjuk. Ekkor a CDT négydimenziós építőelemei olyan pentachoronok (2. ábra), amelyek csúcsai két szomszédos időréteghez tartoznak. Minden pentachoronnak öt csúcsa van, amelyek különböző felosztásban helyezkedhetnek el az idő-szeletek között. Ez azt jelenti például, hogy a  $\{4, 1\}$  típusú pentachoron négy csúcsa az alsó ( $t_0$ ), egy csúcsa pedig a felső ( $t_1$ ) időréteghez tartozik; az  $\{1, 4\}$  típus ennek tükrözése az időben. Mivel háromdimenziós térfogatot a tetraéderek fognak közre, a fizikai térfogat egy adott idő-szeleten a térszerű tetraéderek számával (illetve a  $\{4, 1\}$  pentachoronok számával) lesz egyenlő.



2. ábra. A kauzális háromszögelés négydimenziós építőelemei:  $\{4, 1\}$  (balra) és  $\{3, 2\}$  (jobbra) típusú pentachoronok. Ezek időbeli tükrözésével megkaphatók az  $\{1, 4\}$  és  $\{2, 3\}$  típusok

A görbületet a  $\delta$  deficitsszög segítségével definiáljuk, amelyet a szimplexek illesztési pontjai (2D-ben csú-

cok, 3D-ben élek, 4D-ben háromszögek) körül számolhatunk ki:

$$\delta = 2\pi - N_{\text{simplex}} \cdot \theta, \quad (1)$$

ahol  $\theta$  a szimplexek adott él körüli belső szöge (két dimenzióban például  $\theta = \pi/3$ ). Így ha két dimenzióban  $N_{\text{simplex}} = 6$ , akkor  $\delta = 0$ , ami sík felületnek felel meg. Euklideszi térben ettől eltérő számú háromszög illesztésekor a szögdeficit eltér a nullától, ami nem triviális görbületet jelez.

A háromszögelés alacsony dimenziókban kombinatorikai módszerekkel is kezelhető, de négy téridő-dimenzió esetén jellemzően számítógépes szimulációkra van szükség.

## 2.3. Na, de hol itt a kvantum?

A kvantumtérelmélet egyik forradalmi megközelítése *Richard Feynman* nevéhez fűződik, aki bevezette a *pályaintegrál* módszerét. Feynman szerint egy  $\Phi(x)$  kvantumtér fejlődése úgy írható le a legjobban, ha figyelembe vesszük az összes lehetséges fejlődés (téridőbeli állapot) Boltzman-faktorral súlyozott összegét, ahol a súlyt a leírandó rendszer klasszikus hatásának exponencializálásával kapjuk meg. A pályaintegrált klasszikusan  $\mathcal{Z}$ -vel jelöljük, és gravitáció esetén a kvantumtér a metrikus tenzor  $g(x)$ , melynek felírható a pályaintegrálja

$$\mathcal{Z} = \int D[g] e^{-S_{\text{EH}}[g]}, \quad (2)$$

ahol  $D[g]$  a mértékintegrál jele az összes lehetséges  $g$  metrikának a figyelembe vételével és az  $S_{\text{EH}}$  Einstein–Hilbert hatással mint Boltzmann faktorról súlyozva:

$$S_{\text{EH}} = \frac{1}{\Gamma} \int d^4x \sqrt{g} (R - 2\Lambda), \quad (3)$$

ahol  $\Gamma$  a Newton-féle gravitációs állandó,  $R$  a Ricci-skalár és  $\Lambda$  a kozmológiai állandó. Eszerint a téridő kvantumtérelméleti leírását úgy kapjuk meg, ha figyelembe vesszük a téridő összes lehetséges gemoetriai realizációját.

Annak ellenére, hogy az  $S$  hatásintegrál klasszikus mennyiség, a pályaintegrállal való számolás kvantumossá változtatja a számításokat. Ezen felül a pályaintegrál segítségével könnyedén elérhetővé válnak dinamikus rendszerek mozgásegyenletei is, mely által megkapható egy adott modell dinamikai leírása. A gravitáció Regge-háromszögeléssel diszkrétizált pályaintegrálja a következő:

$$\sum_T \frac{1}{C_T} e^{-S_{\text{Regge}}[T]}, \quad (4)$$

ahol a folytonos mértékintegrál ( $D[g]$ ) helyére különböző háromszögelésekre való  $C_T$ -vel súlyozott összegzés kerül, mely a  $T$  háromszögelések szimmetriacsoportjának méretével azonosítható. A diszkrétizált háromszögelt hatást általánosan  $S_{\text{Regge}}$ -nek, míg a CDT hatását  $S_{\text{CDT}}$ -nek jelöljük.

Egy adott  $N_0$  darab csúcspontból és  $N_{41} + N_{32}$  darab szimplexből álló háromszögelés esetén  $S_{\text{CDT}}$  a CDT-hatás a következőképpen írható fel:

$$S_{\text{CDT}} = -(\kappa_0 + 6\Delta)N_0 + \kappa_4(N_{41} + N_{32}) + \Delta N_{41}. \quad (5)$$

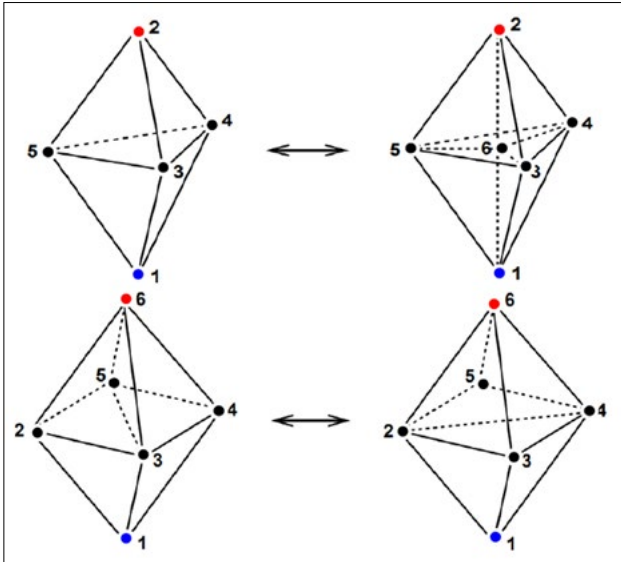
Itt  $\kappa_0$  a nem renormalizált (vagy „csupasz”) newtoni csatolási állandó,  $\kappa_4$  a csupasz kozmológiai állandó, míg  $\Delta$  az aszimmetriaparaméter, amely a tér- és időszerű élek hosszának arányát méri. A  $\Delta = 0$  eset az idő- és térirányok szimmetrikus kezelését jelentené.

A CDT modellje két dimenzióban analitikusan is kezelhető, magasabb téridő-dimenziókban azonban csak számítógépes szimulációk segítségével nyerhetők konkrét eredmények.

#### 2.4. Miért dinamikus a CDT?

A Monte Carlo-szimulációk alapjait a múlt század közepén dolgozták ki a *Rosenbluth* és *Teller* házaspárok *Nicholas Metropolis* vezetésével. Ezek célja, hogy egy fizikai rendszer egyensúlyi állapotát vizsgálják, és statisztikai mintavétellel információt nyerjenek annak viselkedéséről. A módszer lényege, hogy a rendszert sorozatos lépésekkel kissé megváltoztatva új konfigurációkhoz jutunk, amelyek egy adott eloszlás (jelen esetben az  $\exp\{-S_{\text{CDT}}\}$  Boltzmann-súly) szerint érvényesülnek.

A CDT esetében a dinamika azt jelenti, hogy a háromszögelés maga, azaz a téridő diszkrét szerkezete változik az iterációk során. A lépések a háromszögelés lokális módosításait jelentik, erről példát a 3. ábra szemléltet három dimenzióban.



3. ábra. Monte Carlo-lépések fóliázással három dimenzióban. Piros pötty jelöli a tetraéderek  $t + 1$ , kék a  $t - 1$  és fekete a  $t$  síkon lévő pontjait

A CDT esetén az állapot egy adott számú szimplex egy adott szomszédsági relációval, és egy lépés ezt megváltoztatja, mely lehet egy átló behúzása vagy egy vertex hozzáadása vagy elvétele a rendszerből. A cél az, hogy

a hatás mint Boltzmann-súly segítségével a geometriai lépéseket ismételve az állapotösszeg lehetséges geometriáiról gyűjtsünk elegendően nagy statisztikát. Ha ez megvan, akkor ezzel különböző megfigyelhető mennyiségek, mint például az időseleitek térfogatát vagy egy- illetve kétpont-korrelációs mennyiségek várható értékét lehet számolni.

### 3. A CDT eredményei

A kvantumtérelméletek diszkrét téridőn való numerikus vizsgálatát *Kenneth G. Wilson* vezette be 1974-ben [4], megalapozva a *rácstérelméletet*, amely különösen az erős kölcsönhatás, azaz a kvantum-színdinamika (QCD) esetében vált sikeressé. Az ilyen számítások jellemzően hatalmas számítógépes rendszereket igényelnek, és eredményeik kísérleti ellenőrzése csak nagyenergiás laboratóriumokban, például a CERN-ben lehetséges (ilyen eredmény a proton és neutron tömegkülönbsége [5]).

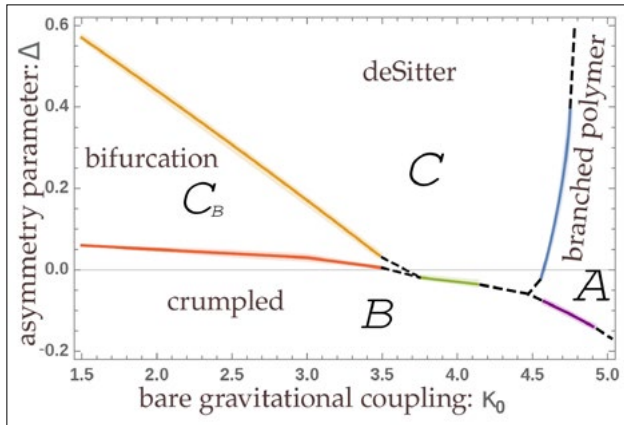
Ebben a kontextusban a kauzális dinamikus háromszögelés (CDT) nem egy alternatív kvantumgravitációs elmélet, hanem az általános relativitás statisztikus, kvantumszinten diszkrétizált megközelítése. A *tiszta CDT* modell nem tartalmaz extra paramétereket az általános relativitáson túl, de lehetőséget nyújt alternatív elméletek vagy anyagmezők, például mértékmezők, fermionok vagy skalármezők téridővel való kölcsönhatásának vizsgálatára is.

A numerikus szimulációk során a kezdeti rácsstruktúra, mint például a topológia (gömb, tórusz vagy egyéb egzotikus peremfeltétel) és a szimplexek dimenziója, nem határozza meg egyértelműen a létrejövő kvantumgeometria *effektív dimenzióját* vagy *topológiáját*. Ezt jól szemlélteti az alábbi példa: képzeljünk el egy halom  $[1 \times 1 \times 1]$  méretű legőelemet. Bár minden blokk háromdimenziós, ha ezeket ezer rétegben egymásra helyezzük, az így létrejövő struktúra  $[1 \times 1 \times 1000]$  alakú lesz, amely viselkedésében inkább egy egydimenziós rendszerhez hasonlít. Ennek megfelelően effektív dimenziója  $d_{\text{eff}} = 1$ .

#### 3.1. A világegyetem geometriái

A geometriák, melyeket a szimplexek összeragasztásából kaphatunk, jelentősen különbözhetnek egymástól, egyesek fraktálszerűek, mások pedig lehetnek akár egész egyszerűek, és tulajdonságaikat a modell  $\kappa_0$ ,  $\kappa_4$ ,  $\Delta$  csatolási paraméterei határozzák meg. A Monte Carlo-szimulációk során ezek lesznek a bemeneti paraméterek, ezek határozzák meg a modell fázisát, hasonlóan ahhoz, ahogy a víz különböző halmazállapotait a hőmérséklet és a nyomás. A CDT-fázisdiagram (4. ábra) négy elkülönülő geometriát tartalmazó régióra oszlik.

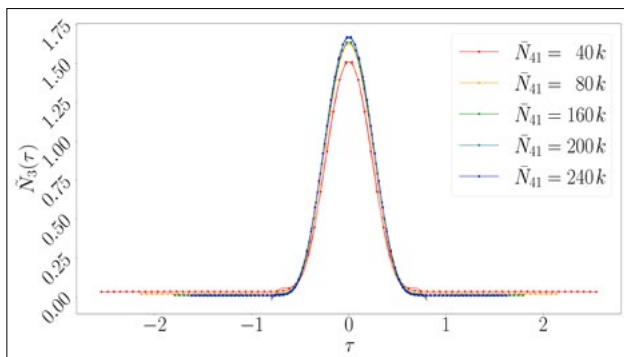
A szimuláció célja, hogy azonosítsa egy fizikailag releváns fázist, amelyben a kvantumtéridő viselkedése megfelel a megfigyelhető univerzumunknak. A CDT modell esetében ez a *C* avagy de Sitter-fázis lesz.



4. ábra. A CDT modell fázisdiagramja: A (fa gráfok), B (szingularitás),  $C_B$  (dimenzióredukált) és C (fizikailag releváns de Sitter-fázis)

### 3.2. Az Univerzum alakja

A CDT egyik legfontosabb eredménye, hogy a C fázis téridő-geometriája jól közelíti a klasszikus de Sitter-világegyetemet, a mi univerzumunk nagyskálás geometriáját.



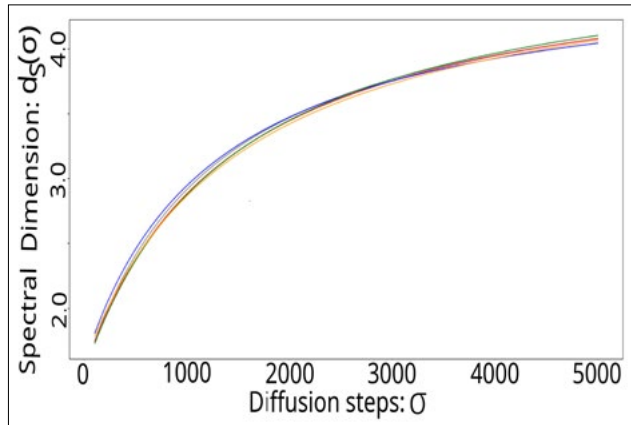
5. ábra. A szimulált kvantumgeometria-rendszermérettel normalizált, egymásra skálázott térfogat-idő profilja jól illeszkedik a négydimenziós táguló de Sitter-világegyetemhez

Az időszeletek  $N(t)$  térfogatát a rajtuk található pentachoronok (és egyben tetraéderek) számának várható értékével azonosítjuk, hiszen a fizikai térfogat csak a  $\{4, 1\}$  típusú pentachoronok  $t$ -szeleten lévő tetraédereiből ered (mely pontosan megegyezik az  $\{1, 4\}$ -ek számával).

A szimulált térfogat-idő profilok skálázása után (5. ábra) ezek jól illeszkednek *Hartle és Hawking minisuperspace modelljéhez* [6], amely a téridő egyetlen változóra, a sugárra redukált alakját írja le. Az eredmények alapján a szimulált kvantumtéridő térfogata, görbülete és tágulása mind megerősítik, hogy a kialakuló univerzum négydimenziós, és a klasszikus kozmológiai modellekhez hasonló viselkedést mutat.

### 3.3. Effektív fraktáldimenzió

Egy diffúziós folyamattal (pl. véletlen bolyongás) mérhetjük egy adott tér effektív dimenzióját, amely a CDT minden fázisában más eredményt ad. Egy vélet-



6. ábra. A spektrális dimenzió ( $d_s$ ) futása a diffúziós lépések ( $\sigma$ ) függvényében a de Sitter fázisban. A különböző színű egymásra skálázott görbék különböző  $\kappa_0$  és  $\Delta$  értékeknek felelnek meg

len bolyongás kezdőpontba való visszatérésének valószínűségéből levezethetjük az úgynevezett  $d_s$  *spektrális dimenziót*, amely nagy távolságokon a téridő dimenziójához tart, míg kis távolságokon képes a geometria fraktálszerűségét megmutatni (6. ábra).

A de Sitter-fázisban ez nagy távolságokon  $d_s = 4$ , míg kis távolságok esetén  $d_s = 1,5-2$  között változik. Ez a megfigyelés eltér attól, ahogy egy lapos-klasszikus téridő viselkedik, ami azt is jelenti, hogy nagy energiákra, illetve a korai Univerzum fizikájára ez a jóslat hatással lehet, ez által tesztelhető a CDT módszer.

A keletkezett téridő fraktálszerű szerkezete miatt a távolságok megmérése és a szomszédsági reláció közeli pontok között nem egyértelmű. Lehetnek pontok a téridőben, amelyek közeliek a rácson, de a rács nem valószínűségi, a fizikát ki kell abból hámozni, amit egy *mező* bevezetésével is elérhetünk.

### 3.4. A CDT kozmikus hálózata

A *leképezés* egy matematikai eszköz, amely lehetővé teszi, hogy egy bonyolult struktúrát egyszerűbb, jobban kezelhető térben ábrázoljunk. Egy ilyen leképezés például egy négydimenziós, görbült Riemann-sokaság,  $\mathcal{M}$  (mint amilyen a CDT-ben előálló kvantumtéridő) és egy sík, kompakt sokaság,  $\mathcal{N}$  között történhet. Az utóbbi gyakran egy tórusz,  $\mathcal{T}$ , ahol minden irány periodikus: azaz a tér végtelen ismétlődésként értelmezhető.

A leképezést egy skalármező,  $\phi(x)$  valósítja meg, amely a sokaság minden pontjához egy valós számot rendel. Fizikai példája ennek a *Higgs-mező*, de itt inkább egy matematikai eszközként használjuk. A tóruszra való leképezés során minden mezőértéket a  $[-0,5, 0,5]$  intervallumra korlátozunk, ahol a határon való átlépéskor a mező egy  $\delta$  értékkel ugrik, ezt egy  $b$  jelölésű határmátrix kódolja. Így biztosított a folytonosság a periodikus határokon.

A leképezéshez tartozó diszkrét hatás a skalármezőre az alábbi formában írható fel:

$$S_\phi = \sum_{i,j} (\phi_i - \phi_j - \delta b_{ij})^2 = \phi L \phi - 2\delta \phi b + \delta^2 b^2, \quad (6)$$

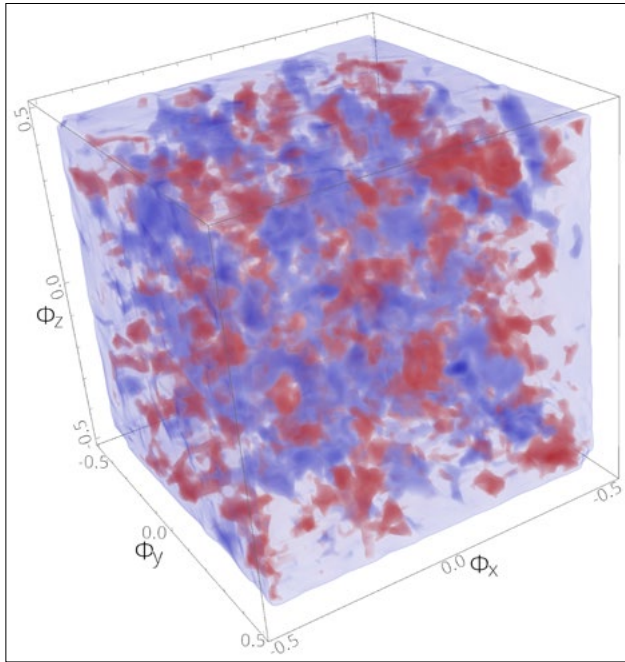
ahol  $i, j$  a háromszögelés szimplexeit indexelik,  $b_{ij}$  a periodikus határokból származó korrekciókat tartalmazza,  $\delta$  a mezőugrás mértéke, míg  $L$  a Laplace-operátor diszkretizált változata. A három tag közül az első a mező simaságára törekszik, a második a határfeltételeket veszi figyelembe, a harmadik pedig csak egy állandó, amely a szimuláció szempontjából irreleváns.

A Monte Carlo-szimuláció során a mező úgy fejlődik, hogy minimalizálja ezt a hatást. Mivel  $L$  pozitív definit, a minimális hatású konfiguráció egyértelműen meghatározható az alábbi egyenletrendszer megoldásával:

$$\phi = L^{-1} \delta b. \quad (7)$$

Ez megadja azt a leképezést, amely a téridő szimplexeinek belső viszonyait a lehető legkisebb torzítással jeleníti meg a tóruszon.

Ha minden téridőirányhoz  $(x, y, z, t)$  külön skalármezőt rendelünk, négy független mezőértéket  $(\phi_x, \phi_y, \phi_z, \phi_t)$  kapunk minden szimplexhez. Ezek egy négydimenziós harmonikus koordináta-rendszert alkotnak, melyek segítségével a CDT-ben előálló, koordináták nélküli kvantumgeometriák vizuálisan ábrázolhatóvá válnak.



7. ábra. A négydimenziós mezőkoordináták háromdimenziós  $(\phi_x, \phi_y, \phi_z)$  projekciója, ahol a szín a  $\phi_t$  mező értékét jelöli

A 7. ábrán egy ilyen térkép látható: minden pont egy szimplexet jelöl a mezőkoordináták terében. A színezés a  $\phi_t$  értéke szerint történik, ahol a negatív értékek kék, a pozitívak piros színűek. A megjelenő sűrűsödések, filamentumok és üres terek nem anyagi struktúrák, hanem a kvantumtéridő térfogatelem-sűrűségeinek lenyomatai. Meglepő módon ezek a struktúrák emlékeztetnek a meg-

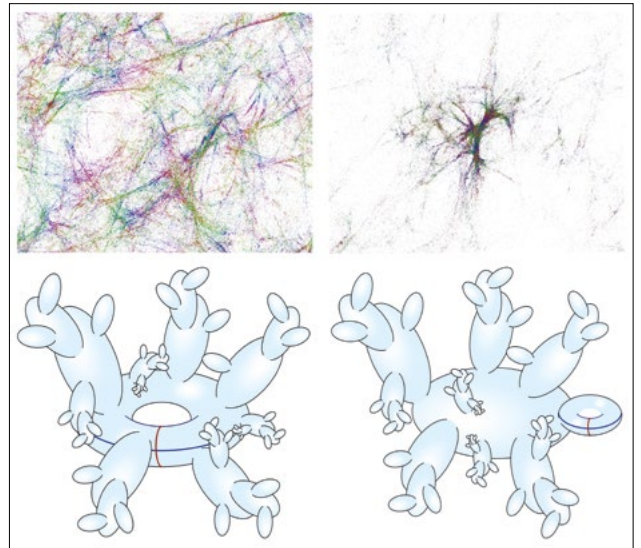
figyelt világegyetem nagyskálás hálózatos szerkezetére, habár itt pusztán a téridő kvantumszerkezetének kivételéseiről van szó.

## 4. Kölcsönhatás az anyaggal

A CDT háromszögelt rácsának geometriája a benne található anyagmezők paramétereinek változtatásával alakítható. A kölcsönhatás mibenlétét az anyagmezőhöz tartozó hatás írja le. A (6) egyenletben ismertetett hatás például csak a közvetlen egymás mellett lévő szimplexekre van hatással: megvizsgálva a szomszédos szimplexben lévő mező értékét a Monte Carlo-szimulációk által javasolt lépések elfogadási valószínűsége változni fog, így tudja a CDT-ben az anyag meggörbíteni a teret, míg a görbület vonzza vagy taszítja az anyagot.

### 4.1. Skalármező a CDT-ben

Ha a (6) egyenletben bemutatott hatást figyelembe vesszük a Monte Carlo-szimuláció során, akkor a mező is részt vesz az evolúcióban: a mező eloszlása hatással van arra, hogy a szimuláció mely háromszögeléseket részesíti előnyben. A  $\delta$  paraméter szabályozza a mező hatását: kis  $\delta$  esetén a mező gyenge, és alig módosítja a geometriát; nagy  $\delta$  esetén viszont a mező dominánssá válik, és erősen befolyásolja a kialakuló téridőstruktúrát.



8. ábra. A felső két ábra a  $\phi_x, \phi_y$  mezőprojekcióban ábrázolja a téridőt: balra a tisztán geometrikus (anyag nélküli) eset, jobbra pedig a nagy  $\delta$ -val futtatott szimuláció eredménye, ahol a skalármező jelenléte topológiai változást idéz elő. Alul a fluktuáló kvantumgeometria effektív topológiai átalakulása van szemléltetve. Forrás: [7]

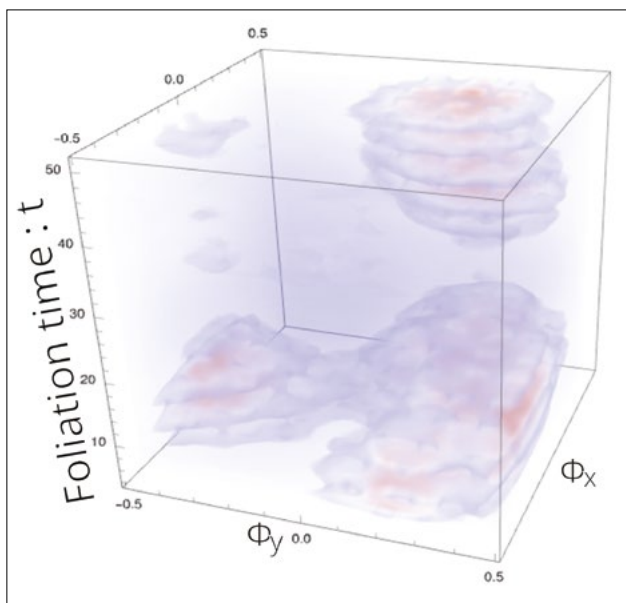
A 8. ábrán látható, hogyan hat a skalármező a téridő szerkezetére. Kis  $\delta$  értéknél a mező nem tör meg lényeges geometriai szimmetriákat: a leképezés során egy toroidális szerkezet jelenik meg. Ahogy  $\delta$  nő, a mező eloszlása már jelentős dinamikai szerepet tölt be, és az így kialakuló téridő topológiája már nem egyezik meg az eredetié-

vel. Ezt a változást a geometria *topológiai fázisátalakulásának* is tekinthetjük, amely jól látható a mezőprojekciók megváltozásán. A szimuláció tehát lehetőséget ad arra, hogy anyag jelenlétében vizsgáljuk a téridő kvantumszerkezetének módosulását.

#### 4.2. Topológiai töltés Yang–Mills mértékmezők esetén

A standard modellhez tartozó komplexebb kvantummezők beillesztése a CDT-geometriákba új technikai kihívásokat jelent. Míg a hagyományos rácsérelméleti módszerek periodikus, szabályos rácsokra épülnek, a CDT rendezetlen, sztochasztikus háromszögelése in ezek nem alkalmazhatók közvetlenül. Ugyanakkor új módszerekkel lehetőség nyílik mértékmezők (például gluonok) és fermionok (például kvarkok) diszkretizált reprezentációjára. A mértékmezők egyik kulcsfontosságú jellemzője a *topológiai töltés*, amely többek között az erős kölcsönhatás egyik kvantumszáma, és amely nem triviális térszerkezetek jelenlétére utal [8].

A topológiai töltés sűrűségként jelenik meg a téridőben, amelyet a háromszögelés egyes szimplexeiben külön-külön is mérhetünk. Az így kapott sűrűségi eloszlás összehangolható a korábban ismertetett skálármező-leképezéssel, így a mezőkoordináta-rendszer segítségével vizualizálhatóvá válik a topológiai struktúra.



9. ábra. A mértékmezőhöz tartozó topológiai sűrűsödés (instanton) megjelenítése a CDT-ben. Az ábra tengelyeit a  $\phi_x$ ,  $\phi_y$  skálármező-koordináták és a diszkrét fóliázási idő,  $t$  adják

A 9. ábra egy ilyen vizualizációt mutat, ahol a tengelyeket a  $\phi_x$ ,  $\phi_y$  skálármezők és a háromszögelés  $t$  fóliázási paramétere adják meg, a  $\phi_z$  koordináta elhagyásával. Az ábrán egy instantonszerű szerkezet figyelhető meg: egy lokális sűrűsödés, amely stabil topológiai töltésként értelmezhető.

A fóliázási idő diszkrét jellege, amely a CDT-szimulációk diszkretizációs mellékhatása, azaz rácsartefaktuma, jól megfigyelhető az időirány menti rétegződésben a 9. ábrán. Ennek ellenére a  $t$  koordináta felhasználása rendkívül hasznos, mivel lehetőséget nyújt annak bemutatására, hogy a sűrűsödés nemcsak a mezőkoordináta-térben, hanem a háromszögelés által meghatározott kvantumgeometriában is megjelenik. Ez újabb kapcsolatot teremt a geometriai és a mezőelméleti reprezentáció között, és megerősíti a mezőleképezés módszerének érvényességét.

## 5. Konklúzió

A CDT egy technikai eszköz a gravitáció kvantumelméletének vizsgálatára. Ahogy a rácsérelmélet sem egy különálló elmélet, hanem az erős kölcsönhatás számítógépes megfigyelésére jött létre, úgy a CDT eredményeit sem egy különálló elméletként kell kezelni, hanem a gravitáció rácsérelméleteként. A modell a newtoni és kozmológiai konstansok különböző értékeire különböző tulajdonságú téridőket mutat be, melyek között található olyan paraméterérték, melyre a mi világunkkal megegyező négydimenziós táguló világegyetemet kapunk. A numerikus szimulációk segítségével képesek vagyunk a kapott struktúrák nagy- és kisskálás fraktálszerkezetét vizsgálni, illetve meghatározni annak effektív dimenzióját és topológiáját. Mivel a rács maga a téridő, a rács tulajdonságaiból megkapjuk a téridő viselkedését, és a rács pontjaira (építőelemeire) még anyagi mezőket is tehetünk, melyek képesek ezen tulajdonságokat megváltoztatni. Hamarosan eljutunk odáig, hogy a teljes standard modellt képesek leszünk a dinamikusan változó téridőt reprezentáló rácson szimulálni.

### Köszönetnyilvánítás

A kutatást a Holland Kutatási Tanács (NWO) VIDI programja támogatta, VI.Vidi.193.048 projektszámmal.

### Irodalom

1. J. Ambjørn, A. Görlich, J. Jurkiewicz, R. Loll: Nonperturbative quantum gravity. *Physics Reports*, 519(4), (2012) 127–210.
2. T. Regge: General relativity without coordinates. *Il Nuovo Cimento*, XIX(3), (1961) 558–571.
3. A. Corichi, D. Núñez: Introduction to the ADM formalism, 2023.
4. K. G. Wilson: Confinement of quarks. *Phys. Rev. D*, 10, (1974) 2445–2459.
5. Sz. Borsanyi, S. Durr, Z. Fodor, C. Hoelbling, S. D. Katz, S. Krieg, L. Lellouch, T. Lippert, A. Portelli, K. K. Szabo, B. C. Toth: Ab initio calculation of the neutron-proton mass difference. *Science*, 347(6229), (2015) 1452–1455.
6. J. B. Hartle, S. W. Hawking: Wave function of the Universe. *Phys. Rev. D*, 28, (1983) 2960–2975.
7. J. Ambjørn, Z. Drogosz, J. Gizbert-Studnicki, A. Görlich, J. Jurkiewicz, D. Németh: Scalar fields in causal dynamical triangulations. *Classical and Quantum Gravity*, 38(19), (2021) 195030.
8. G. Clemente, M. D’Elia, D. Németh, G. Simonetti: Yang–Mills topology on four-dimensional triangulations, 2024. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2411.12668>

# ZITTERBEWEGUNG – EGY KEVÉSSÉ ISMERT ÁLTALÁNOS KVANTUMOS MOZGÁSFORMA

Dávid Gyula<sup>1,\*</sup>, Cserti József<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Eötvös Loránd Tudományegyetem, Fizikai és Csillagászati Intézet, Budapest

<sup>2</sup>Eötvös Loránd Tudományegyetem, Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék, Budapest

\*E-mail: dgy4242@gmail.com

## A Zitterbewegung története

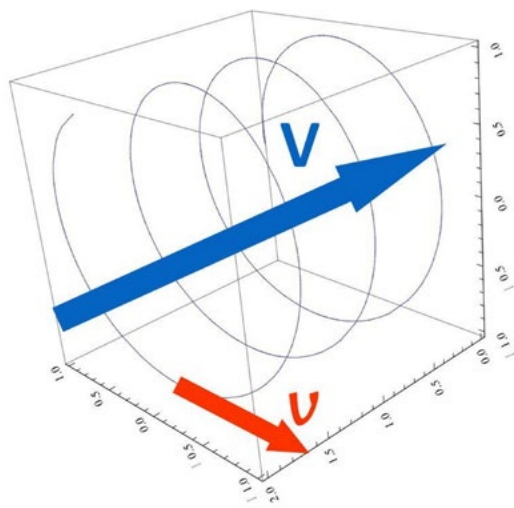
A *Zitterbewegung* (a továbbiakban röviden ZB) azok közé szakkifejezések közé tartozik, amelyek a kvantumelmélet dalás ifjúkorában, az 1920–30-as években születtek, amikor még a világfordító cikkek nagy része német nyelven, főleg a *Zeitschrift für Physik* hasábjain jelent meg. Ma már ez a folyóirat is angol nyelvű publikációkat közöl, de a ZB neve – néhány társához hasonlóan, mint pl. *Bremsstrahlung* (fékezési sugárzás), *Eigenvektor* (sajátvektor) – a fizikusok szóhasználatában megmaradt a német eredeténél.

A ZB szó szerinti jelentése „reszkető mozgás” (*Bewegung* = mozgás, *zittern* = reszketni, dideregni). Ezt a furcsa jelenséget Erwin Schrödinger (1887–1961) fedezte fel (papíron, számításokkal) 1930-ban, amikor a Dirac-egyenlet megoldásait tanulmányozta [1, 2]. Paul Dirac (1902–1984) Schrödinger nem relativisztikus hullámegyenletét házassította össze a speciális relativitáselmélet követelményeivel. A Dirac-egyenlet csodálatos módon leírta az elektron spinjét és a hozzá kapcsolódó mágneses momentumot, bónuszként pedig megjósolta az antirészecskék létezését is.

Schrödinger a legegyszerűbb esetet vizsgálta: a Dirac-egyenlet által leírt részecske szabad, erőmentes mozgását. Galilei és Newton óta tudjuk, hogy a magára hagyott (környezetével kölcsönhatásban nem álló, erőmentes, röviden: szabad) részecske egyenes vonalú, állandó sebességű mozgást végez. Ezt a közismert állítást nem változtatta meg a 20. század két világrengető fizikai forradalma, a speciális relativitáselmélet és a kvantumelmélet sem. A leírás fizikai, szemléleti és matematikai kerete megváltozott, de az eredmény változatlan maradt: mind a speciális relativitáselméletben, mind a nem relativisztikus kvantummechanikában könnyen levezethető, hogy a szabad részecske egyenes vonalban, állandó sebességgel mozog (a kvantumelméletben ez az állítás a helyoperátor várható értékére vonatkozik). Kézenfekvő-

nek tűnt a következtetés, hogy hasonló marad a helyzet e két elmélet majdani egyesítése során is. Ezért okozott nagy meglepetést – először Schrödingernek, aztán a fizikus-közvéleménynek –, hogy ez a következtetés téves: a Dirac-egyenletből levezethető, hogy a szabad részecske állandó sebességű mozgására ráakodik az impulzus irányára merőleges periodikus „reszkető” mozgás. Mintha a Dirac-részecske egy dugóhúzó alakú görbe (hélix) mentén mozogna (1. ábra).

Egy  $m$  tömegű szabad részecskét  $E$  energiája és  $\mathbf{p}$  impulzusvektora jellemez, ezek között a relativitáselméletben fennáll az  $E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4$  összefüggés, ahol  $c$  a vákuumbeli fénysebesség. A speciális relativitáselmélet szerint e részecske sebessége  $\mathbf{V} = c^2 \mathbf{p} / E$ , ennek nagysága mindig kisebb  $c$ -nél. A dugóhúzón lezajló mozgás átlagaként a menetemelkedés figyelembe vételével kiadódik az elvárt  $\mathbf{V}$  „drift-” (sodródási) sebesség. A részecske impulzusa a driftsebességgel arányos, és állandó.



1. ábra. A Zitterbewegung klasszikus elképzelése: a dugóhúzó alakú görbén végbemenő  $\mathbf{v}$  pillanatnyi sebességű mozgás időbeli átlagaként kialakul a klasszikusan elvárt  $\mathbf{V}$  driftsebesség



Dávid Gyula immár ötvenedik éve oktatja az ELTE fizikushallgatóit. Kutatómunkájában relativisztikus dinamikával foglalkozik. A NYIFFF fizikaverseny alapítója, az Ortvay Rudolf Fizikaverseny és az „Atomcsill” előadás-sorozat társ-szervezője, ez utóbbinak sokszoros előadója. Számos ismeretterjesztő fizikai és kozmológiai előadása terjed a neten. Hisz abban, hogy a fizikusok világnagy esze előbb-utóbb betölti a táguló teret – ahogy az a Fizikusnótában is szerepel (amelyet nem mellékesen ő írt).



Cserti József 1982-ben végzett az ELTE fizikus szakán, majd az ELTE korábbi Szilárdtestfizika Tanszékén kezdte oktatói munkáját. 2004-ben habilitált, 2010 óta az MTA doktora, 2013-tól az ELTE Komplex Rendszerek Fizikája tanszéken professzor. Kutatási területe a nanofizikai rendszerek, normál-szupravezető rendszerek, spintronika, grafén és a topológikus szigetelők. 2005 óta szervezi az ELTE-n az „Atomoktól a csillagokig” előadás-sorozatot középiskolásoknak.

A sebesség és az impulzus közötti egyszerű, az elemi fizikában megszokott  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$  alakú kapcsolat már a klasszikus mechanika Lagrange- és Hamilton-formalizmusában is megbomlik. Ilyen durva eltérésre azonban senki sem számított. A Dirac-elméletben az impulzus komponenseit egymással kommutáló operátorok írják le, míg a sebességoperátor komponensei egymással nem kommutáló operátorok – a helyoperátor ezek alapján kiszámított várható értéke pedig a dugóhúzó alakú pályát írja le.

Egy viszonylag egyszerűnek látszó probléma ilyen nem várt megoldása természetesen fizikai magyarázatot, interpretációt igényel, össze kell illeszteni más fizikai ismeretekkel – emellett persze meg kell próbálni kísérletileg igazolni. Az utóbbi feladat reménytelen volta hamar kiderült. Schrödinger megoldásában a dugóhúzó sugara, azaz a ZB amplitúdója az elektron ún. Compton-hullámhossza nagyságrendjébe esik:  $\lambda_c = \hbar/mc$  (ahol  $\hbar$  a Planck-állandó,  $m$  a vizsgált részecske tömege,  $c$  a fénysebesség) – ez az elektron esetében  $4 \cdot 10^{-13}$  m, azaz 0,4 femtométer, ami 137-szer kisebb a hidrogénatom méreténél. A rezgés frekvenciája pedig ( $\omega = c/\lambda_c$ , ami a  $10^{21}$  Hz nagyságrendbe esik. A mozgás amplitúdója túl kicsi, frekvenciája túl nagy – a jelenség kísérletileg detektálhatatlan.

Megpezdült viszont az elméletalkotók fantáziája. Először azt gondolták, hogy az elektronnak ez a mikroméretű „belső rezgése” hozza létre a spin jelenségét. Később egy egész iskola alakult, amely évtizedeken át dolgozott az elektron külső és belső állapotterét, külső és belső mozgását egységesen leíró algebrai formalizmuson. A ZB-t kapcsolatba hozták a Mach-elvvel és számos más egzotikus fizikai elképzeléssel is. Ezeket a furcsa ötletet részletesen ismerteti a [6] dolgozat történeti bevezetője. Végül azonban az észlelhetetlen ZB kiszorult a kvantumelmélet főáramából, és megmaradt a relativisztikus kvantummechanika furcsaságának – ily módon szerepel sok példatárban, pl. [13].

Lényegesen megváltozott a helyzet a kétezres évek elején. Ekkor a kondenzált anyagokkal foglalkozó kísérleti és elméleti fizikusok számos új nanofizikai és spintronikai rendszerrel találkoztak, és egyszerűsített elméleti modelleket állítottak fel e rendszerek elektron-szerkezetének és mozgásainak tanulmányozására. Geim és Novoselov például 2004-ben fedezte fel a grafént, a korábban elképzelhetetlen kétdimenziós anyagot, amelyet szénatomok egyetlen hexagonális szerkezetű rétege alkot. (A grafén és más spintronikai rendszerek érdekes új tulajdonságairól részletes ismertetést nyújt a [12] dolgozat.) Az új rendszerek elméleti vizsgálata során derült ki, hogy jó néhány ilyen modellben az elektronok mozgása hasonlít a Schrödinger által leírt Zitterbewegunghoz.

Ez nagy meglepetést okozott, hiszen a szilárd anyagban mozgó elektronok nagyon messze állnak a szabad relativisztikus részecskéktől. A grafénban például az elektronok tipikus sebessége mintegy háromszázszor

kisebb a vákuumbeli fénysebességnél. Viszont érdekes módon a ZB amplitúdója sokkal nagyobb, frekvenciája sokkal kisebbnek adódott, mint az eredeti Schrödinger-féle esetben – már-már közel áll a kísérleti kimutathatóság határaihoz.

A következő években egyre több egzotikus nanofizikai és spintronikai rendszerben mutatták ki (elméletileg) a ZB-hez hasonló mozgás jelenlétét. Nyitva maradt a kérdés, hogy ennek a szilárd anyagokban felfedezett jelenségnek mi köze van az eredeti Schrödinger-féle Zitterbewegunghoz.

A kérdést e cikk szerzőinek 2006–2010 között megjelent munkái [6–9] tisztázták a Zitterbewegung általános elméletének kidolgozásával. Kiderült, hogy a ZB-nek semmi köze sem a spinhez, sem a relativitáselmülethez. A ZB univerzális kvantumozásforma, ami bizonyos fizikai és matematikai feltételek mellett minden kvantumrendszerben fellép. Pusztán véletlen, hogy az emberiség a relativisztikus szabad elektron Dirac-egyenletével kapcsolatban találkozott első ízben ezekkel a matematikai feltételekkel.

Az alábbiakban ismertetjük a ZB fennállásának feltételeit, és néhány példát mutatunk nanofizikai megjelenésére.

## A Zitterbewegung feltételei

Eredményeink szerint Zitterbewegung lép fel egy kvantumozás rendszerben, ha a) a rendszer extra belső szabadsági fokokkal rendelkezik, ezért leírására többkomponensű hullámfüggvény szükséges, b) a rendszer – és ezzel a dinamikáját leíró Hamilton-operátor – invariáns a térbeli eltolásokra nézve, c) a transzlációs mozgáshoz tartozó impulzus és az extra szabadsági fokok között kölcsönhatás, „általánosított spin-pálya-csatolás” áll fenn. Vizsgáljuk meg egyenként ezeknek a feltételeknek a fizikai jelentését!

### Többkomponensű hullámfüggvény

A kvantumelméletben a fizikai rendszerek állapotainak halmaza komplex lineáris teret, ún. Hilbert-teret alkot, amely a legtöbb esetben végtelen dimenziós. Ennek az absztrakt állapottérnek az elemeit igen kényelmes függvényekkel reprezentálni – ebben az esetben a fizikai mennyiségeknek megfelelő operátorok e függvényekre ható differenciáloperátorok lesznek.

Már a kvantumelmélet korai éveiben kiderült, hogy a fenti leírás sokszor a legegyszerűbb kvantumozás objektumok (pl. az elektron) esetében sem elegendő: a részecske kielégítő jellemzésére, bizonyos extra szabadsági fokok figyelembe vételére többkomponensű hullámfüggvényre van szükség. Matematikai nyelven: a rendszer Hilberttere egy végtelen dimenziós függvénytér és egy véges dimenziós komplex vektortér tenzori szorzata. A hullámfüggvényt úgy foghatjuk fel, mint egy függvényekből álló véges sok komponensű vektort. Az ilyen állapotvektorra

kétféle operátor (tenzori szorzata) hat: egyrészt a megszokott differenciáloperátorok, másrészt véges négyzetes mátrixok.

Ilyen kétkomponensű hullámfüggvényt először Pauli vezetett be az elektron spinjével kapcsolatos extra szabadsági fok leírására. A relativisztikus elektron Dirac-elméletében már négykomponensű hullámfüggvény szerepel: az egyik kettősség itt is a spint írja le, a másik a részecske energiájának pozitív vagy negatív voltával kapcsolatos. Bonyolultabb rendszerek esetén kevésbé szemléletes extra szabadsági fokok is előfordulnak: a grafén elektronja például az ún. „völgy” szabadsági fokkal rendelkezik, ezt írja le a hullámfüggvény két komponense. A szilárdtestfizika más közelítő modelljeiben általában az elektron számára elérhető megengedett energiasávokat jelenti az extra szabadsági fok.

### Szabad és kváziszabad részecske – impulzus és kváziimpulzus

A klasszikus mechanikából tudjuk, hogy az erőmentes, szabad mozgást végző objektum lendülete (impulzusa) állandó. Emmy Noether 1918-as tétele szerint az impulzus megmaradása a rendszer térbeli eltolhatóságából, translációs invarianciájából következik. Ez az általános tétel mind a klasszikus, mind a kvantumfizikában fennáll. A kvantumelméletben az állandó impulzusú részecskének rögzített frekvenciájú (így energiájú) és hullámhosszú síkhullám felel meg.

A Dirac-féle szabad elektron esetében az eltolási szimmetria nyilvánvalóan érvényes, hiszen az üres térben semmilyen kitüntetett pozíció nem létezik. Más a helyzet azonban a szilárdtestekben mozgó elektronok esetében. Ezek nem erőmentes mozgást végeznek, hiszen a kristályrácsot alkotó ionok periodikus elektromos potenciálterében mozognak.

A kvantumfizikusok ezt a problémát már az 1920-as években megoldották. Ekkor dolgozták ki a kondenzált anyagok sávszerkezetének elméletét, és ennek kapcsán megmutatták, hogy a kristályrácsban terjedő elektronhullám is tekinthető egy impulzusjellegű paraméter által jellemzett hullámnak – csak éppen egy ilyen impulzusértékhez több lehetséges energiaszint tartozik, valamint a hullám impulzusa és energiája között a szabad részecske esetétől eltérő, jelentősen bonyolultabb összefüggés áll fenn. A szabad részecske hagyományos impulzusától való megkülönböztetés céljából az ebben az elméletben szereplő mennyiséget kváziimpulzusnak nevezik. A rácsban mozgó elektront ezért kváziszabadnak nevezhetjük. A kondenzált anyagok elektronrendszerének sáveleméletéről például Solyom Jenő tankönyvéből [16] tájékozódhatunk.

A ZB matematikai leírása során a legtöbb esetben a kváziimpulzus a hagyományos impulzushoz hasonlóan folytonos változónak tekinthető, ezért a kétféle impulzusfogalom megkülönböztetésére nincs szükség – a továbbiakban csak az „impulzus” kifejezést használjuk.

Így a fizikailag nagyon különböző két eset, a vákuumban mozgó szabad Dirac-elektron és a szilárdtest-fizikai modellek kváziszabad részecskéi analóg módon tárgyalhatók.

### Heisenberg-kép

Ezt a leírásmódot Werner Heisenberg vezette be 1925 nyarán írt, ősszel megjelent cikkében [3], amelyet hamarosan követett Born és Jordan második [4], majd a három szerző harmadik cikke [5] – ez a cikksorozat alapozta meg a kvantumelmélet mátrixmechanikai felépítését. (A nevezetes három cikk magyarul is olvasható a „Kvantummechanika” c. cikkgyűjteményben, Györgyi Géza fordításában [15].) A fizikusok matematikai ismereteihez sokkal közelebb álló, ezért gyorsabban elfogadott Schrödinger-féle hullámmechanika első publikációja csak néhány hónappal később, 1926 januárjában jelent meg. Némileg önkényesen Heisenberg első cikkéhez kötik a kvantumelmélet születését, ezért is ünnepli a *Fizikai Szemle* jelen, 2025 nyári száma az elmélet századik születésnapját.

A kvantummechanika Schrödinger-féle megfogalmazásában a hullámfüggvény időbeli változását keressük, miközben a fizikai mennyiségeket reprezentáló operátorok állandóak. Ezzel egyenértékű az ún. Heisenberg-kép: itt az állapotvektor állandó (megegyezik a kezdeti pillanatban érvényes állapottal), viszont az operátorok változnak az időben.

Ha a vizsgált rendszernek van klasszikus megfelelője (mint a sokat vizsgált harmonikus oszcillátornak és a hidrogénatomnak), akkor az operátorokra vonatkozó mozgásegyenletek megegyeznek a klasszikus mechanikából ismert egyenletekkel – ezért az ismert megoldásokat is azonnal felhasználhatjuk. Izgalmas új szituáció áll elő azonban akkor, ha a rendszernek nincs klasszikus megfelelője. Ez a helyzet a többkomponensű hullámfüggvénnyel leírandó rendszerek esetében: az extra (spin-, völgy- stb.) szabadsági fokoknak nincs klasszikus analógiájuk. Ilyenkor az operátorok mozgásegyenleteinek megoldása érdekes új jelenségek leírásához vezethet. A ZB esetében ezért a Heisenberg-kép használatát részesítjük előnyben: így a kezdőfeltételek okozta esetlegességektől eltekintve a jelenség lényegére koncentrálnak.

Ha a vizsgált rendszer eltolásinvariáns, akkor az időfejlődést leíró  $\hat{H}$  Hamilton-operátor nem függhet az  $\hat{x}$  helyoperátortól, csak a  $\hat{p}$  impulzusoperátortól:  $\hat{H} = \hat{H}(\hat{p})$ . Ebben az esetben a rendszer állapottere felbomlik a  $\hat{p}$  impulzusoperátor folytonosan sok  $p$  sajátértékéhez tartozó alterek direkt összegére. Ha vizsgálatunkat egy ilyen altérre koncentrálnak, ott a  $\hat{p}$  impulzusoperátor egyszerűen a  $p$  sajátértékével helyettesíthető. Ezért továbbiakban az impulzus komponensei nem operátorok, hanem pusztán számok lesznek. Ebben az altérben a Hamilton-operátor egy véges  $H(p)$  hermitikus mátrixszal adható meg, amely az extra szabadsági fok véges

dimenziós vektortérén hat. E mátrix sajátértékei adják meg a rendszer  $\mathbf{p}$  impulzusértékhez tartozó lehetséges energiaértékeit. A végtelen dimenziós Hilbert-téren való nehéz manipulációk helyett tehát egy jól ismert, egyszerű matematikai problémával, egy véges mátrix sajátértékeinek meghatározásával kell foglalkoznunk.

### Általánosított spin-pálya kölcsönhatás

Az egyes  $\mathbf{p}$  impulzusértékhez tartozó  $H(\mathbf{p})$  effektív Hamilton-operátor természetesen függ az impulzustól. Ha a mátrix diagonális, akkor a főátlóban álló értékek közvetlenül megadják az operátor  $E_n(\mathbf{p})$  sajátértékeit. Érdekesebb az az eset, amikor a  $H(\mathbf{p})$  mátrixnak nem diagonális komponensei is vannak. Ez azt jelenti, hogy az extra szabadsági fokok közti kapcsolat függ az impulzus  $\mathbf{p}$  értékétől: az impulzus jellemezte translációs mozgás kölcsönhat a rendszer extra szabadsági fokaival. Ilyen kapcsolatot először az atomhékjak szerkezetének tanulmányozásakor találtak a kutatók: az elektron pályamozgásához és spinjéhez is tartozik mágneses momentum, ezek relatív beállása pedig befolyásolja a rendszer energiáját. Ezt a kapcsolatot nevezték el spin-pálya kölcsönhatásnak. Ezért a tetszőleges, többkomponensű hullámfüggvénnyel leírható translációinvariáns rendszer Hamilton-operátorának nem diagonális komponensei által képviselt jelenségre „általánosított spin-pálya kölcsönhatásként” hivatkozunk.

## A helyoperátor mozgása a Heisenberg-képben

Schrödinger nyomán az  $\hat{\mathbf{x}}$  helyoperátor Heisenberg-képbeli mozgását szeretnénk meghatározni. A Schrödinger- és a Heisenberg-kép közti áttérést a  $\hat{G}(t) = \exp\{-(i/\hbar)\hat{H}(\mathbf{p})t\}$  uniter időfejllesztő operátor és inverze (egyben adjungáltja) segítségével lehet megadni (lásd pl. [14]):

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{G}(t)^{-1} \hat{\mathbf{x}}(0) \hat{G}(t),$$

ahol  $\hat{\mathbf{x}}(0)$  a helyoperátor Schrödinger-képbeli alakja. Impulzusreprezentációban ez egyszerűen  $\hat{\mathbf{x}}(0) = i\hbar(\partial/\partial\mathbf{p})$ , azaz egy szorzótényezőtől eltekintve az impulzusvektor szerinti gradiens (lásd [14]).

Ez a gradiensoperátor a  $\hat{G}(t)$  operátorra hat, amely  $H(\mathbf{p})$ -hoz hasonlóan impulzusfüggő komponensekből álló mátrix. Hogyan lehet ennek a gradiensét általános esetben meghatározni? Itt jön segítségünkre a lineáris algebra egyik leghasznosabb (sajnos nem eléggé közzismert) eredménye, a mátrixfüggvények alaptétele.

Írjuk fel az adott  $\mathbf{p}$  impulzusértékhez tartozó  $H(\mathbf{p})$  operátort  $H(\mathbf{p}) = \sum_a E_a(\mathbf{p}) Q_a(\mathbf{p})$  alakban, ahol az  $E_a$  valós számok a  $H(\mathbf{p})$  operátor sajátértékei, a  $Q_a$  mátrixok pedig a sajátalterekre vetítő projektorok, természetesen mindegyik függ a  $\mathbf{p}$  impulzustól. Ekkor a  $\hat{G}(t)$  időfejllesztő operátor így írható fel:

$$G(t) = \sum_k e^{-\frac{i}{\hbar} E_k(\mathbf{p})t} Q_k(\mathbf{p}).$$

Az impulzus szerint deriváló  $\hat{\mathbf{x}}(0)$  a Leibniz-szabály szerint egyszer az  $E_k(\mathbf{p})$  energia-sajátértékeket, egyszer pedig a  $Q_k(\mathbf{p})$  projektorokat deriválja. Az eredményt beszorozva az időfejllesztő operátor ugyancsak projektorok szerint felbontott inverzével és kihasználva a projektorok ortogonalitását megkapjuk végeredményünket, a helyoperátor Heisenberg-képbeli mozgását leíró képletet (a számolás részletei a [6] dolgozatban és a [9] cikkben olvashatók):

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) + \sum_a \mathbf{Z}_{aa} + t \sum_a \mathbf{V}_a Q_a + \sum_a \sum_{b \neq a} e^{i\omega_{ab}t} \mathbf{Z}_{ab},$$

ahol

$$\mathbf{V}_a(\mathbf{p}) = \frac{\partial E_a(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}$$

a  $H(\mathbf{p})$  operátor egyes sajátértékeihez tartozó ún. parciális sebességeket jelöli, és a

$$\mathbf{Z}_{ab}(\mathbf{p}) = i\hbar Q_a \frac{\partial Q_b}{\partial \mathbf{p}}$$

mátrixok az ún. Zitterbewegung-együtthatók (ezek a  $\mathbf{p}$  szerinti gradiensképzés miatt egyben hármasektorok is), az  $\omega_{ab} = (E_a - E_b)/\hbar$  értékek pedig a lebegési frekvenciák.

Ha a helyoperátor időtől függő várható értéke iránt érdeklődünk, a fenti kifejezést jobbról és balról meg kell szoroznunk a rendszer kezdőállapotára jellemző többkomponensű  $|\Psi(0)\rangle$  vektorral:  $\bar{\mathbf{x}}(t) = \langle \Psi(0) | \hat{\mathbf{x}}(t) | \Psi(0) \rangle$ .

## Értelmezés

A rendszer Heisenberg-képbeli, időtől függő helyoperátora a következő tagokból tevődik össze: az első tag a Schrödinger-képbeli állandó helyoperátor, a második egy állandó eltolásvektor. A harmadik tag arányos a  $t$  idővel, így ez írja le a rendszer állandó sebességű mozgását. A sebességvektorhoz az egyes sajátértékekhez tartozó módusok a különböző  $\mathbf{V}_a(\mathbf{p})$  parciális sebességoperátorokkal járulnak hozzá. Ezek nemcsak eltérő nagyságúak, hanem különböző irányúak is lehetnek. Ezért a kezdőállapottól függően a helyoperátor várható értéke különböző irányú és sebességű mozgást végezhet.

A legérdekesebb természetesen a helyoperátor képletének utolsó tagja. Ez írja le a voltaképpen ZB-t, az azonos impulzushoz tartozó különböző energia-sajátértékek közti különbségekhez tartozó lebegési frekvenciákkal megvalósuló, a  $\mathbf{Z}_{ab}(\mathbf{p})$  vektor iránya szerinti polarizációjú „reszkető mozgást”.

A Schrödinger-féle ZB esetétől és az elsőként megismert nanofizikai rendszerektől eltérően az általános esetben a ZB-t nem csak egyetlen frekvencia jellemzi: az azonos impulzushoz tartozó különböző energiaértékek közti minden különbségi frekvencia fellép. Monofrekvenciás rezgőmozgás csak nagyon egyszerű, kétsávos rendszer,

illevé speciális szimmetriafeltételek fennállása esetén valósul meg.

Az elsőként megismert esetektől eltérően a ZB-rezgések mozgásiránya sem mindig merőleges a driftsebességre és az impulzusra. Több általunk vizsgált nanofizikai rendszerben felléptek a transzverzális irányú rezgések mellett longitudinális és ferde irányú rezgési módusok, sőt ezek keverékei is.

Az 1. ábrán bemutatott, a Schrödinger-féle ZB-n alapuló régi elképzelés tehát jelentősen leegyszerűsíti a kvantumrendszerekben fellépő Zitterbewegung valódi komplexitását. Ez a mozgás általában sok különböző frekvenciájú és irányú rezgés szuperpozíciójaként valósul meg, mint azt a későbbi ábrákon bemutatjuk.

Látjuk, hogy a ZB a fentebb részletezett feltételek fennállása mellett szükségszerűen fellép, és matematikai leírása teljes általánosságban megadható. A ZB lebegési jelenség: oka az azonos impulzusértékhez, ám különböző energiaértékhez tartozó energiaszintek közötti kapcsolat, frekvenciáit az energiaszintek távolsága határozza meg.

Érdekességgé megemlíthetjük, hogy a ZB lebegési jelenséggé történt azonosítása lehetővé tette a ZB-hez hasonló mozgásformák felismerését egészen más jellegű (klasszikus, nem kvantum), ám ugyancsak több komponensű hullámfüggvénnyel leírható rendszerekben is. Ilyen pl. a kristályos közegben terjedő rugalmas hullámok esete – itt az egyik polarizációs módusban terjedő hullámcsomag „árnyéka” megjelenik a többi módusban (lásd a 2010. évi Ortvay Fizikai Feladatmegoldó Verseny 17. feladatát [17]). A jelenség távolabbi rokona fellép a folytonos impulzusváltozó helyett diszkrét, spinjellegű változóval jellemezhető kvantum rendszerekben is (lásd a 2025. évi Ortvay-verseny 18. feladatát [18]).

## Klasszikus és nanofizikai alkalmazások

A szakirodalomban korábban vizsgált esetek az imént bemutatott általános képlet speciális eseteként adódnak. Az eredeti Schrödinger-féle ZB esetében a Dirac-egyenlet, a grafén és más nanofizikai rendszerek esetében pedig az anyag legegyszerűbb közelítő leírása összesen két energiaszinttel számolt, ezért ezek között csak egyetlen lebegési frekvencia lépett fel. Egy másik érdekes eset a [7] cikkünkben tárgyalt kvázispin esete – ekkor a rendszernek sok energiaszintje van, de ezek egyforma távolságban vannak egymástól, és algebrai okból csak a szomszédos szintek közti ZB-együtthatók különböznek nullától. Ezért az összes fellépő átmeneti frekvencia egybeesik, a rendszer mozgása egyetlen ZB-frekvenciával leírható.

Egyik idézett cikkünkben [7] a nanofizikai szakirodalomban szereplő számos rendszerre korábban (sokkal bonyolultabb módon) kiszámított ZB-jelenséget sikerült a fenti általános formulába történő egyszerű behelyettesítéssel reprodukálnunk, nemegyszer az eredeti szerzők hibáit is kijavítva. A cikkben táblázatos áttekintés található a vizsgált rendszerekről (egy- és kétrétegű

grafén, nehéz lyukak, Cooper-párok stb.). Egy későbbi cikkben pedig újabb, a szakirodalomban nem szereplő rendszerek (Luttinger- és Rashba–Dresselhaus-modell) esetében is kimutattuk a ZB felléptét – ezek több energiaszintes, ezért több ZB-frekvenciával jellemezhető rendszerek voltak.

Igen érdekes, hogy az utóbbi, az Rashba–Dresselhaus-modell együtthatóinak speciális kombinációja esetén az összes ZB-együttható nullával lett egyenlő. Ezt egy speciális szimmetria okozza: e paraméterkombináció esetén a  $Q_a$  projektorok nem függenek az impulzustól, ezért a  $Z_{ab}$  együtthatókban szereplő derivált nulla lesz. Mivel a modell szerint e paraméterek egyike külső elektromos potenciál alkalmazásával hangolható, felmerül a ZB vezérlésének lehetősége is.

## A mozgás képe

Az  $\hat{x}(t)$  helyoperátor egy  $\mathbf{p}$ -től függő mátrix, amit természetesen nem lehet lerajzolni. Ábrázolható viszont a helyoperátor  $\bar{x}(t) = \langle \Psi(0) | \hat{x}(t) | \Psi(0) \rangle$  várható értéke, megfelelően választott  $|\Psi(0)\rangle$  kezdőállapot esetén. Ennek vizsgálatát végezte el 2009-ben diákunk, Széchenyi Gábor tudományos diákköri dolgozatában [11]. Ebben számos érdekes ábrán mutatta be a ZB-mozgást végző részecske helyzetének várható értékét. Alább ebből a dolgozathoz idézünk fel néhány ábrát, a szerző engedélyével.

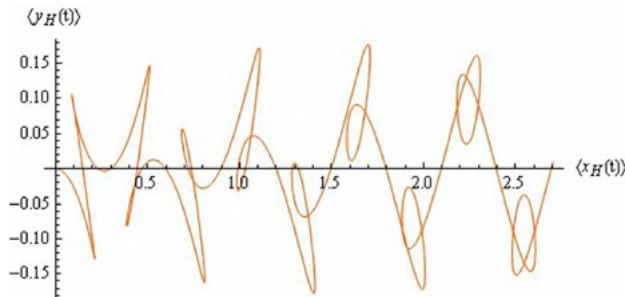
### ZB a kétrétegű grafénban

A korábban már említett grafén kétrétegű változata szénatomok hatszögrácsának két síkrétegéből áll, a rétegeket a hatszögek élén hatónál gyengébb kötés tartja össze. A rendszer érdekes fizikai tulajdonságainak részletes leírása a [12] disszertációban olvasható.

A kétrétegű grafén effektív Hamilton-operátora a  $\mathbf{p}$  impulzustól függő  $4 \times 4$ -es mátrixokkal reprezentálható. Ennek megfelelően minden  $\mathbf{p}$  impulzusértékhez négy  $E_k(\mathbf{p})$  energiaérték tartozik. Ezek között összesen 6 átmenet lehetséges, de az energiasávok szerkezete miatt csak négy különböző lebegési frekvencia lép fel, mert két-két frekvenciaérték egybeesik. A kétrétegű grafénban ezért négy ZB-módus valósul meg, közülük egy longitudinális, azaz az impulzussal párhuzamos irányú elmozdulással jár, míg a három további módus transzverzális, azaz az impulzusra merőleges, ám különböző frekvenciájú rezgést jelent. Az  $\hat{x}(t)$  helyoperátor pontos alakja a [6] disszertációban, a [11] dolgozatban és a [9] cikkben található meg.

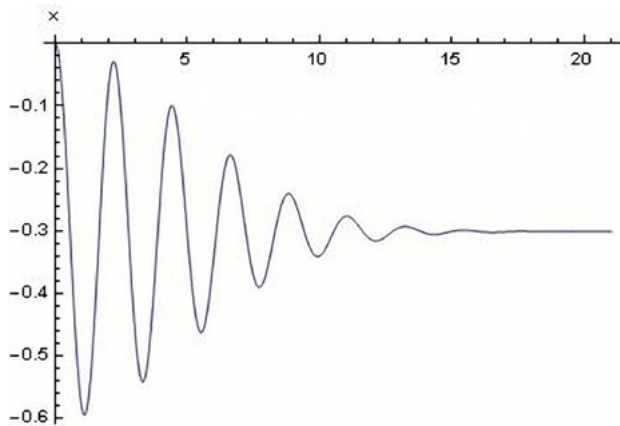
A kétrétegű grafénban fellépő ZB imént vázolt gazdag struktúrája igen bonyolult mozgásokat tesz lehetővé. Egy ilyen mozgás képe látható a 2. ábrán. A  $\mathbf{p}$  impulzusvektor az ábra  $x$  tengelye irányába mutat. Ha a helyoperátort egy rögzített impulzusértékhez tartozó négy módus szuperpozíciójából indítjuk, akkor a helyoperátor várható értéke a longitudinális és transzverzális módusok összetételéből adódó pályát írja le az  $(x, y)$

síkon, miközben megvalósul az impulzusvektor irányába mutató lassú drift is.



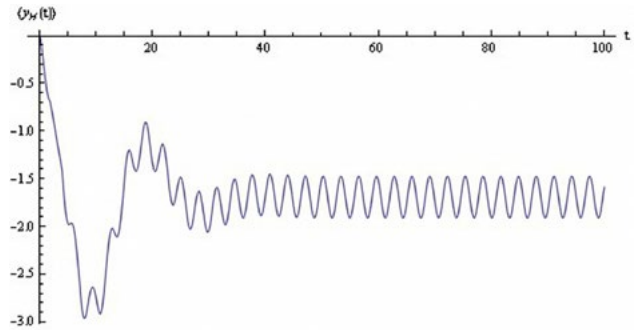
2. ábra. Az elektron helyoperátora várható értékének mozgása a kétrétegű grafénban (Széchenyi Gábor TDK-dolgozatából)

Megtehetjük azt is, hogy a kezdőállapotot különböző  $\mathbf{p}$  impulzusértékekhez tartozó alterek állapotvektoraiból rakjuk össze, pl. Gauss-görbe alakú hullámcsomag formájában. Ekkor a  $\mathbf{V}_a(\mathbf{p})$  parciális sebességek impulzusfüggése miatt a hullámcsomag szétfolyik, a különböző módusokhoz tartozó komponensek más irányba és más sebességgel mozognak, ezért egy idő után megszűnik a köztük levő térbeli átfedés, és a ZB, azaz az energiaszintek közti lebegés exponenciálisan lecseng. Egy ilyen eset figyelhető meg a 3. ábrán, amely az egyrétegű grafénban fellépő ZB lecsengését mutatja.



3. ábra. Lecsengő amplitúdójú ZB az egyrétegű grafénban: a helyoperátor egyik komponensének időfüggése (Széchenyi Gábor TDK-dolgozatából)

A fenti tipikus esettel szemben azonban vannak olyan rendszerek, amelyekben a Hamilton-operátor speciális alakja miatt két vagy több parciális sebesség egybeesik, a hullámcsomag egyes komponensei együtt mozognak, ezért a tartósan fennmarad köztük az interferencia. Ez a „ZB-tartóshullám” jelensége. A kétrétegű grafénban ez a speciális eset áll elő, ugyanis két módus között az átmeneti frekvencia az impulzustól függetlenül állandó, ezért a két parciális sebesség azonos. A 4. ábrán megfigyelhető, hogy a többi módus exponenciális lecsengése után a speciális frekvenciájú „tartóshullám” hosszabb távon fennmarad.



4. ábra. Nem lecsengő ZB („ZB-tartóshullám”) a kétrétegű grafénban: a helyoperátor egyik komponensének időfüggése (Széchenyi Gábor TDK-dolgozatából)

## A ZB és a transzportjelenségek

Hogyan lehetne ténylegesen észlelni a ZB jelenségét? Bár a szilárdtestekben és nanorendszerekben megvalósuló ZB amplitúdója több nagyságrenddel nagyobb, frekvenciája pedig hasonlóképpen kisebb az eredeti, Schrödinger-féle ZB-hez képest, a közvetlen kísérleti ellenőrzés továbbra sem lehetséges. Legfőképpen azért, mert az idézett számítások egyetlen részecske mozgására vonatkoznak, míg szilárdtestfizika által vizsgált rendszerekben nem egyetlen elektron mozog, hanem rengeteg egymással kölcsönható elektron kollektív mozgása okozza a transzportjelenségeket, pl. az elektromos vezetést.

Paradox módon éppen ez teszi lehetővé a továbblépést. A szilárdtestfizikának ugyanis már évtizedek óta jól bevált matematikai módszerei vannak arra, hogyan vezesse le az egyetlen elektront leíró Hamilton-operátor alapján a rendszer makroszkopikusan is észlelhető fizikai mennyiségeit – pl. a frekvenciafüggő elektromos vezetőképességét, optikai tulajdonságait, mágneses szuszceptibilitását. E bonyolult számítások első közelítéseként jól felhasználhatók az egyetlen elektron mozgására vonatkozó elmélet eredményei. A témáról szóló legutóbbi cikkünkben [10] azt vizsgáltuk, miként jelenik meg ebben a közelítésben a rendszer „ZB-hajlandósága” a makroszkopikus transzportegyütthatókban. Meglepő módon azt találtuk, hogy az elektromos vezetőképesség és az ezzel kapcsolatos topológiai jellegű paraméterek (Berry-görbület, Chern-szám) formuláiban ugyanazok a  $\mathbf{Z}_{ab}$  együtthatók bukkannak fel, mint az egyetlen elektron helyoperátorára vonatkozó számításokban. Ez arra a következtetésre vezet, hogy bár egy-egy elektron esetén a Zitterbewegung észlelése reménytelen, ez a jelenségkör mégis megjelenik a vizsgált Hamilton-operátorokkal leírható modellek reális eredetijének kísérletileg vizsgálható tulajdonságaiban.

Mint említettük, egyes modellekben elméleti lehetőséget találtunk a ZB-jelenség elektromos potenciállal való vezérlésére. Ez reményt ébreszt arra, hogy e rendszerek transzportjellemzői finomhangolhatók, manipulálhatók lehetnek. Erre pedig a nanofizika, spintronika és a rájuk épülő majdani technológia következő fejlődési fázisában nagy szükség lehet.

## Összefoglalás

A Schrödinger által felfedezett Zitterbewegung nem a relativisztikus kvantummechanika furcsasága, hanem a többkomponensű hullámfüggvénnyel leírható szabad és kváziszabad kvantumrendszerekben fellépő általános jelenség. Megjelenik a modern szilárdtestfizika által tanulmányozott számos rendszer egyszerűsített többsávós modelljében. Bár egyedi részecskéken közvetlenül nem tanulmányozható, a ZB jelensége manifesztálódik az elektromos vezetőképesség és más ténylegesen mérhető fizikai mennyiségek viselkedésében.

## Köszönetnyilvánítás

Köszönetet mondunk Széchenyi Gábornak, hogy hozzájárult a TDK-dolgozatához készített ábráinak újraközléséhez.

## Irodalom

1. E. Schrödinger: Über die kräftefreie Bewegung in der relativistischen Quantenmechanik. In: *Sonderausgabe aus den Sitzungsberichten der Preußischen Akademie der Wissenschaften Phys.-Math. Klasse*, Band 24, (1930) 418–428.
2. E. Schrödinger: Zur Quantendynamik des Elektrons. In: *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften. Physikalisch-Mathematische Klasse*, (1931) 63–72.
3. W. Heisenberg: Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zeitschrift für Physik*, 33(1), (1925) 879–893.

4. M. Born, P. Jordan: Zur Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 34, (1925) 858–888.
5. M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan: Zur Quantenmechanik II. *Zeitschrift für Physik*, 35, (1926) 557–615.
6. Dávid Gyula: A Zitterbewegung általános elmélete. PhD-disszertáció, ELTE TTK, 2010
7. József Cserti, Gyula Dávid: Unified description of Zitterbewegung for spintronic, graphene, and superconducting systems. *Phys. Rev. B* 74, (2006) 172305.
8. Gyula Dávid, József Cserti: General theory of Zitterbewegung. *Phys. Rev. B* 81, (2010) 121417(R).
9. Gyula Dávid, József Cserti: General theory of Zitterbewegung. A [8] cikk részletesebb verziója, számos rendszerre vonatkozó részletes számításokkal: <https://arxiv.org/abs/0909.2004> (2009)
10. József Cserti, Gyula David: Relation between Zitterbewegung and the charge conductivity, Berry curvature, and the Chern number of multiband systems. *Phys. Rev. B* 82, (2010) 201405.
11. Széchenyi Gábor: A mindenütt jelenlévő Zitterbewegung. XXX. OTDK dolgozat, 2011, Nyíregyháza, [http://otdk.nyf.hu/online-kotet/XXX\\_OTDK\\_kotet.pdf](http://otdk.nyf.hu/online-kotet/XXX_OTDK_kotet.pdf)
12. Cserti József: Kétdimenziós kvantumrendszerek nanoszerkezetekben. MTA doktori dolgozat, <https://real-d.mtak.hu/325/>
13. Constantinescu F., Magyari E.: Kvantummechanika. Feladatok. Tankönyvkiadó, Budapest (1972), XII/14. feladat: 353. o., megoldás: 376. o.
14. Marx György: Kvantummechanika. Műszaki Kiadó, Budapest (1971)
15. Jánossy Lajos (szerk.): Kvantummechanika (cikkgyűjtemény). Akadémiai Kiadó, Budapest (1971)
16. Sólyom Jenő: A modern szilárdtest-fizika alapjai II. ELTE Eötvös Kiadó, Budapest (2010)
17. A 41. Ortway Rudolf Fizikai Feladatmegoldó Verseny feladatai, 17. feladat (2010)
18. Az 55. Ortway Rudolf Fizikai Feladatmegoldó Verseny feladatai, 18. feladat (2025)

# KVANTUMOS VÉLETLENSZÁM-GENERÁTOROK

Schranz Ágoston<sup>1,2</sup>, Solymos Balázs<sup>1</sup>, Márton Botond László<sup>1</sup>, Udvary Eszter<sup>1,2</sup>, Kis Zsolt<sup>1,3,@</sup>

<sup>1</sup>BME Villamosmérnöki és Informatikai Kar, Hálózati Rendszerek és Szolgáltatások Tanszék, Budapest

<sup>2</sup>HUN-REN-BME Informatikai Rendszerek Kutatócsoport, Budapest; <sup>3</sup>HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest

@E-mail: [kis.zsolt@wigner.hun-ren.hu](mailto:kis.zsolt@wigner.hun-ren.hu)

## Bevezetés

Tom Stoppard „Rosencrantz és Guildenstern halott” című műve azzal a jelenettel kezdődik, hogy a két főszereplő fej vagy írás játékot játszik, Guildenstern folyamatosan fejet dob, és Rosencrantz egymás után nyolcvanöt-ször elnyeri barátja érmét. Nagyon valószínűtlennek tűnik egy ilyen sorozat, holott ha a fej és írás dobásának

valószínűsége egyenlő, akkor ez a sorozat is épp akkora eséllyel fordul elő, mint bármely másik. Vajon hogyan lehet eldönteni, hogy egy véletlen sorozat valóban teljesen véletlenszerű (ami nem jelenti azt, hogy a fej és írás dobásának gyakorisága egyenlő)? Egyáltalán, mikor tekinthető egy sorozat véletlennek? Ha véletlen számokra van szükségünk, milyen módszert érdemes választani annak érdekében, hogy véletlen számsoro-



Dr. Schranz Ágoston a BME Villamosmérnöki és Informatikai Kar Hálózati Rendszerek és Szolgáltatások Tanszékének egyetemi adjunktusa és a HUN-REN-BME Informatikai Rendszerek Kutatócsoport tudományos munkatársa. Kutatási területei a kvantumfizikai alapú, optikai elvű véletlenszám-generálás (QRNG), illetve a kvantumalapú kulcszetosztás (quantum key distribution, QKD).



Solymos Balázs a BME Mobil Kommunikáció és Kvantumtechnológiák Laboratóriumának munkatársa, ahol doktori témája keretében optikai kvantumos véletlenszám-generátorok eredményeinek utófeldolgozásával foglalkozott, melynek nyilvános védésére készül. A kvantum-véletlenszámgeneráláson felül további kutatási területe a jövőbeli kvantuminternet kihívásai.

zatot kapjunk? Nem biztos, hogy Guildenstern minden alkalommal ugyanúgy dobta fel a pénzérmét, ahogy az sem, hogy valamilyen egyéb külső hatás nem befolyásolta az érme földet érését. Ezért a pénzfeldobást nem fogadhatjuk el megbízható módszernek véletlen sorozatok előállítására.

A technika fejlődésével kínálkozott a lehetőség, hogy számítógép állítson elő valamilyen algoritmussal véletlen számokat. Igen ám, de a számítógépes algoritmusok determinisztikusak, azaz ha egy bizonyos kezdőállapotból indítjuk őket, akkor mindig ugyanaz lesz az eredmény (különben a számítógép megbízhatatlan lenne). Ez azonban még nem zárja ki azt, hogy algoritmussal jó minőségű álvéletlen – tehát determinisztikus, de statisztikai mutatóit tekintve véletlenszerű – sorozatot állítsunk elő. A következő módszer az egyik legegyszerűbb eljárás:

$$x_i = (a_1 x_{i-1} + \dots + a_k x_{i-k}) \bmod m,$$

ahol az  $a_k$  együtthatók relatív prímek, melyekre teljesül, hogy  $|a_k| < m$ ,  $a \bmod m$  pedig a moduló művelet, azaz az  $m$ -mel való osztás maradéka. A fenti rekurzió szükségyszerűen véges számú lépés után visszatér a kiindulási állapotba. Ezt a lépésszámot a generátor periódushosszának nevezzük, melynek maximális értéke a tárgyalt módszerre  $\rho = m^{k-1}$ . Ennek eléréséhez  $m$ -nek prímszámnak kell lennie, valamint az együtthatóknak ki kell elégíteni néhány további feltételt.

Az álvéletlen számsorozatok minőségének tesztelésére számos módszert kidolgoztak. Az egyenletességet például az ún. diszkrepanciával lehet jellemezni: ez azt fejezi ki, hogy a  $[0, 1)$  tartományon generált véletlen számokból alkotott  $N$  dimenziós vektorok az egységoldalú  $N$  dimenziós hiperkockát mennyire egyenletesen töltik ki. Az egyenletesség mellett fontos jellemző még a számsorozaton belül fellépő hosszú távú korrelációk megjelenése, illetve ezek hiánya. Számos sta-

tisztikus tesztsomagot dolgoztak ki a véletlen számsorozatok minősítésére, ilyen például a DIEHARD [1], vagy az amerikai NIST SP 800-22 [2]. Ezen túlmenően vannak hivatalos tanúsítványt kibocsátó cégek is. A tanúsítványokra szüksége van az ipar különböző szereplőinek, például a játékautomatákat gyártó cégeknek.

Az álvéletlen számsorok jól használhatók olyan szimulációkban, ahol véletlen bemenő adatokra van szükség. Ezekre a legismertebb példa a különféle Monte Carlo-eljárások halmaza. Felhasználás szempontjából nagy előnye a determinisztikus algoritmussal előállított számsoroknak, hogy velük egy futtatás tetszőleges számban, ugyanazokkal a tesztadatokkal megismételhető.

A számos előnyös tulajdonság mellett van egy nagy hátránya az 1950–1970-es években kifejlesztett determinisztikus algoritmusoknak: az előállított számsorokat mintavételezve elvileg visszafejthető, hogy milyen kezdőállapotból indultak, ezáltal pedig meghatározhatóak a további elemek is. Kritikus kriptográfiai alkalmazásokban ez megengedhetetlen biztonsági rést jelent, ezért ilyen helyzetekben módosított vagy más elven működő algoritmusokra van szükség. Az egyik lehetséges irány az ún. kriptográfiailag biztonságos álvéletlenszám-generátoroké: ezek olyan algoritmusokon alapulnak, melyek lehetetlenné teszik, hogy klasszikus számítógéppel megjósolják a következő biteket, még úgy is, hogy az összes korábbi bitet ismerik. Ez azt jelenti, hogy a bitek számának növekedésével polinomiálisnál magasabb rendben (például exponenciálisan) nő az időszükséglet a következő álvéletlen bit meghatározásához. Ez a megoldás azon alapul, hogy bizonyítottan (vagy legalábbis jól megalapozott sejtés alapján) nem lehetséges hatékonyabb algoritmust találni a véletlen számsorozat visszafejtésére. Azonban a polinomiálisrendű biztonság nem garantálja önmagában, hogy a jövő kvantumszámítógépeivel nem lehet megjósolni egy véletlen bitsorozat részleges ismeretével a következő biteket. Az álvéletlenszám-generátorok kriptográfiai biztonságossága tovább növelhető, ha a kiindulási értékeket gyakran váltogatják, s az egy fizikai véletlenszám-generátorból származik [4]. Így kerülnek előtérbe a fizikai véletlenszám-generátorok.

A fizikai véletlenszám-generátorok működési elve azon alapul, hogy a természetben számos folyamat létezik, melynek kimenetelét nem tudjuk pontosan megjósolni.



*Márton Botond László* a BME Hálózati Rendszerek és Szolgáltatások Tanszékének doktorandusza a Mobil Kommunikáció és Kvantumtechnológiák Laboratóriumában. Fő kutatási területei a kvantum kulcsszétosztás és a kvantumkommunikációs protokollokat használó hálózatok.

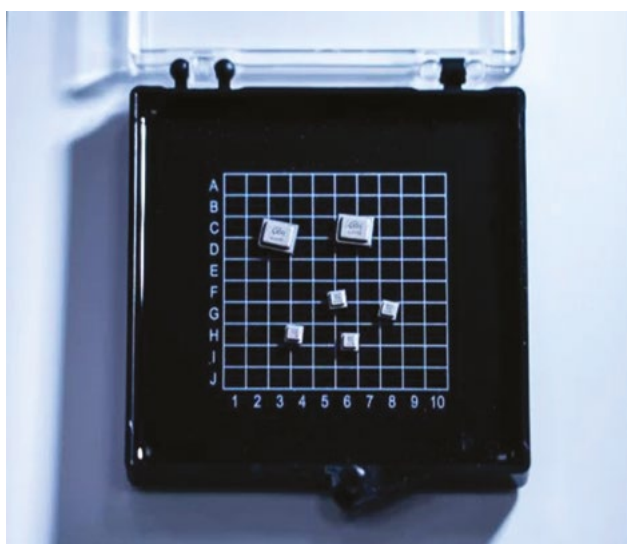


*Gerhátné Dr. Udvarý Eszter* a BME Villamosmérnöki és Informatikai Kar docense, a Mobil Kommunikáció és Kvantumtechnológiák Laboratóriumának tagja. A klasszikus optikai távközlés, elsősorban az optikai hozzáférési hálózatok vizsgálata után kezdett a kvantumkommunikáció jelenségeivel foglalkozni. A QRNG mellett fő kutatási területe a klasszikus és kvantumkommunikációs rendszerek együttműködése.



*Dr. Kis Zsolt* a HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont tudományos főmunkatársa, valamint a BME Villamosmérnöki és Informatikai Kar, Mobil Kommunikáció és Kvantumtechnológiák Laboratóriumának munkatársa. Fő kutatási területei az elméleti és kísérleti kvantumoptika, ezen belül nemlineáris optika, koherens kvantumkontroll, optikai nanostruktúrák. Együttműködés keretében vezeti a BME-n folyó optikai-szál-alapú QKD eszközök fejlesztését.

Makroszkopikus rendszerek esetében a jelenségek általában a klasszikus fizika keretein belül értelmezhetők. Sokrészecskés rendszereket a statisztikus fizika módszereivel jellemzünk, emiatt számos mérhető tulajdonság véletlen eloszlást mutat. A Lavarand vagy Wall of Entropy [3] egy lávalámpákkal borított fal, a lávalámpákban megjelenő véletlen mintázattól határozzák meg az álvéletlenszám-generátor kezdő paramétereit. Második példánk a sörétzaj, melyet megfigyeltek elektromos áramban és nagyon gyenge fény esetében is. Az utóbbiról később részletesen írunk. Ennek a jelenségnek a hátterében az áll, hogy diszkrét részecskék véletlen időközökkel követik egymást, és alacsony fluxus esetén ez számottevő ingadozást eredményez az időegység alatt detektálható részecskeszámban, azaz az elektromos áramerősségben vagy fényintenzitásban. Utolsó példánk ebben a szakaszban a modern személyi számítógépekben implementált hardveres véletlenszám-generátor: a Linux operációs rendszer `/dev/random` fájlját olvasva egy olyan véletlen bájt sorozatot kapunk, melyet az operációs rendszer folyamatosan generál a gépbe beépített hardvereszközök időben változó paramétereiből.



1. ábra. Az ID Quantique cég Quantis csipjei. A négyzetláncra a kockák élei körülbelül 5 mm hosszúak (Forrás: ID Quantique)

Mikroszkopikus méretekben már nem a klasszikus mechanika, elektrodinamika stb. törvényei érvényesülnek, hanem a kvantummechanikáéi. Ebben központi szerepet játszik a véletlen. A kvantumrendszerek dinamikáját leíró Schrödinger-egyenlet valószínűségi amplitúdók időfejlődését határozza meg. A kvantumrendszeren mérést végezve határozott értéket kapunk, de a kísérletet újra elvégezve már más eredmény jöhet ki. A lehetséges eredmények valószínűségi eloszlást mutatnak; ez egy elemi tulajdonság, a kvantum rendszerek sajátossága. Ezt kihasználva lehet kriptográfiailag biztonságos véletlenszám-generátorokat tervezni és megvalósítani. Ezek a kvantum véletlenszám-generátorok (quantum random number generators, QRNG), melyek

jelen tudásunk alapján a kriptográfiailag legbiztonságosabb véletlenszámforrások.

A mérendő kvantumrendszer sokféle lehet, az első QRNG-k például radioaktivitás detektálásán alapultak, mára azonban gyakorlatilag egyeduralkodónak tekinthetők az optikai elvű kvantum véletlenszám-generátorok [4]. Az ID Quantique az egyik piacvezető cég a QRNG-gyártásban: optikai elvű QRNG-rendszerüket olyan kis méretű csipbe sikerült besűríteni, mely egy okostelefonba is beépíthető [5] (1. ábra). Ez köszönhető egyrészt annak, hogy a fényforrások stabilan, időben fenntarthatóan bocsátják ki fotonok sokaságát, tehát nagy sebességű véletlenszám-generálást tesznek lehetővé, másrészt pedig az optikai távközlés széles körű elterjedésének, mely elérhetővé tett relatíve olcsó, technikailag fejlett fényforrásokat, detektorokat és egyéb passzív és aktív optikai eszközöket. A fénynek többféle mérhető tulajdonsága van: léteznek nyálábosztós, fáziszajt mérő, detektált fotonokat számláló, erősített spon-tán emissziót használó stb. QRNG-megoldások.

Az algoritmusalapú, klasszikus fizikai és kvantummechanikai elven működő véletlenszám-generátorok összehasonlítása szempontjából lényeges paraméter még a véletlen bitsorozat generálási sebessége. Általánosságban elmondható, hogy az algoritmikus véletlenszám-generátorok a leggyorsabbak, a mai korszerű számítógépeken a Gb/s ráta átlagosnak nevezhető. A klasszikus fizikai és kvantummechanikai elven működők lassabbak. A már korábban említett ID Quantique Quantis termékcsaládjának tagjai 100 kb/s és néhány tíz Mb/s között mozgó sebességgel rendelkeznek. Az alacsonyabb ráta érthető, hiszen nemcsak a fizikai folyamat, hanem a rendelkezésre álló elektronikai eszközök sebessége is korlátozza az időegység alatt generálható bitek számát. Ugyanakkor folyamatosan jelennek meg újabb kvantummechanikai véletlenszámgenerátor-elrendezésről szóló publikációk, melyek több Gb/s véletlenbit-rátára képesek.

## Saját eredmények

A számos megvalósítási lehetőséget figyelembe véve felmerül a kérdés: mi alapján döntünk egyik vagy másik fizikai architektúra mellett? Lehetséges valamely teljesítménymetrikára maximalizálni, például az elérhető bitgenerálási rátára. Azonban a kutatás-fejlesztés szempontjából előnyös olyan megoldást keresni, amely, bár nem feltétlenül veszi fel a versenyt a legjobb teljesítményű generátorokkal, működését tekintve jól modellezhető, a folyamat klasszikus és kvantum komponensei egyszerűen szétválaszthatóak,<sup>1</sup> ezáltal a véletlenség kvantumfizikai eredete jól leírható és nyomon követhető.

<sup>1</sup> Itt „klasszikus” alatt olyan jelenségeket értünk, amelyeknél a kvantum jelleg és működés a részt vevő részecskék mennyiségéből fakadóan már nehezen elemezhető, mint például az elektromos ellenállások termikus zaja.

Az utóbbi választásra szolgálnak példaként azok az eszközök, melyek detektálják egy fényforrás által kibocsátott fotonokat, majd a fotondetekciók közt eltelt időközök véletlenségét használják a véletlenszám-generálás alapjául. Ezen generátorokat a szakirodalom beérkezési időn alapuló (*time-of-arrival*) QRNG-knek hívja. A leggyakrabban alkalmazott fényforrások félvezető lézerek, azaz lézerdiódák, mert a kibocsátott koherens fény jól karakterizálható, valamint jó közelítéssel Poisson-fotonstatisztikájú. Mivel félvezetők, gyártásuk kiforrott, kis méretük és az optikai távközlésben betöltött szerepük, elterjedtségük révén könnyen és viszonylag olcsón hozzáférhetőek. A fényforrásból származó fotonokat általában egyfoton-detektorral (például fotoelektron-sokszorozóval, egyfoton-lavina-diódával vagy szupravezető nanohuzalos detektorral) lehet észlelni. A detektorok hatékonysága elérheti a 80–90%-ot, ezért a fényt rendszerint erősen csillapítani szükséges – a telítődést elkerülendő és a detektor védelme érdekében.

Nem szükségszerű, hogy a véletlen időközönként érkező fotonokat lézer állítsa elő, azok termikus fényforrásból is származhatnak. A termikus fényforrások fotonstatisztikája a koherens fénnel szemben szuper-Poisson-jellegű, mely azt jelenti, hogy gyakran egyszerre több foton lép ki az eszközből – ez a csomósodás (*bunching*) jelensége. Azonban a csillapítók okozta Bernoulli-törléseknek,<sup>2</sup> illetve a detektorrendszer holtidejének köszönhetően a mért fotoelektron-statisztika a gyakorlatban jól közelíti a Poisson-eloszlást. Holtidő alatt azt a rövid időtartamot értjük, amely minden detektálás után fellép, és az ezen időszakon belül érkező további fotonokra a detektor érzéketlen. Belátható tehát, hogy amennyiben kellően nagy csillapítást iktatunk a fényforrás és az érzékelő közé, félvezető lézerek helyett akár fénykibocsátó diódákat, LED-eket is alkalmazhatunk a véletlenszám-generátor fotonforrásaként.

Képzelnék el azt, hogy az így megalkotott QRNG ideálisan működik, a fényforrás Poisson-fotonstatisztikával bocsát ki fotonokat. Meg lehet mutatni, hogy ekkor a két egymást követő fotondetektálás között eltelt  $T$  véletlen idő exponenciális eloszlást követ:

$$\Pr(T < t) = 1 - e^{-\lambda t},$$

ahol  $\lambda$  a detektorra érkező fotonok átlagos rátája [1/s]-ban mérve, mely tartalmazza a csillapításból és a detektor nem egységnyi hatásfokából származó veszteséget.

A fotondetektálások időkülönbségeként kapott számértékek ugyan véletlenszerűek és függetlenek, de közel sem egyenletes eloszlásúak, márpedig kriptográfiai területen ez az elvárás, ugyanis az egyenletes eloszlásnak maximális az entrópiája – a meglepetéstartalma –, ezáltal ennek a kimenetelét a legnehezebb megjósolni. Továbbá, mivel informatikai és távközlési egységeink bi-

náris számrendszerben dolgoznak, ugyancsak célszerű, ha a véletlenszám-generátorunk egyenletes eloszlású bitsorozatot bocsát ki. Az entrópia információelméleti definíciója Claude Shannontól származik:

$$H = -\sum_{x \in X} p_x \log_2 p_x,$$

ahol  $X$  a szimbólumok halmaza (pl.  $\{0, 1\}$ , de lehet hosszabb bitsorozat is),  $p_x$  pedig egy adott szimbólum előfordulási valószínűsége. Véletlenszám-generálás esetén általában az ennél szigorúbb

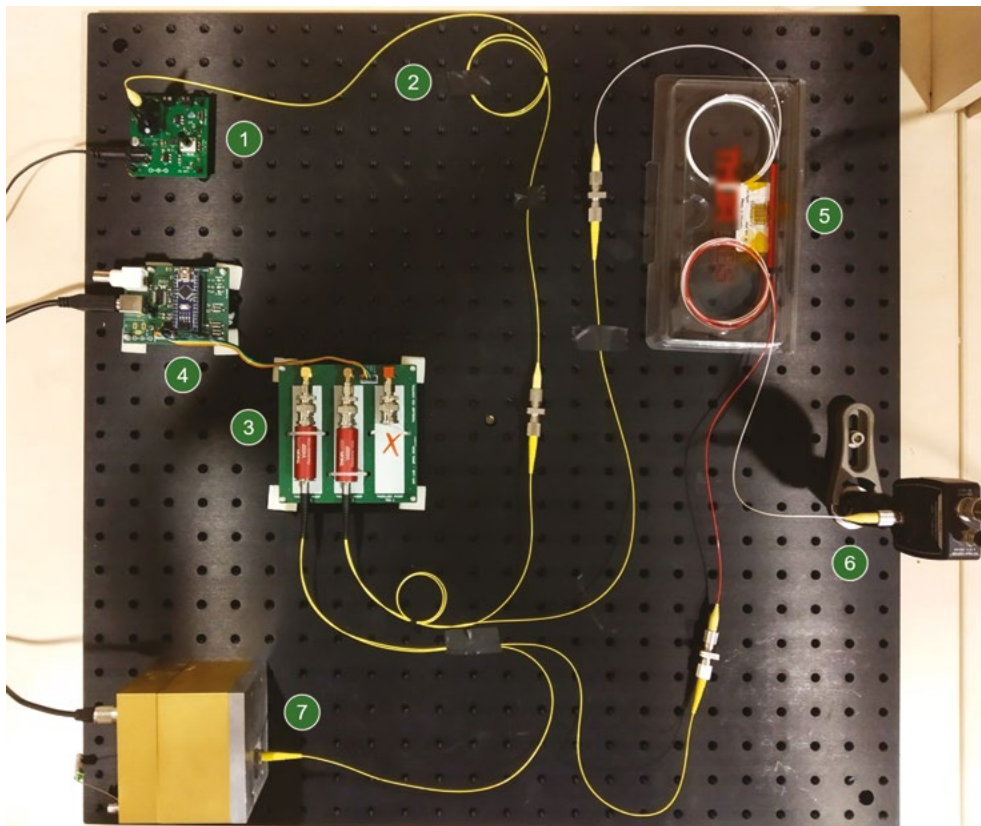
$$H_\infty = -\max_{x \in X} \log_2 p_x \leq H$$

min-entrópiát használjuk az eloszlás karakterizálására. A két entrópia akkor vesz fel maximális (és egyenlő) értéket, ha valemennyi szimbólum azonos valószínűségű. Ez általában nem teljesül, ezért a nyers adatsorból ún. extraktor – egy matematikai transzformáció – alkalmazásával nyerünk véletlen bitsorozatot.

Visszatérve az általunk megvalósított kvantumalapú véletlenszám-generátorhoz, találjunk hát egy módszert, ami a mért időintervallumokhoz egyenletes eloszlású biteket rendel! Štipčević és Rogina 2007-es cikkükben [6] írtak le egy metódust, melynek a lényege a következő: mérjük meg két egymást követő, fotonok beérkezése közti időintervallumot, majd hasonlítsuk őket össze. Ha az első mértük hosszabbnak, rendeljük a kimenethez egy „0” bitet, ha a másodikat, akkor pedig egy „1”-est. Amennyiben a lézerefény teljesítménye, ezáltal a beérkező fotonráta időben állandónak tekinthető, akkor a két időtartamot leíró valószínűségi változók függetlenek és azonos eloszlásúak; ebből fakadóan pedig az összehasonlításból származó különbségi változó szimmetrikus lesz, tehát a nullások és egyesek valószínűsége megegyezik. Le kell kezelnünk azonban még az utolsó fennmaradó lehetőséget is: ha a két időtartamot egyforma hosszúnak mérjük – bármilyen kis valószínűségű legyen is ez –, akkor a szimmetria megőrzése érdekében nem rendelünk bitet a kimenethez. Ez természetesen csökkenti a hatékonyságunkat, azonban az így kapott módszer robusztus, jól ellenáll a bitgenerálás idejéhez képest jóval nagyobb időskálán történő hőmérsékleti teljesítmény-ingadozásoknak.

Ez volt a legelső QRNG alapelve, melyet megvalósítottunk a BME Hálózati Rendszerek és Szolgáltatások Tanszékének Mobil Kommunikáció és Kvantumtechnológiák Laboratóriumában, s az eszköz a mai napig üzemel. Az eszköz fényképe a 2. ábrán látható. A QRNG-k további kutatásában két irányba indultunk el. Egyrészt finomítottuk a mögöttes fizikai rendszer leíró modelljét, amellyel olyan problémákra is megoldást találtunk, amelyek nagyobb fotonráták esetén már a statisztikai tesztek által kimutathatóan eltorzították az ideális véletlenszerűségre jellemző statisztikai tulajdonságokat. Másrészt pedig újabb matematikai módszereket kezdtünk kidolgozni annak érdekében, hogy

<sup>2</sup> A csillapítást a csillapító telítődése alatt modellezhetjük úgy, mint az egyes fotonok egymástól független törlését vagy megtartását a folyamatban  $p$ , ill.  $1 - p$  valószínűséggel, egy Bernoulli-eloszlás szerint.



2. ábra. A véletlenszám-generátorunk fényképe. 1: lézerdióda; 2: egymódusú optikai szál; 3: szabályozható optikai csillapítók; 4: csillapító kontrolller; 5: optikai nyalábsztó; 6: lineáris fotodetektor; 7: fotoelektron-sokszorozó

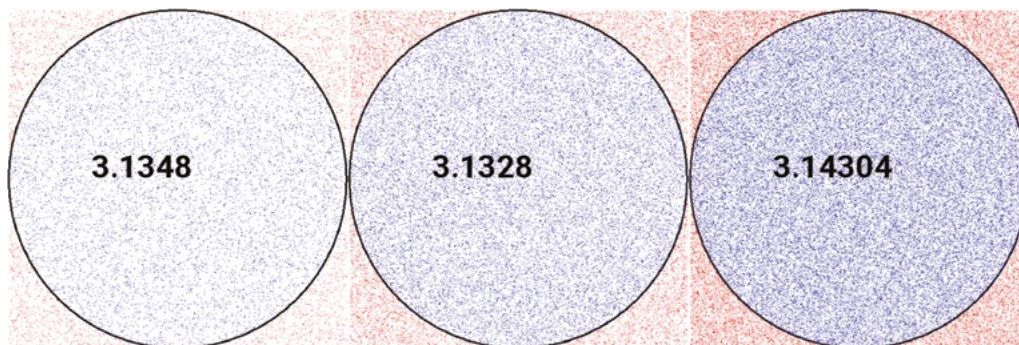
a bitgenerálás határfoka (az egy mérési eredményhez rendelt bitek átlagos száma), és ezáltal remélhetőleg a sebesség is megnövekedjen az alapötlethez képest. Mindezt igyekeztünk úgy kivitelezni, hogy az eredeti fizikai architektúrát ne kelljen nagymértékben megváltoztatni hozzá – legfeljebb stabilabb fénytjeljesítmény-kontrollt építettünk be.<sup>3</sup>

Az extraktorok implementálásán túl pontosabb matematikai modellezést tűztünk ki célul, mivel az imént bemutatott egyszerű modell számos fizikai jelenséget elhanyagol. Ilyen például az egyfotondetektorok sötétzaja (a beérkező fotonok hiányában megjelenő kimeneti jel), vagy az időmérés véges felbontása, pontossága. Az időbélyegző eszköz típusától függően ez a felbontás piko-nanoszekundumos nagyságrendű. A véges felbontás korlátozza az elérhető bitráta nagyságát. Még nagyobb problémát jelent, hogy attól függően, hogy a mérési órajel ciklusán belül mikor észleltük a foton, két ugyanolyan valós hosszú időtartamot digitalizálva kaphatunk két eltérő értéket is. Bemutattuk és számszerűsítettük, hogy ez korrelációt okoz a mért időtartamok, ezáltal a generált bitek között is [7]; majd megalkottunk egy algoritmust, mely egyszerre szünteti meg ezt a nem ideális működést, valamint kezeli a véletlenszerű holtidő-ingadozás problémáit [8].

<sup>3</sup> A következő bekezdésben hivatkozott publikációink mindegyike nyílt hozzáféréssű, így szívesen ajánljuk őket az érdeklődők figyelmébe.

További célunk még a bitgenerálás határfokának és sebességének növelése. A korábban bemutatott egyszerű extraktor ugyan jól működik, viszont kicsi a hatékonysága, mivel méréspáronként mindössze egy bit keletkezik, holott a fotonok detektálásának időkülönbsége egy folytonos mennyiség, mely a detektálás véges időfelbontása miatt a számítógépben már diszkrét adatokra képződik le. Ehhez egyrészt bemutattuk, hogy a kinyerhető entrópia mértéke jelentősen nagyobb, mint az alapmódszer fél bit / észlelt esemény értéke, és utófeldolgozási módszereket ajánlottunk arra, hogy ezt kihasználva is egyenletes eloszlású maradjon a bitsorozatunk [9]. Másik módszerünk pedig azáltal növelte a hatékonyságot, hogy nem vetette el az egyenlőnek mért időpárokat sem, hanem egymást követő mérések csoportosításával hozott létre több bites, egyenletes eloszlást követő blokkokat. Az időkülönbségek statisztikus eloszlásából meg lehet határozni a min-entrópiát, melynek értéke eseményenként 9,66 bit. Az utófeldolgozás során ez az érték valamelyest csökken 9,14 értékre, a detektálás maximális rátája pedig ötmillió foton másodpercenként; tehát a készülékünk véletlenbit-generálási rátájának felső határa 45 Mb/s, melynek eléréséhez célhardverre lenne szükség. A rendelkezésre álló személyi számítógéppel ennél szerényebb, néhány Mb/s értéket tudunk megvalósítani.

Oktatási és demonstrációs célokból létrehoztunk egy weboldalt, amely a <http://qrng.hit.bme.hu> címen



3. ábra. A  $\pi$  értékének Monte Carlo-módszeres becslése 10 000, 25 000 és 50 000 véletlenül generált pont alapján. A pontszám növekedése nem garantálja a becslés pontosságának javulását minden egyes futás esetén!

érhető el, egyelőre kizárólag az egyetem belső hálózatáról. Az oldalt kiszolgáló webszervert bekapcsolt állapotában a QRNG látja el véletlen bitekkel, egyéb esetben viszont egy jó minőségű álvéletlen-generátorból nyeri ki az értékeket. Az oldal három funkciót lát el. Egyrészt referenciaként szolgál, röviden bemutatja kutatócsoportunk QRNG-vel kapcsolatos munkáját, beleértve a weblapot kiszolgáló generátor működésének leírását és a kapcsolódó tudományos munkáink listáját is. Másodsorban lehetőséget biztosít arra is, hogy a felhasználók véletlen biteket (vagy ezekből formált hexadecimális értékeket) igényeljenek, akár egyszerű, szöveges formátumban, akár egy alkalmazásprogramozási interfészen (API-n) keresztül. A harmadik funkció pedig az, hogy vizualizációs módszerek és szórakoztató alkalmazások segítségével közelebb hozzuk a véletlenszerűség világának megértését az érdeklődő laborlátogatók számára – például a Kutatók Éjszakája keretein belül ebbe is bepillantást nyerhetnek a programunk résztvevői.

Illusztrációképpen a  $\pi$  értékének becslését mutatjuk be Monte Carlo-szimulációval: vegyünk fel egy egységoldalú négyzetet, majd ezen belül egy olyan, 0,5 sugarú kört, melynek a négyzög minden oldala az érintője. Generáljunk ezután egyenletes eloszlással  $N_{\text{össz}}$  darab pontot a négyzeten belül, majd számoljuk meg, hány pont esett ezek közül a körbe ( $N_{\text{kör}}$ ). Ha a véletlen számok egyenletes eloszlásúak voltak, igaz lesz, hogy a körbe, illetve négyzetbe eső pontok száma a síkidomok területének arányához tart a pontok számának növelésével, így a becslött értékünk

$$\pi = 4 \cdot \frac{A_{\text{kör}}}{A_{\text{négyzet}}} = 4 \cdot \frac{\pi}{4} \approx 4 \cdot \frac{N_{\text{kör}}}{N_{\text{össz}}}.$$

A módszert 10, 25 és 50 ezer generált pont segítségével a 3. ábra szemlélteti. Természetesen minél több pontot használunk, várhatóan annál pontosabb lesz a becslésünk.

Összefoglalásként elmondhatjuk, hogy a kvantumalapú véletlenszám-generálás egy aktívan kutatott, sok új eredménnyel kecsegtető terület, melyet egyre bővülő csoportunk is több irányból vizsgál, valamint népsze-

rűsít. A QRNG-kkel előállított bitsorozatok hozzásegíthetnek minket egy olyan világhoz, ahol a titkosítandó információink védettnek tekinthetők akár kvantumszámítógépes támadásokkal szemben is.

### Köszönetnyilvánítás

A kutatás a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a 2022-2.1.1-NL-2022-00004 számú projekt finanszírozásában valósult meg.

A kutatás részben az Európai Unió QCIHungary projektjének a támogatásával (száma 101081247) és a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alap társfinanszírozásával valósult meg.

### Irodalom

1. R. G. Brown: Dieharder: A Random Number Testuite. <https://webhome.phy.duke.edu/~rgb/General/dieharder.php>
2. A. Rukhin et al.: A Statistical Test Suite for Random and Pseudorandom Number Generators for Cryptographic Applications. NIST Special Publication 800-22 rev1. <https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/Legacy/SP/nistspecialpublication800-22r1a.pdf>
3. Wikipedia: <https://en.wikipedia.org/wiki/Lavarand>
4. M. Herrero-Collantes, J. Garcia-Escartin: Quantum random number generators. *Rev. Mod. Phys.*, 89, (2017) 015004. <https://arxiv.org/abs/1604.03304>
5. IDQuantum Quantis QRNG Chips: <https://www.idquantique.com/random-number-generation/products/quantis-qrng-chips/>
6. M. Stipčević, B. Rogina: Quantum random number generator based on photonic emission in semiconductors. *Review of Scientific Instruments*, 78(4), (2007) 045104. <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0609043>
7. Á. Schranz, B. Solymos, M. Telek: Stochastic performance analysis of a time-of-arrival quantum random number generator. *IET Quant. Comm.*, 5(2), (2024) 140. <https://doi.org/10.1049/qt2.12080>
8. B. Solymos, Á. Schranz, M. Telek: Correlation avoidance in single-photon detecting quantum random number generators by dead time overestimation. *Eur. Phys. J. Quantum Technol.*, 11(1), (2024) 60. <https://doi.org/10.1140/epjqt/s40507-024-00272-8>
9. B. Solymos, L. Bacsárdi: Secure post-processing for non-ideal photon arrival time based quantum random number generator. *Infocommunications Journal*, 16(1), (2024) 12. <https://doi.org/10.36244/ICJ.2024.1.2>

# FORDULAT A KVANTUMHÁLÓZATOKBAN: A MÉRÉSEK SZEREPE ÁTALAKUL

Kriváchy Tamás

ICFO – Institut de Ciències Fotoniques, The Barcelona Institute of Science and Technology, Barcelona

E-mail: [tamas.krivachy@gmail.com](mailto:tamas.krivachy@gmail.com)

## I. Szokásos Bell-nemlokalitás

Egy kicsit unalmas lenne egy valódi Schrödinger-macskás kísérlet. Képzeljük el, hogy brit tudósok nagy felhajtás mellett bejelentik, hogy több évtizednyi műszaki áttörésnek hála készen állnak a világ szeme láttára végrehajtani az igazi Schrödinger-macskás kísérletet. Élő közönség és YouTube-közvetítés kíséretében, több millió szempár láttára előkészítik a dobozt, a méregüvegcsét, a kalapácsot, a radioaktív atomot, ami előidézi majd a szuperpozíciót, no meg a macskát. Aztán elvégzik a kísérletet, kinyitják a dobozt, és lám-lám... – ott ül egy összezavarodott, de élő macska.

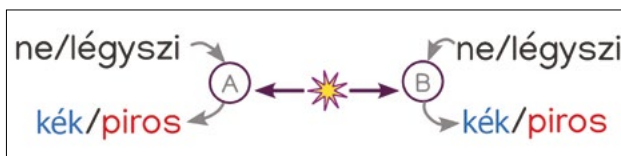
Ez *nem* meglepő látvány. Akár igaz volt a macska kvantum szuperpozíciója, akár nem, ezt fogjuk látni a kísérlet végén: vagy él a macska, vagy meghalt. Azaz nem tudunk meg semmit a mögöttes fizikáról ettől a kísérlettől. Ugye, ha nincs olyan, hogy élő és holt állapotok szuperpozíciója, akkor már a doboz kinyitása előtt eldőlt, hogy él-e vagy hal a macska. Ha pedig van, akkor ez csak abban a pillanatban „dől el”, amikor kinyitjuk a dobozt.

Sokkal izgalmasabb az, amire John Bell jött rá 1964-ben: van olyan kísérlet, amit ha elvégzünk, akkor mást fogunk látni, ha létezik szuperpozíció, mint ha nem létezik. Bell az 1935-ös kísérteties távolhatásos gondolatokra reflektálva jutott egy olyan gondolatkísérletre, ami a lokális hatások hagyományos tapasztalatának mond ellent – ezért hívjuk ma ezt a jelenséget *Bell-nemlokalitásnak*. A kísérlethez szükséges koncepcionális és technikai körülmények megvalósításáért 2022-ben meg is kapta a Nobel-díjat Alain Aspect, John F. Clauser és Anton Zeilinger [1].

Bell javaslatát egy egyszerű összeöltözős játékkal lehet szemléltetni. Tegyük fel, hogy Alíz és Béla távoli országokban laknak, de irtó szerelmesek egymásba. Ezért kitalálják, hogy néha össze szeretnének öltözni, de csakis akkor, ha mindketten olyan kedvükben vannak aznap; ha már csak egyikük is nem összeöltözős hangulatában kelt, akkor az a cél, hogy más színbe öltözzenek (1. ábra).



Kriváchy Tamás doktori tanulmányait Genfben és Bécsben végezte, jelenleg posztdoktori kutató a barcelonai ICFO kutatóintézetben, 2025 novemberétől pedig a zürichi ETH-n. Kutatása a kvantum korrelációk, hálózatok és gépi tanulás köré csoportosul. Emellett ismeretterjesztéssel is foglalkozik a Kvantum-cirkáló blogban.



1. ábra. Alíz (A) és Béla (B) minden reggel eldöntik, hogy össze szeretnének-e öltözni (ne/légyszi) és aztán, hogy milyen ruhát vesznek fel (kék/piros). Ha megméri a köztük elosztott összefonódott részecskepárt, akkor jobban teljesíthetnek

Kicsit formálisabban, minden reggel pontban ugyanakkor kelnek fel, és a felkelés pillanatában 50–50% eséllyel mindketten magukban eldöntik, hogy van-e kedvük összeöltözni a másikkal aznap. Aztán gyorsan felöltöznek vagy *kék*, vagy *piros* ruhába. Utána reggeli közben videóhívás keretében megbeszélik, hogy kinek milyen kedve volt, és sikerült-e összeöltözni. Klasszikusan (azaz kvantum trükkök nélkül) akármilyen stratégiát beszélnek meg, ha tényleg minden reggel véletlenszerűen döntenek el, hogy van-e kedvük összeöltözni (úgy, hogy a másik ne tudja meg döntésüket, mielőtt felöltözik!), akkor legfeljebb 75%-ban sikerülhet a céljuk. Egy stratégia erre szimplán az, hogy Alíz minden nap *kéket* húz, Béla meg *pirosat* – így csak akkor nem sikerül a céljuk, ha mindketten össze szerettek volna öltözni, ami pont 25% eséllyel történik meg.

Fantasztikus módon, ha Alíznek és Bélának hozzáférésük van egy kvantum forráshoz, ami összefonódott részecskepárokat oszt szét köztük (minden reggel egy párt), akkor a megfelelő mérésekkel ezt a játékot kb. 85% eséllyel tudják megnyerni. Mégpedig tegyük fel, hogy polarizációjukban összefonódott fotonpárokat oszt szét köztük a kvantum forrás, azaz  $(1/\sqrt{2})(|VV\rangle + |FF\rangle)$ , ahol  $V$  a vízszintes polarizációjú állapot,  $F$  meg a függőleges. Alíz a nála lévő foton polarizációját  $F$  irányban méri meg, ha van kedve összeöltözni és 45 fokkal elforgatott irányban, ha nincs. Béla pedig ezekhez képest átlósan, 22,5 fokkal vagy 67,5 fokkal állítja be polarizációs szűrőjét (lásd pl. [2]). A kimenetek függvényében (ilyen irányba volt-e a polarizáció vagy sem) vagy *kékbe* öltöznek, vagy *pirosba*. A megfelelő választások esetén minden bemenetelre éppen  $\cos^2(22,5^\circ) \approx 85\%$  esélyük van jól dönteni úgy, hogy közben nem is ismerték meg, hogy a másik személynek milyen kedve volt ébredéskor.

Ezt a játékot el lehet játszani mai kísérleti berendezésekkel, és ha sok kör után a körök háromnegyedénél valóban jelentősen többször nyernek a szerelmesek, akkor nem csupán valami kvantum fölényt tudnak felmutatni, hanem be is bizonyítják, hogy a mérések ki-

menetelei *véletlenszerűek*. Miért? Mert ha nem lennének véletlenszerűek, akkor már a mérés előtt le lehetett volna írni a kimenetet egy darab papírra (lehet, hogy Alíz és Béla nem tudnának erről a papírról, de le lehetne írni valahova egy titkos papírra). Viszont ha mindkét kimenetet le lehetett volna írni egy-egy darab papírra, akkor tulajdonképp nem is lett volna szükség a kvantumosan összefonódott kísérleti berendezésre, a két papírfecni azt teljesen helyettesíthetné. Viszont ha papírfecnikkel próbáljuk megnyerni a játékot, akkor klasszikus stratégiákat tudunk csak végrehajtani – azaz maximum 75% eséllyel nyerhetnénk!

Ennek a következményei elképesztően messzemenőek. Egyrészt, ha Alíznek és Bélának tényleg van szabad akaratuk, és összeöltözési kedvüket tényleg minden reggel egymástól függetlenül döntenek el, akkor tudnak valódi véletlen számokat generálni. Ráadásul a véletlen számok értéke akkor dől el, amikor megméri a kvantumos részecskéjüket. Viszont távoli országokban laknak, egy időben mérnek, és mérési eredményeik konzisztensek egymással, ezért valahogy *nemlokálisan* dőlnek el az eredmények. Sőt, mivel nem voltak előre eldöntve az eredmények, senki sem tudhat róluk. Akkor és ott jöttek csak létre a számok, amikor megmérték azokat – csak ők tudnak róluk. Azaz ezek a korrelált mérési eredmények titkosak, így tökéletes titkosításra is használhatóak. Mindehhez pedig csupán annyi kellett, hogy feljegyezzék a döntéseket és ruhaszíneket, és konstatálják, hogy jelentősen több mint 75% eséllyel nyernek – azaz nem is kellett jól ismerniük a kísérleti berendezés részleteit vagy fizikáját, úgymond műszertől függetlenül tudják a véletlenszerűségüket hitelesíteni.

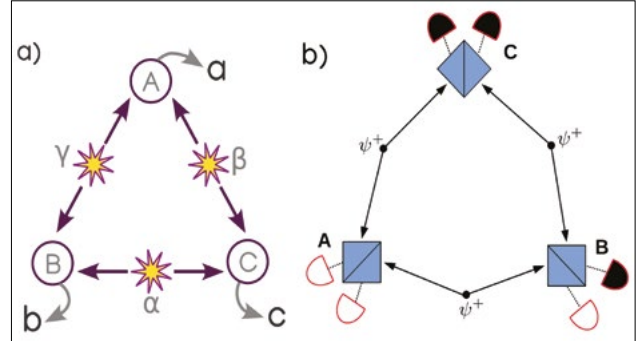
Néhány fontos tulajdonsága a Bell-nemlokalitásnak:

- Csak akkor lehet kvantumos előny, ha mindkét félnek a saját két mérése nem kommutáló, azaz nem felcserélhető. Ugye, ha megmérjük egy foton polarizációját a vízszintes-függőleges irány mentén, akkor azzal bele is kényszerítjük a kapott eredménybe. Ha megmérnénk utána átlós irány mentén, akkor a kapott értékek eloszlása más lehet, mint ha egyből átlós irány mentén mértünk volna. Matematikailag  $M_{ne}^a M_{legyszi}^b \neq M_{legyszi}^a M_{ne}^b$ , ezek Alíz  $a$  kimenetelének mérési projektorai.
- Véletlenszerűség csak akkor tudunk bizonyítani a kimenetekben, ha van valamilyen bemeneti véletlenszerűség is (hogy van kedv vagy nincs kedv az összeöltözéshez). Ha nem lenne véletlenszerű választás, akkor mindent szimulálni lehetne klasszikusan és újra papírcetlikkel elküldeni a feleknek.

## II. Hárman párban

Természetes kérdés, hogy mi van, ha hárman, vagy többben vannak. Lehetséges ebben a helyzetben valami erősebb korrelációt létrehozni, mint csak páronként eljátszani a Bell-játékot [5]? Ennek többféle változata is lehet, például, hogy akárhányan vannak is, egy közös kvantu-

mos forrástól kapnak részecskéket – ez viszonylag közvetlen általánosításhoz vezet. De tekintve, hogy technikailag sokkal egyszerűbb kétrészes összefonódást létrehozni, mint sokrészeset, azt is meg lehet vizsgálni, hogy mi van, ha csak páronként vannak összekötve kvantumos forrásokkal a résztvevők, mint a 2. ábrában. Már így többre vagyunk képesek, mint a sztenderd Bell-kísérletben?



2. ábra. (a) A háromszöghálózat, amelyben három résztvevő (A, B, C) páronként van összekötve egy-egy klasszikus vagy kvantumos kétrészecskeforrással ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ). Minden körben feldolgozzák a forrásból kapott jeleket, és kijelentik az egy bites végeredményüket ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ). (b) A kvantumos javaslat, amelyben a források egy-egy fotont a jobbra és balra küldés szuperpozíciójában állítanak elő, azaz  $\psi^+ = (1/\sqrt{2})(|01\rangle + |10\rangle)$  [3], vagy két fotonnal ugyanezt [4]. A résztvevők a beérkező fotonokat  $u^\pm \neq 0,5$  áteresztésű nyálábosztón való interferálás után mérik meg

Igen. Ha van három résztvevő, A, B, C, akik páronként osztanak meg egy erőforrást, akkor ők egy úgynevezett háromszöghálózatot alkotnak. Egy ilyen hálózatban a résztvevők úgy is tudnak a hagyományosnál erősebb korrelációkat létrehozni kvantumos forrásokkal, ha mindig csak ugyanazt a mérést végzik el. Azaz itt minden körben ugyanazt a mérést hajtják végre, nincsen mérési bemenet, mérési választás. Ez azért különös, mert a hagyományos Bell-nemlokalitás esetében a klasszikusnál erősebb korrelációk szükséges feltétele, hogy résztvevőnként *legalább kétféle* mérés legyen, amelyek nem kommutálnak. De itt elég egyfajta mérés. Matematikailag ezzel az egyfajta méréssel a három résztvevő a következő eloszlásból tud mintavételezni:

$$p(a, b, c) = \text{Tr}(\rho_a \otimes \rho_b \otimes \rho_c \cdot M_A^a \otimes M_B^b \otimes M_C^c), \quad (1)$$

ahol  $\rho_a$  jelzi az  $a$  forrás által kibocsátott állapotot,  $M_A^a$  pedig Alíz  $a$  kimenetelének mérési operátorát (projektorát), és hasonlóan a többieknek. Ezzel szemben klasszikus forrásokat (rejtett változókat) úgy lehet modellezni, hogy minden körben egy tetszőleges valós számot küldenek a két érintett félhez, ugyanis ebbe tetszőleges információt belekódolhatnak. Így a következő eloszlásból lehet klasszikusan mintavételezni:

$$p(a, b, c) = \int d\tilde{a} d\tilde{b} d\tilde{\gamma} P_A(a|\tilde{b}, \tilde{\gamma}) P_B(b|\tilde{\gamma}, \tilde{a}) P_C(c|\tilde{a}, \tilde{b}) \cdot P_a(\tilde{a}) P_b(\tilde{b}) P_\gamma(\tilde{\gamma}), \quad (2)$$

ahol  $P_a(\tilde{a})$  a valószínűsége, hogy az  $a$  forrás az  $\tilde{a}$  számot küldi B-nek és C-nek, illetve  $P_A(a|\tilde{b}, \tilde{\gamma})$  a valószínűsége,

hogy A az  $a$  kimenetet adja, ha  $\tilde{\beta}, \tilde{\gamma}$  értékeket kap a  $\beta, \gamma$  forrásoktól. Fontos észrevenni, hogy mindkét egyenletben a források függetlenségét feltételeztük, azaz pl.  $P(\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}) = P_a(\tilde{a})P_\beta(\tilde{\beta})P_\gamma(\tilde{\gamma})$ . Vegyük észre, hogy ez egy erős korlátozás a klasszikus modellekre vonatkozóan, amit azért teszünk, hogy egyértelmű legyen a kvantumos forrást használó protokoll „kvantumos előnye”.<sup>1</sup>

No, és mi az a kvantumos mérés, ami olyan eloszláshoz vezet, ami hagyományosan nem elérhető? Az első javaslatok a szokásos Bell-állapotokat osztották szét a résztvevők között, és Bell-méréseket végeztek velük. Meglepő módon ez sajnos olyan korrelációkhoz vezetett, melyeket könnyen reprodukálni tudtak klasszikus modellek. Viszont ha  $|01\rangle + |10\rangle$  állapotokat osztanak szét a felek között, és a résztvevők a két bejövő módusukon a következő összefonó bázisban hajtanak végre mérést (ahol  $u^2 \in (0, 5, 1)$ ,  $u^2 + v^2 = 1$ ),

$$\begin{aligned} & \{|00\rangle, |11\rangle, \\ & u|01\rangle + v|10\rangle, \\ & v|01\rangle - u|10\rangle\}, \end{aligned} \quad (3)$$

akkor a korrelációk az (1) egyenlet szerinti eloszlásban olyan erősek, hogy a korrelálatlan klasszikus forrásokkal nem lehet reprodukálni ezeket [6–8] (Fotonokkal ez meg is valósítható, lásd IV. szakasz). Sőt, az is megmutatható, hogy ha ezt az eloszlást tapasztaljuk a laborban, akkor feltéve, hogy a források függetlenek egymástól, összefonódott részecskepárok kellettek, hogy legyenek szétosztva, valamint a mérések is összefonó mérések kellett, hogy legyenek. Ezekre építve meg lehet mutatni, hogy valódi véletlenszerűség van a mérési kimenetekben egy ilyen helyzetben is [9].

Mik a következményei ennek? A fenti példában csak egy fix bázisban végezte minden fél a mérését, ezért

- nem kommutáló mérések nem szükségesek a nemlokalitáshoz, és
- bemeneti véletlenszerűség nem szükséges ahhoz, hogy véletlenszerű számokat generáljunk.

Viszont fontos kiemelni, hogy a források függetlenségét feltételeztük. Így olyasfajta kiskapumentes kísérletet nem fogunk tudni végrehajtani, amelyet a hagyományos Bell-kísérleteknél lehetett. Ott ugyanis, ha a két résztvevőt elég távol vittük egymástól, akkor garantálni lehetett, hogy az egyik bemenetéről ne tudjon a másik, és vice versa, feltéve, hogy a bemeneteket tudják valódi véletlenszerűséggel generálni (ezt gyakran a szabad akarat feltételezésének hívjuk). A fenti háromszereplős esetben viszont akármilyen távol visszük is egymástól a szemé-

lyeket, a három forrás függetlenségét ez nem befolyásolja – a távoli múltban akár lehetne is egy központi hatás, ami korrelálja a három forrást, így egy ilyesfajta központi rejtett változó meg tudná magyarázni a kvantumkorrelációinkat is. Így maradunk abban a helyzetben, hogy a klasszikus források függetlensége feltételezés marad, hasonlóan, ahogy a szabad akarat feltételezését is meg kellett tartani a hagyományos Bell-kísérletben.

Összességében egy sor érdekes elméleti vonatkozása van a háromszöghálózatnak. Ezzel párhuzamosan szép lassan kezd kirajzolódni egy kép, hogy csupán kétrészcskés kvantumforrásokkal nagyobb kvantumhálózatokon is erős többszereplős korrelációkhoz lehet jutni. Viszont két nagy kérdés maradt még ebben a témában, amelyeket igyekszünk megválaszolni.

1. Lehet-e alkalmazásokat építeni a hálózati nemlokalitásra?
2. Meg lehet valósítani a hálózati nemlokalitást kísérleti körülmények között?

### III. Alkalmazás nagy hálózatokon

A Bell-nemlokalitás legtöbb kriptográfiai alkalmazása azon a tényen alapul, hogy a kimenetek bizonyíthatóan véletlenszerűek, feltéve, hogy a bemenetek (ne, légszi) egy potenciális rejtett változótól vagy támadótól függetlenek. Azaz fontos, hogy valamennyire meg tudjunk bízni a bemeneti választásokat generáló folyamatban, tipikusan egy véletlenszám-generátorban. Kérdés, hogy a bemenet használatát el lehet-e kerülni a kriptográfiában azzal, hogy a fentiekben leírt hálózati nemlokalitást használjuk.

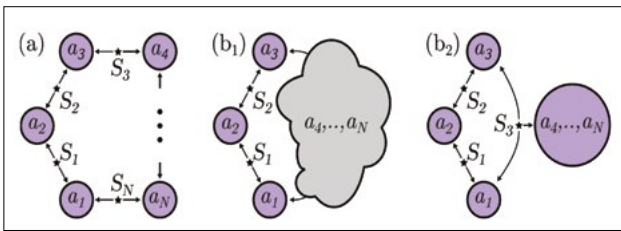
Kiderül, hogy igen, a háromszöghálózat kimenetei is bizonyíthatóan véletlenszerűek, persze továbbra is a hálózati feltételezéssel élve [9]. Azaz fel kell tenni, hogy nincsen egy központi rejtett változó, hanem ha léteznek, akkor a rejtett változók is tiszteletben tartják a háromszögstruktúrát (minden forrás helyére egy klasszikus rejtett változót képzelünk, (2) szerint), és függetlenek egymástól. Van létjogosultsága ennek a feltételezésnek? Meggyőződésünk, hogy van, ha kriptográfiai alkalmazások irányába megyünk. Mert mi is a szerepe a rejtett változónak? Az egy olyan dolog, ami meg próbálja határozni a kimenetek értékét ahelyett, hogy azt kvantumos véletlenszerűség döntené el. Azaz nagyon hasonlít egy kriptográfiai támadóra, hekkerre, aki megpróbál beavatkozni abba, ahogy a véletlen számokat generáljuk, és megpróbálja ő eldönteni, hogy mik a mi kimeneteink – mindezt a tudtunk nélkül. Ilyen értelemben tekinthetünk a hálózatban a rejtett változókra hekkereként, és a függetlenségi feltételezés arra vonatkozik, hogy a hekkerek együttműködnek-e.

Így a hálózati függetlenség kérdése átalakul azzá, hogy fel lehet-e tenni, hogy a potenciális támadók, hekkerek, korlátozottan férnek hozzá a hálózathoz, és nem működnek mind együtt. Egy kis háromszög-

<sup>1</sup> Egy másik alternatíva lenne, ha azt próbálnánk megmutatni, hogy ilyen kvantumos forrásokból származó korrelációkat semmilyen elképzelhető klasszikus rejtett változó nem tud megmagyarázni. Ekkor a klasszikus modell  $p(a, b, c) = \int d\lambda p(a|\lambda)p(b|\lambda)p(c|\lambda)p(\lambda)$  formát öltene. Ez viszont olyan erős, hogy bármilyen korrelációt képes előállítani, így a bemenetek nélküli hálózatokban nincs értelme ezzel szembesíteni a korlátozott kvantumos korrelációkat.

hálózatban nehéz megindokolni, hogy miért dolgozna külön három kis hekker a három forrás helyén. De ha lépünk egy nagyot, és megvizsgálunk egy  $N$  fős hálózatot, máris más képet kaphatunk. Legyen az  $N$  fő egy gyűrűn úgy, hogy páronként vannak közös kvantumos forrásuk. Akkor minden forrás kibocsátja a  $|01\rangle + |10\rangle$  állapotot, és minden fél elvégzi a szokott (3) méréseket. Ismétlések esetén egy  $p(a_1, a_2, \dots, a_N)$  eloszlásból mintavételezünk, amit le is tudunk ellenőrizni magunknak, ha sokszor elismételjük, és minden fél kijelenti a kimenetét minden körben. Sikerült megmutatnunk, hogy ez esetben [10]:

- Ha minden forrás helyére egy hekker kerül, akik függetlenül működnek egymástól (3. ábra (a) topológia), akkor nem tudják a  $p(a_1, a_2, \dots, a_N)$  eloszlást reprodukálni (azaz az eloszlás hálózat-nemlokális).
- Ha az  $N$  hekkerből  $N - 2$  szomszédos összedolgozik (3. ábra (b1) topológia), akkor sem tudják a  $p(a_1, a_2, \dots, a_N)$  eloszlást reprodukálni (azaz az eloszlás nemlokálisítása robusztus a hálózat topológiájával szemben).
- Még akkor is, ha van  $N - 2$  szomszédos hekker (a 3. ábra (b2) topológiájának megfelelő módon), az  $a_2$  kimenetel véletlenszerű.



3. ábra. (a)  $N$  résztvevő esetén a gyűrű hálózaton mintavételezhetünk egy  $p(a_1, a_2, \dots, a_N)$  eloszlásból, ha kvantumosak a források. Ha a forrásokat nem együttműködő támadókra cseréljük ebben a gyűrűben, akkor nem tudják befolyásolni a kimeneteket úgy, hogy ne vennénk észre. (b1) Ha a hálózat nagy részében ismeretlen, hogy együttműködnek-e a támadók, akkor sem tudják úgy befolyásolni a kimeneteleinket, hogy ne vennénk észre. (b2) A hálózat ismeretlen részét modellezhetjük egy nagy együttműködő félként, így visszanyerünk egy (bővített) háromszög-topológiát [10]

Ez elképesztően leegyszerűsíti és kriptográfiai értelemben lehetővé teszi a nagy hálózatokban való működést. Ugyanis ha  $N$  résztvevőnk van, elég, ha csak egy kis hálózatrészben bízunk meg, úgy is tudunk nemlokálisítást, véletlenszerűséget bizonyítani. Azaz nem kell feltételeznünk, hogy a hálózatot támadók csak lokálisan hekkelnék, és nem is működnek együtt. Nyugodtan összedolgozhat majdnem az összes hekker és résztvevő (3. ábra (b1)). Ebből kiindulva fejlesztünk jelenleg egy kriptográfiai protokollt, amely

- nem igényel bemeneti véletlenszerűséget,
- minimális tudást igényel a hálózat topológiájáról,
- műszerfüggetlen,
- $M < N$  résztvevő közt létrehoz egy titkos kulcsot.

## IV. Kísérleti megvalósítás neurális hálók segítségével

Általánosságban nehéz eldönteni, hogy egy adott  $p(a, b, c)$  eloszlásnak van-e (2) szerinti felbontása. A hagyományos, egyforrásos Bell-kísérletnél ez egy könnyen megválaszolható kérdés, ugyanis a klasszikus korrelációk egy konvex politópot alkotnak, így elég ennek extrémális pontjait karakterizálni. Ezzel szemben (2) egy nem konvex halmazt ír le, így annak még a numerikus feltérképezése is nehézkes hagyományos heurisztikus módszerekkel. Ezért gondolkodtunk el azon, hogy esetleg modernebb eszközökkel lehet-e valahogy kezelni a problémát. Arra jutottunk, hogy ha egy mesterséges neurális hálót átalakítunk, hogy alakja tükrözze a hálózat topológiáját, akkor az szükségszerűen csak a hálózaton lokális (klasszikus) eloszlásokat tud előállítani. Ezzel a lokális eloszlásokat fel tudjuk térképezni: megadunk egy céleloszlást, és megkérjük a neurális hálót, hogy alakítsa a súlyait úgy, hogy minél inkább megközelítse ezt a céleloszlást. Ha sikerül neki, akkor van egy explicit klasszikus modellünk. Ha viszont konzisztensen, többszöri próbálkozásra sem sikerül közel kerülnie, akkor az erős indikáció arra nézve, hogy a céleloszlás nemlokális, nincsen klasszikus magyarázat [7].

A neurális háló így kiváló társa az elméleti kutatónak, ugyanis bármilyen ötletünk van egy céleloszlásra, az algoritmus megmondja, hogy szerinte az nemlokális-e. Sőt, nemcsak egy adott céleloszlást tudunk célba venni, hanem megkérhetjük, hogy egy sejtett Bell-egyenlőtlenséget próbáljon megsérteni [11]. Így sikerült is néhány sejtést felállítani, amelyek közül egyet be is bizonyítottak [8].

A neurális hálónk (LHV-Net) mindmáig az egyetlen praktikus is használható algoritmus, ami megbecsüli, hogy egy adott kvantumos stratégia mekkora zajt képes elviselni úgy, hogy még nemlokális maradjon. Ez kifejezetten fontos kérdés, amikor nemcsak az elméletet vizsgáljuk, hanem a kísérletek felé fordulunk. Már van is olyan háromszög-nemlokális kísérlet, aminek a kiértékeléséhez az LHV-Netet használták, illetve sikerült is az imént felállított egyenlőtlenségeket megsérteniük [12].

Ehhez a kísérlethez muszáj volt a végeredményeket utólag, globálisan feldolgozni, és leszűrni ezekből, hogy milyen lett volna az eloszlás, ha minden foton megérkezett volna. Sajnos viszont ilyen globális feldolgozás (ahol pl. selejtezzük egy kört, ha nem érkezett meg elég foton mondjuk, Alízhoz) nagyon erős, sőt tetszőleges korrelációkat is létre tud hozni a három résztvevő között klasszikus forrásokkal is,<sup>2</sup> tehát egy szigorú kísérleti eljárásnál ez nem lenne megengedhető. Így jutunk el a hálózati

<sup>2</sup> Képzeltük el például, hogy három klasszikus forrás csak random küld egy bitet (0-t vagy 1-et) mindkét félhez. A felek globális feldolgozással elvetik azokat a köröket, amelyekben nem  $a = b = c = 0$  vagy  $a = b = c = 1$  volt a kimenetel, így elképesztően erős korrelációhoz jutnak.

nemlokalitás második nagy kérdéséhez: meg lehet-e valósítani a laborban, lehetőleg optikával, ami nagy távolságokon is használható?

A hálózati nemlokalitás kísérleti megvalósítását keresve kitaláltunk egy optikai elrendezést, ami könnyen megvalósítható lenne:  $|01\rangle + |10\rangle$  állapotokat bocsátanak ki a források, és ezek nyalábosztókra érkeznek, majd megmérjük, hogy érkezett-e foton (2. ábra). Megkérdeztük az LHV-Netet, hogy nemlokális-e a javasolt kísérletből származó eloszlás. Hamar megtudtuk, hogy igen, így tudtuk, hogy megéri ráfordítani az időt és energiát, hogy bebizonyítsuk a nemlokalitását. Ez sikerült is, és az elméleti vizsgálat során kiderült, hogy ez gyakorlatilag optikai megvalósítása a (3) mérésnek [3]. Ez egy gyönyörű optikai értelmezését is adja annak a helyzetnek, ahol a kvantumelőny abból származik, hogy bizonyos kimeneteleknél (azoknál, amikor minden félhez egy foton érkezett) a fotonok annak szuperpozíciójában vannak, hogy mind jobbra, mind balra mentek a hálózatban, azaz a globális állapot ekkor

$$\Psi \propto |\odot\rangle + |\oslash\rangle. \quad (4)$$

Klasszikusan vagy az egyik, vagy a másik irányba haladva tudnának eljutni az összes résztvevőhöz.

Sajnos az is kiderült, hogy ha vannak veszteségek az optikai módusokban vagy a mérési berendezésben, akkor nagyon hamar elhal a nemlokalitás, körülbelül 5% veszteséget tűr el (elméleti úton bizonyítottan csak kb. 0,5%), ami messze a szükséges kísérleti küszöb alatt van. Ennek javítására kicsit módosítottunk az elrendezésen: nem  $|01\rangle + |10\rangle$  állapotokat küldetünk a forrásokkal, hanem  $|02\rangle + |20\rangle$  állapotokat, azaz két fotont. Kísérletileg ezek az állapotok is még „könnyen” megvalósíthatóak, és az LHV-Net azt súgta nekünk, hogy így is nemlokális az eloszlás (ugyanazokat a nyalábosztókat használva), sőt a hibátűrése sokkal jobb, akár 50% veszteséget is képes elviselni. Elméleti munkával precízen is sikerült bebizonyítani az eloszlás nemlokalitását, illetve azt is, hogy egyfotonos veszteségek ellen 10%-os hibát képes eltűrni. Ráadásul megadtunk egy módszert, hogy hogy lehet elkerülni a globális utólagos feldolgozást. A robusztusság nagyságrendileg jobb, mint az egyfotonos sémában, ami megnyitja az utat a kiskapumentes kísérletek előtt [4].

## V. Végszó

Összefoglalva, a kvantum hálózatokban vizsgálva a nemlokalitást meg tudjuk alapozni a jövő kvantum internetének kriptográfiai protokolljait, miközben érdekes kérdéseket vizsgálhatunk a kvantumfizika alapjairól. Az egyik legérdekesebb tény az, hogy nem kell többfajta (nem kommutáló) mérés ahhoz, hogy tanúsítványt állítsunk ki véletlenszerűségről és összefonódottságról, ha

hajlandóak vagyunk a hálózatról bizonyos dolgokat feltételezni. Kutatásunk folytatásaképp ezeket a szükséges feltevéseket vizsgáljuk jobban: nagy hálózatok esetén elég, ha csak egy kis részét ismerjük jól a hálózatnak, úgy is lehet tanúsítani véletlenszerűséget és arra kriptográfiai protokollokat építeni. Ehhez kicsit át kell formálnunk a gondolkodásunkat, jobban közelítve az elosztott számítás, decentralizált rendszerek mentalitásához. Végül az elméleti és alkalmazott vonatkozások mellett egy egészen érdekes matematikai és numerikus feladvánnyal is jár a lokális korrelációk feltérképezése [11], ami egy Rubik-kocka- vagy sudokuszerű feladvány.

## Irodalom

1. Asbóth János: A 2022. évi nobel-díj: a kvantumösszefonódás, a „kísérteties távolhatás” kísérleti igazolása. *Fizikai Szemle*, LXII/11, (2022) 341–346. <https://fizikaiszemle.elft.hu/szemle/110>
2. Takács Gábor: Van-e távolhatás a kvantumelméletben? *Fizikai Szemle*, LXIX/2, (2019) 43–50. <https://fizikaiszemle.elft.hu/szemle/46>
3. Paolo Abiuso, Tamás Kriváchy, Emanuel-Cristian Boghiu, Marc-Olivier Renou, Alejandro Pozas-Kerstjens, Antonio Acín: Single-photon nonlocality in quantum networks. *Physical Review Research*, 4(1), (2022) L012041. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.L012041>
4. Tamás Kriváchy, Martin Kerschbaumer: Closing the detection loophole in the triangle network with high-dimensional photonic states. *arXiv:2503.24213*, (2025). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2503.24213>
5. Armin Tavakoli, Alejandro Pozas-Kerstjens, Ming-Xing Luo, Marc-Olivier Renou: Bell nonlocality in networks. *Reports on Progress in Physics*, 85(5), (2022) 056001. <http://doi.org/10.1088/1361-6633/ac41bb>
6. Marc-Olivier Renou, Elisa Bäumer, Sadra Boreiri, Nicolas Brunner, Nicolas Gisin, Salman Beigi: Genuine quantum nonlocality in the triangle network. *Phys. Rev. Lett.*, 123, (2019) 140401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.140401>
7. Tamás Kriváchy, Yu Cai, Daniel Cavalcanti, Arash Tavakoli, Nicolas Gisin, Nicolas Brunner: A neural network oracle for quantum nonlocality problems in networks. *npj Quantum Information*, 6(1), (2020) 1–7. <https://doi.org/10.1038/s41534-020-00305-x>
8. Alejandro Pozas-Kerstjens, Nicolas Gisin, Marc-Olivier Renou: Proofs of network quantum nonlocality in continuous families of distributions. *Physical Review Letters*, 130(9), (2023) 090201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.130.090201>
9. Pavel Sekatski, Sadra Boreiri, Nicolas Brunner: Partial self-testing and randomness certification in the triangle network. *Phys. Rev. Lett.*, 131, (2023) 100201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.131.100201>
10. Sadra Boreiri, Tamás Kriváchy, Pavel Sekatski, Antoine Girardin, Nicolas Brunner: Topologically robust quantum network nonlocality. *Phys. Rev. Lett.*, 134, (2025) 010202. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.134.010202>
11. Elisa Bäumer, Victor Gitten, Tamás Kriváchy, Nicolas Gisin, Renato Renner: Exploring the local landscape in the triangle network. *Phys. Rev. A*, 111, 052453, (2025). <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.111.052453>
12. Ning-Ning Wang, Chao Zhang, Huan Cao, Kai Xu, Bi-Heng Liu, Yun-Feng Huang, Chuan-Feng Li, Guang-Can Guo, Nicolas Gisin, Tamás Kriváchy, Marc-Olivier Renou: Experimental genuine quantum nonlocality in the triangle network. *arXiv:2401.15428*, (2024). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2401.15428>

# ÚJ PERSPEKTÍVÁK A KVANTUMOS RENDSZEREK KLASSZIKUS SZIMULÁCIÓJÁBAN

Werner Miklós Antal<sup>®</sup>, Kapás Kornél  
HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest  
E-mail: werner.miklos@wigner.hun-ren.hu

## Bevezetés

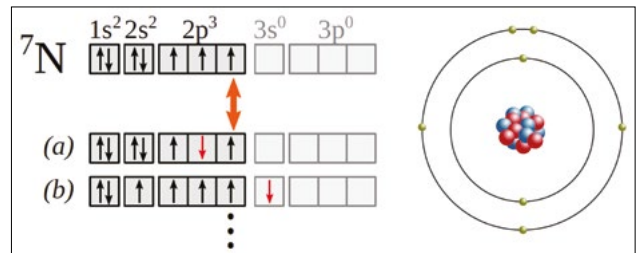
A fizika tudományában az elmúlt évszázadban történt elképesztő fejlődés egy jelentős része a mikroszkopikus világ egyre pontosabb megértéséhez kapcsolódott. Megtudtuk: az atomok, molekulák, atommagok és az ezeket alkotó szubatomi részecskék világában a klasszikus fizika törvényei érvényüket veszítik, megkerülhetetlenné válik a természet kvantum viselkedése. A kvantumelmélet kutatása és egyre precízebb megértése azonban nem csupán rendkívül érdekes tudományos feladat, hanem különféle technológiai alkalmazások sorát teszi lehetővé. Gondolhatunk itt többek között az atomenergiára vagy különféle elektronikai eszközeinkre, melyek nélkül ma már szinte elképzelhetetlenek a mindennapjaink.

A több részecskét tartalmazó rendszerek viselkedésének megértése a kvantummechanika születése óta komoly kihívások elé állítja a fizikusközösséget. Analitikus, akár papíron elvégezhető számítások csupán közelítésként, illetve nagyon kicsiny vagy speciális modellrendszerekre alkalmazhatóak. Numerikus szimulációk futtathatóak hagyományos számítógépeken, de mint majd látjuk, a hatalmas állapottér – „a dimenzionalitás átká” – igencsak megnehezíti a dolgunk. Nem véletlenül idézzük gyakran Feynmant, aki szerint a természet igazán hatékony szimulációjára csak kvantum eszközökkel lehet reményünk [1], melyekben megvalósíthatóak, kontrollálhatóak és manipulálhatóak az összefont sokrészecskés állapotok. Valóban, a kvantumchipek megvalósítása terén az utóbbi évtizedben tapasztalt ugrásszerű fejlődés azzal kecsegtet, hogy a közeli jövőben alkalmassá válhatnak valódi fizikai rendszerek precíz szimulációjára [2]. Amíg azonban eljön az ún. „kvantumfölény” ideje, hagyományos (úgymond klasszikus, azaz nem kvantum-) számítógépekre kell hagyatkoznunk, és mint jelen cikkünkben is mutatjuk, bőven vannak még lehetőségek a klasszikus algoritmusok fejlesztése terén is. Ráadásul a klasszikus számítógépek nagyobb flexibilitása a kvantum hardverekhez képest előreláthatólag hosszabb távon is meg

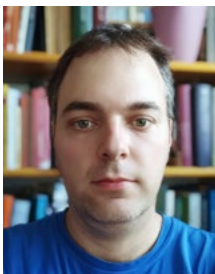
fog maradni, ezért az is elképzelhető, hogy a jövő a hibrid kvantum-klasszikus megoldásoké lesz, ahol továbbra is lényeges feladat hárul majd a klasszikus algoritmusainkra. Kutatócsoportunkban, a Legeza Örs által vezetett Erősen Korrelált Rendszerek „Lendület” Kutatócsoportban éppen ilyen kiemelkedően hatékony klasszikus algoritmusok kutatásával foglalkozunk.

## Kvantumos soktestrendszerek

A fent vázolt szimulációs nehézségeket, *nevezetesen a hatalmas állapottér problémáját*, először egy mindenki által jól ismert kvantumrendszeren, a nitrogénatom példáján mutatjuk be, melynek leggyakoribb izotópjá egy 7 protonból és 7 neutronból álló atommagot, valamint 7 elektront tartalmaz. A nehéz atommagot összetartó erők sok nagyságrenddel erősebbek az elektronokat pályán tartó Coulomb-kölcsönhatásnál, amit kihasználva azonnal közelítést alkalmazunk: a magot klasszikus golyónak képzeljük, mely csupán vonzó potenciáljával hat az elektronokra. A feladatunk tehát 7 elektron együttes kvantumállapotának megadása vonzó Coulomb-potenciálban. Ez a probléma már középiskolai kémiaórákon terítékre került. *A különböző fő-, mellék- és mágneses kvantumszámú pályák betöltési sorrendjével*, valamint a spinekre vonatkozó Hund-szabállyal mindenki találko-



1. ábra. A nitrogénatom elektronszerkezetének középiskolában tanult konfigurációja. A valóságos kvantumállapotban egyéb konfigurációk, például (a) és (b) megjelenhetnek kis amplitúdóval, bár az alapállapotban az (a) konfiguráció nem ad járulékot, hiszen teljes spinje eltér az alapállapotétól



Werner Miklós Antal a HUN-REN Wigner FK Elméleti Szilárdtestfizikai Osztályának tudományos munkatársa, a Legeza Örs által vezetett Erősen Korrelált Rendszerek Kutatócsoport tagja. Fő kutatási témája a nyílt és zárt kvantumrendszerek stacionárius és időfüggő állapotainak tenzorhálózat-alapú szimulációja.



Kapás Kornél doktori fokoztatát az ELTE-n szerezte a kvantum-színdinamika rácsszimulációinak témakörében dr. Katz Sándor témavezetése alatt, majd csatlakozott a HUN-REN Wigner FK Elméleti Szilárdtestfizikai Osztályának, Legeza Örs által vezetett Erősen Korrelált Rendszerek Kutatócsoportjához, ahol többek között az erősen korrelált kvantummechanikai rendszerek dinamikájának szimulációival foglalkozik.

zott, melyek alapján az elektronfelhő szerkezete felírható (1. ábra). Ez az egyszerűnek tűnő kép az igen durva, ámbar hatékony Hartree–Fock-féle átlagtér-közelítés eredménye, ahol megköveteljük, hogy az egyes elektronpályák betöltöttsége pontosan 0 vagy 1 legyen.<sup>1</sup> Az atom alapállapotát ebben a közelítésben variációs elv alapján lehet definiálni: az egyes elektronpályák alakját változtatgatva keressük azt a konfigurációt, ahol az alapállapot energiája (várható) értéke a legkisebb, miközben a pályák betöltöttsége változatlan marad. Az így nyert megoldással azonban több probléma is van: ez az állapot nem megoldása az időfüggetlen Schrödinger-egyenletnek, azaz nem sajátállapota a rendszer Hamilton-operátorának, ami azt jelenti, hogy az energia várható értéke az alapállapot energiánál magasabb. Az úgynevezett kémiai pontosságot, melynek elérésére szükség van ahhoz, hogy kémiai folyamatokat elfogadható pontossággal modellezzünk, általában 4 kJ/mol értékben definiálják.<sup>2</sup> A Hartree–Fock-elmélet hibája ennél sajnos nagyjából három nagyságrenddel magasabb, ezért lényeges pontosításra szorul.

A Hartree–Fock-megoldásból kiindulva pontosabb elméletet építhetünk úgy, hogy az alapkonzfiguráción túl megengedünk más betöltöttségű konfigurációkat is (1. ábra a és b konfiguráció). A legpontosabb leírást úgy nyerhetjük – rögzített atommagokat feltételezve –, ha minden lehetséges betöltöttségű konfigurációt megengedünk (ún. teljes konfigurációs kölcsönhatás, full-CI leírás), a sok-elektronos hullámfüggvényt pedig az összes konfiguráció lineáris szuperpozíciójaként keressük. Az így magunk elé tűzött számítási feladat azonban rettentő nehéz: ha az egyes elektronok által elfoglalható pályák végtelen számát valamely véges  $N$  értékre korlátozzuk is, az állapotterünk dimenziója  $2^N$  lesz, ami viszonylag hamar ( $N \gtrsim 30$ – $40$ ) kezelhetetlenné válik akkor is, ha megmaradási tételek (elektronszám, spin) segítségével a megfelelő alterekre korlátozzuk a számolást. Ha például  $n$  elektront tekintünk  $N$  pályán, úgy a megfelelő részecskeszámú altér dimenziója csupán  $\binom{N}{n}$ , ez azonban még mindig nagyon gyorsan nő  $N$  és  $n$  függvényében. Ez a méltán hírhedt jelenség a „dimenzionalitás átka”, melyet többféle úton igyekezett a fizikus- és kémikusközösség megkerülni vagy megoldani, így ma már számos módszer áll rendelkezésünkre, melyek közül ebben a cikkben az ún. mátrixszorzat-állapotok (MPS) kerülnek terítékre. Minden közelítő módszerben közös, hogy a sokelektronos hullámfüggvényt a közvetlen felíráshoz képest lényegesen kevesebb paraméter segítségével próbáljuk jellemezni, több-kevesebb sikerrel.

## Mátrixszorzat-állapotok

A fenti gondolatmenetet követve, a sokelektronos hullámfüggvényt az alábbi alakban keressük

<sup>1</sup> Cikkünkben az egyszerűség kedvéért az azonos térbeli, de eltérő spinű elektronállapotokat külön pályának tekintjük.

<sup>2</sup> Ez az érték részecskénként nagyságrendileg  $k_B T$  energiabizonytalanságnak felel meg, ahol  $k_B$  a Boltzmann-állandó és  $T \approx 300$  K a szobahőmérséklet.

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N} C_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle, \quad (1)$$

ahol  $\sigma_i \in \{0, 1\}$  jelöli az  $i$ -edik pálya betöltöttségét a  $|\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle$  konfigurációban, és a  $C_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N}$  kifejtési együtthatók (amplitúdók) jellemzik a hullámfüggvényt a  $2^N$  dimenziós állapotterben. Célunk ezen amplitúdók meghatározása az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet ( $H|\Psi\rangle = E_0|\Psi\rangle$ ) megoldásán keresztül, azaz megkeresve a  $H$  Hamilton-operátor  $|\Psi\rangle$  alapállapotát, ahol

$$H = \sum_{i,j=1}^N T_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{i,j,k,l=1}^N V_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l. \quad (2)$$

Itt az  $i, j, k, l$  indexek az egy elektron által elfoglalható  $N$  lehetséges pályát jelölik. A  $c_i^\dagger$  és  $c_i$  operátorok az elektronokat keltő és eltüntető operátorok, melyek (az ún. fermionikus előjeltől eltekintve) csupán a  $\sigma_i$  betöltöttséget változtatják 0-ról 1-re és viszont, és ezzel átmeneteket hoznak létre a különféle konfigurációk között. A  $T_{ij}$  és  $V_{ijkl}$  súlyok az elektronok kinetikus és potenciális energiáját jellemzik, őket az elektronpályák térbeli alakjának ismeretében lehet meghatározni.

A fenti megközelítés nehézségét a  $C_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N}$  együtthatók nagy száma adja. Bár megmaradási tételekkel ez a szám valamelyest csökkenthető, a releváns dimenzió még így is kezelhetetlenül gyorsan nő általában a megengedett pályák számával. A tenzorszorzat-állapot (TNS), és ezen belül a mátrixszorzat-állapot (MPS) megközelítések alapötlete, hogy a sokindexes  $C_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N}$  együtthatót kisebb mátrixok (tenzorok) szorzataként írhatjuk fel. Alább látni fogjuk, hogy ez a felírás kiválóan alkalmas az állapot hatékony tömörítésére. Mátrixszorzat-állapotok esetén ez a

$$C_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N} = \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_{N-1}} A_{\alpha_1}^{[1]\sigma_1} A_{\alpha_1 \alpha_2}^{[2]\sigma_2} \dots A_{\alpha_{N-2} \alpha_{N-1}}^{[N-1]\sigma_{N-1}} A_{\alpha_{N-1}}^{[N]\sigma_N} \quad (3)$$

alakot jelenti, mely alakot a könnyebb megértés érdekében gráfok segítségével szoktunk ábrázolni, ahogy a 2a. ábrán is látható. A különféle sokindexes mennyiségeket (tenzorokat) egy síkidommal (körrel, téglalappal stb.) reprezentáljuk, az indexeket pedig a síkidomból kilógó vonalak (lábak) jelölik. Ha két tenzor lábait összekötjük, akkor az adott indexre összegzést írunk elő. A 2a. ábrát összevetve a (3) egyenlettel láthatjuk, hogy a három- (illetve két végén két-) indexes  $A^{[i]}$  tenzorok a vízszintes lábakkal megfelelő  $\alpha_i$  indexek szerint fel vannak összegezve.

A mátrixszorzat-állapot leírásának tömörítése abban áll, hogy az  $\alpha_i$  indexek lehetséges értékeit megszorítjuk:  $\alpha_i \in \{1, 2, \dots, M\}$ , ahol  $M$  az úgynevezett virtuális dimenzió, vagy „bond” dimenzió, így a  $C_{\sigma_1 \dots \sigma_N}$  együtthatót  $2NM^2 \ll 2^N$  paraméterrel jellemeztük. A tömörítés mértékét az  $M$  dimenzió megválasztása határozza meg. Speciális esetként, amennyiben az  $N$  pályát a korábban bevezetett Hartree–Fock-elmélet alapján választottuk, a Hartree–Fock-megoldás egy  $M = 1$  dimenziójú mátrixszorzattal, azaz egyszerű szorzatállapotként írható fel. Ebben az esetben a (3) formulában nincs felösszegezés, és a  $C$  mennyiség egyetlen konfigurációra lesz 1, a többire

zérus.<sup>3</sup>  $M > 1$  esetén azonban több konfiguráció amplitúdója – akár az összesé is – zérustól különböző lehet. A mátrixszorzat-állapot alakon túl az irodalomban más tenzorhálózat-állapotokat is bevezettek, például a  $2c$ - $d$ . ábrán az MPS kétdimenziós, illetve fagráf általánosítását mutatjuk [5].

Természetesen merül fel a kérdés, hogy mennyire hatékonyan tudunk így tömöríteni, azaz mekkora bond dimenziót ( $M$ -et) kell válasszunk a hullámfüggvény számunkra elfogadható közelítéséhez? Feltéve egy pillanatra, hogy ismerjük a  $C_{\sigma_1 \dots \sigma_N}$  együtthatókat, az indexeket két csoportra osztva ( $\sigma_1 \dots \sigma_i | \sigma_{i+1} \dots \sigma_N$ ), meghatározhatjuk a  $C$  tenzornak a lineáris algebrából ismert szingulárisérték-dekompozícióját,

$$C_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N} = \sum_{\alpha=1}^{2^{\min(i, N-i)}} U_{(\sigma_1 \dots \sigma_i) \alpha} \lambda_{\alpha} V_{(\sigma_{i+1} \dots \sigma_N) \alpha}. \quad (4)$$

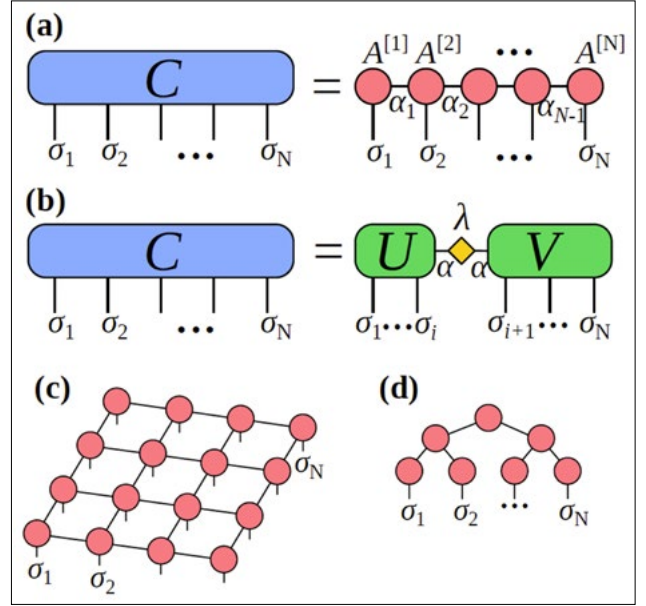
A  $\lambda_{\alpha} \geq 0$  számok az ún. szinguláris értékek, míg az  $U$  és  $V$  tenzorok különböző  $\alpha$ -hoz tartozó „oszlopai” az ún. szinguláris (egység-)vektorok. A  $C$  együttható közelíthető, ha a csökkenő sorrendbe rendezett  $\lambda_{\alpha}$  sorozatnak csupán a legelső  $M$  tagját tartjuk meg, és ennek megfelelően a (4) formulában az összeg csak  $M$  tagból fog állni. Az elhanyagolt  $\lambda_{\alpha > M}$  súlyok négyzetösszegét csonkolási hibának nevezzük, ez jellemzi a közelítésünk pontosságát. Az  $U$  és  $V$  tenzorok további sorozatos dekompozíciójával és csonkolásával nyerhetjük a (3)-ban szereplő mátrixszorzat alakot. A dekompozíciók természetesen csonkolás nélkül is végrehajthatók, azaz a (3) felbontás precízen (csonkolási hiba nélkül) elvégezhető tetszőleges  $C$  együtthatóra, ha kellően nagy  $M$ -et választunk.

Az adott pontossághoz szükséges  $M$  és a csonkolási hiba összefüggésbe hozható a kvantuminformációelméletben alapvető jelentőségű Neumann-entrópiával, amit az elektronállapotok általunk vizsgált felosztására a

$$S = - \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 \ln(\lambda_{\alpha}^2) \quad (5)$$

formula definiál. Ez a mennyiség a sokelektron-hullámfüggvény kvantumos összefonódását jellemzi: a nagyobb entrópia erősebb összefonódást jelent, ami egyben szükségessé teszi nagyobb  $M$  dimenzió alkalmazását is. Ennek megfelelően a mátrixszorzat-közelítés akkor alkalmazható a leghatékonyabban, ha a sokelektron-hullámfüggvény összefonódása kicsi.

Nem véletlen, hogy a sűrűségmátrixos renormálás-csoport-módszert (DMRG), amely az egyik legkorábbi mátrixszorzat-állapot alapú alapállapot-közelítő algoritmus volt [3, 4], először egydimenziós spinlánc-modellekre vezették be, hiszen ezeknek a modelleknek az alapállapota a kritikus pontoktól távol gyengén összefonódott, így már kis mátrixok ( $M \approx 10$ – $100$ ) esetén példátlan pontosság volt elérhető gyakorlatilag tetszőlegesen hosz-



2. ábra. (a)  $C$  együtthatótenzor (3) mátrixszorzat-felbontásának grafikus megjelenítése. Az összekötött  $a$  lábakra összegezést kell végezni. (b) A mátrixszorzat-felbontás alapjául szolgáló (4) szingulárisérték-dekompozíció grafikus megjelenítése. (c, d) Kétdimenziós tenzorhálózat (PEPS) és fa-tenzorhálózat (Tree-TNS) gráfja

szú láncok esetén. A módszert később általánosították két- és magasabb dimenziós modellekre, valamint a (2) általános alakban felírható kvantumkémi és magfizikai rendszerekre. Bár az eredmények ekkor is meggyőzőek, a szükséges tárolási és számítási erőforrások igen csak megnőnek. Rendkívül nagy,  $M > 10^4$  mátrixokra lehet szükség, és az elérhető pályák, rácpontok száma is limitált,  $N < 100$ – $200$ . Megmaradási tételek alkalmazása nélkül egy ekkora mátrixszorzat-állapotnak már a tárolásához 400–600 GB tárhelyre van szükség, de megmaradási tételeket használva is hamar elhasználható 50–100 GB, amihez ezután hozzáadódik a Hamilton-operátor általában ennél is nagyobb tárhelyigénye.

## Elektronpályák *in situ* optimalizálása

Láthattuk, hogy a mátrixszorzat-megközelítés tárolási és számítási költsége az  $M$  bond dimenzió függvénye. A hullámfüggvényünk azonban függ a pályák általunk választott sorrendjétől és maguknak a pályáknak a térbeli alakjától is. Ha például elektronok szabad gázát tekintjük, ahol a kölcsönhatás elhanyagolható, könnyen megadható az alapállapot: az elektronok az egyrészecskes állóhullámpályák közül töltik be a legalacsonyabb energiájúakat. Ha tehát ezt az állapotot állóhullámpályákon írjuk fel, úgy már  $M = 1$  (szorzatállapot) elegendő a térbeli dimenziótól függetlenül. Térben lokalizált pályákat választva azonban nagy, a térbeli dimenziótól és rendszermérettől is függő  $M$  választása szükséges.

Ha az elektronok közötti kölcsönhatást is számításba vesszük, a gyakorlatban nem tudjuk előre megmondani

<sup>3</sup> A nitrogénatom példájában a tankönyvi konfigurációra  $C_{1s^2 2s^2 2p_{11}^1} = 1$ , az összes többire zérus.

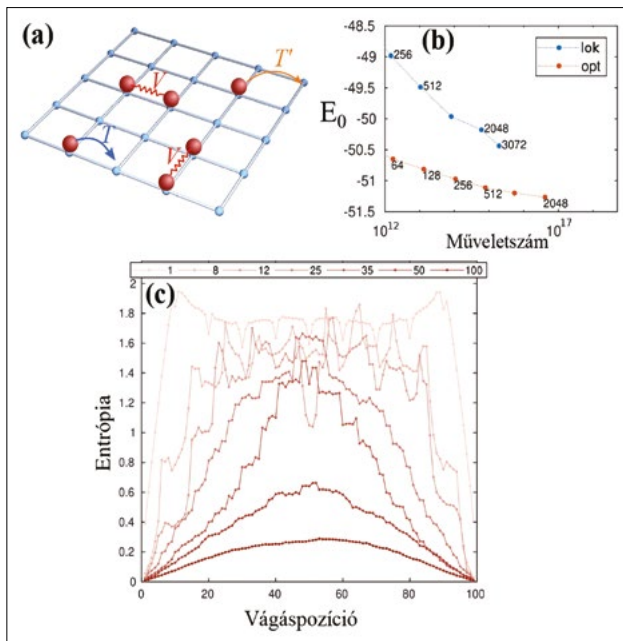
azokat a pályákat, amelyekkel az optimális mátrixszorzat-állapot leírása nyerhető. Molekulák esetén az eredeti variációs Hartree–Fock-módszerrel nyerhető pályák, melyeket gyakran alkalmazunk kiindulásként, várhatóan csak akkor lesznek megfelelőek, ha a tényleges alapállapot közel van a Hartree–Fock-megoldáshoz (ún. egyreferenciás probléma). Ezek a problémák azonban más numerikus módszerek számára is jól hozzáférhetőek, így kevésbé érdekesek a tenzorhálózat-algoritmusok szempontjából. Abban az érdekes esetben, ha nincs a pályáknak egy előre jól meghatározható alapkonfigurációja, akkor a mátrixszorzat-állapot leírás nagyban javítható a pályák adaptív – az alapállapotot közelítő algoritmusmal párhuzamosan végrehajtott – optimalizálásával [6–8]. Itt is többféle megközelítés közül választhatunk. Elképzeltető, hogy a kezdeti  $N$  pályánk összessége megfelelő, ezért az elektronpályák szuperpozícióját csak ezen az  $N$  dimenziós téren engedjük meg.

A pályák megváltoztatása ilyenkor technikailag azt jelenti, hogy a  $c_i^\dagger$  és  $c_i$  operátorokból egy megfelelő  $R_{ij}$  forgatásmátrixszal áttérünk egy új  $d_i^\dagger = \sum_j R_{ij} c_j^\dagger$  és  $d_j = \sum_i R_{ij}^* c_i$  operátorcsaládra, majd a  $T_{ij}$  és  $V_{ijkl}$  együtthatókat úgy transzformáljuk, hogy a (2) Hamilton-operátor változatlan maradjon. Ilyen átalakításokkal az (1)-ben felírt állapotnak csupán a mátrixszorzat-közelítését tudjuk javítani, hiszen csonkolás nélkül tetszőleges  $|\Psi\rangle$

hullámfüggvény felírható függetlenül a pályák fenti megválasztásától. Azonban már ezzel a korlátozott pályaoptimalizációval is gyakran komoly javulást tudunk elérni.

A 3. ábrán részecskék (elektronok) kétdimenziós rácsmodelljére kapott eredményeit mutatjuk, ahol a részecskék egy négyzetrács közeli rácspontjai között ugrálhatnak, miközben első szomszédok között taszító potenciál lép fel. Ezen szilárdtestfizika által motivált modellen jól tesztelhető a módszer, miközben vizsgálható az optimális pályák paraméterfüggése is. A Hamilton-operátor a legtömörebben akkor írható fel, ha a bázisként szolgáló pályákat a rácshelyekre lokalizáljuk, hiszen ekkor a  $T_{ij}$  és  $V_{ijkl}$  súlyok nagy része nullává válik. Mint korábban már említettük, elhanyagolható kölcsönhatás esetén az optimális pályák síkhullámok, miközben nagyon erős kölcsönhatás és félig töltött rács esetén a részecskék sakk-táblaszerű elrendezést preferálnak lokalizált pályákkal. Az érdekes tartomány ezért épp a közepesen erős kölcsönhatás esete, amit a 3c. ábrán is vizsgálunk. Az alapállapot összefonódási entrópiaprofilja az eredeti lokalizált pályákra igen magas. A pályaoptimalizáció során e profil alatti területet minimalizáljuk, és mint láthatjuk, ez igen hatékonyan megtehető: a görbe maximuma a negyedére, a görbe alatti terület kevesebb mint a tizedére csökkenthető az ábrán mutatott esetben. Meg kell jegyeznünk viszont, hogy a lokalizált bázistól való eltérés miatt a  $T_{ij}$  és  $V_{ijkl}$  súlyok korábban zérus elemei immár véges értéket vehetnek fel, ezért a szemfüles olvasóban felmerülhet a kérdés, hogy a számítási igény szempontjából nem veszítjük-e el a vámon azt, amit a réven (azaz az  $M$  bond dimenzió esetleges csökkentésével) nyertünk. A 3b. ábrán láthatjuk, hogy a kétdimenziós rácsmodellünknel határozottan nem ez a helyzet:  $10 \times 10$ -es rács esetén az optimális bázisban már  $M = 64$  mellett alacsonyabb alapállapoti energiát kapunk, mint a lokalizált bázisban  $M = 3096$  mellett, miközben a szükséges aritmetikai műveletek száma nagyjából három nagyságrenddel kisebb az előbbi esetben. Ehhez még azt is érdemes hozzátenni, hogy a „sűrűbb”  $T_{ij}$  és  $V_{ijkl}$  hatékonyabb GPU-alapú párhuzamosítást tesz lehetővé, így már közepes bond dimenziók ( $M \gtrsim 2000$ – $3000$ ) mellett is teljesen kiaknázható egy legújabb, AI-alkalmazásokra optimalizált nagy teljesítményű szuperszámítógép-nódus [7]. Az optimalizált bázis végeredményben akár 4–5 nagyságrenddel is gyorsabb számítást tesz lehetővé. További fontos észrevétel, hogy az összefonódást mérő entrópia igen robusztus mennyiség, ezért a pályaoptimalizációt általában elegendő alacsony  $M$  mellett végezni, így ennek számítási igénye szintén mérsékelt marad.

A fent leírt pályaoptimalizáció egyik nagy hátránya, hogy nem ad lehetőséget az eredeti  $N$  pálya által kifestett alter elhagyására, pedig a lehetséges pályák végtelen dimenziós Hilbert-teret alkotnak. A DMRG-t más algoritmusokkal kombinálva végezhető pályaoptimalizáció általánosabb módon úgy is, hogy a pályák keverése során megengedjük az  $N$  dimenziós aktív téren kívüli pályá-



3. ábra. (a) A kétdimenziós rácsmodell sematikus ábrája. Az első és másodsomszéd ugrásokat is figyelembe vevő  $T$ – $T'$ – $V$  modellben a részecskék a rács élein és átlósan ugrálhatnak a rácspontok között, a szomszédos részecskék közötti kölcsönhatás erőssége  $V$ . (b) A számítási komplexitás (műveletszám) és az alapállapoti energia a lokalizált és optimális pályákon  $10 \times 10$ -es rácsra [7]. Az adatpontok mellett feltüntetjük az  $M$  bond dimenzióértéket is. Hasonló pontosság eléréséhez három nagyságrenddel kevesebb művelet végrehajtása szükséges az optimalizált bázison, (c) Az entrópiaprofil változása a pályaoptimalizáció során [8]. Az egyes görbék különböző iterációkhoz tartoznak, melyek sorszámaát az ábra fejlécén mutatjuk

kat is. Ez elvben lehetővé teszi a nem optimális kezdeti pályaválasztásunk javítását is. A DMRG-SCF módszerben az alapállapotot MPS segítségével közelítjük, majd a hullámfüggvényből származtatott, egy- és kétrészecske-s potenciálok (az elektronfelhő önkonzisztens terei) alapján kísérelünk meg alkalmasabb pályákat javasolni [9]. Egy másik lehetőség, hogy a korábbi  $N$  pálya mellett további pályákat is figyelembe veszünk, azonban csak korlátozott módon: ezeken a kiegészítő pályákon az alapkonzfigurációhoz képest csak egy vagy két eltérést engedünk meg összesen [10]. Az eredeti,  $N$  pályás láncot az így kapott ún. korlátozott aktív térrel kiegészítve lehetővé válik a gyengébb, de fontos dinamikus korrelációk figyelembevétele. Az előbb bemutatott módszer és az adaptív módustranzformáció ötvözése egy természetes általánosítás, amihez további algoritmikus megoldásokon tervezünk dolgozni a jövőben.

Cikkünkben röviden áttekintettük a kvantumrendszerek klasszikus szimulációját, ezen belül is a mátrixszorzat-állapotokon alapuló módszereket. Mivel a kvantumállapotok összefonódás-alapú tömörítésének hatékonysága éppen a vizsgált állapot kvantumosságától függ, ezek a módszerek nem csupán hatékony numerikus eszközök, hanem betekintést nyújtanak az állapotban tárolt kvantuminformáció struktúrájába is. A részrendszerek összefonódása erősen függ azok megválasztásától, és ez a mátrixszorzat-állapot leírásának hatékonyságát is drasztikusan befolyásolja. A kétdimenziós rácsmodell példáján láthattuk, hogy egy

sokrészecske-s állapot esetén a pályák optimális megválasztása több nagyságrenddel csökkentette a szükséges számítási erőforrásokat.

Hála a fizikus- és kémikusközösség elszánt kutatóinak, a klasszikus algoritmusaink folyamatosan fejlődnek, így képezve erős versenytársat a szintén rohamosan fejlődő kvantumelven működő hardvereknek. Hiszünk abban, hogy ez a verseny inspirációként szolgál mind a klasszikus, mind a kvantum megoldások fejlesztőinek, továbbá lehetővé teszi, hogy feltérképezzük az egyes megoldások helyes alkalmazási területeit, valamint utat nyithat az esetleges hibrid kvantum-klasszikus megoldások felé is.

## Irodalom

1. Richard P. Feynman: *International Journal of Theoretical Physics*, 21, (1982) 467.
2. B. Bauer, S. Bravyi, M. Motta, G. K. L. Chan: *Chemical Reviews*, 120, (2020) 12685.
3. Steven R. White: *Phys. Rev. Lett.*, 69, (1992) 2863.
4. Ulrich Schollwöck: *Annals of Physics*, 326, (2011) 96.
5. Román Orús: *Annals of Physics*, 349, (2014) 117.
6. C. Krumnow, L. Veis, O. Legeza, J. Eisert: *Phys. Rev. Lett.*, 117, (2016) 210402.
7. Menczer Andor, Kapás Kornél, Werner Miklós Antal, Legeza Örs: *Phys. Rev. B*, 109, (2024) 195148.
8. Gero Friessecke, Werner Miklós Antal, Kapás Kornél, Menczer Andor, Legeza Örs: arXiv:2406.03449 (2024).
9. Legeza Örs és mtsai: arXiv:2503.20700 (2025).
10. Barcza Gergely és mtsai: *The Journal of Physical Chemistry A*, 126, (2022) 9709.

# AZ ÁRAMKÖRÖK KVANTÁLÁSA ÉS A SZUPRAVEZETŐ KVANTUMSZÁMÍTÓGÉPEK

Gyenis András

University of Colorado Boulder, Department of Electrical, Computer & Energy Engineering, Boulder

E-mail: Andras.Gyenis@colorado.edu

## Bevezetés

Az elektromos áramkörök mára megkerülhetetlenek a mindennapokban. Bár a klasszikus Maxwell-egyenletek segítségével az áramkörök többségét nagy pontossággal

gal meg tudjuk tervezni, amikor méretük megközelíti a nanométeres skálát, a kvantum effektusok fontossá válnak, és módosítanunk kell a klasszikus modellüket. Például, a tranzisztorok vagy a flashmemóriák tervezésében a kvantummechanikai alagúteffektus fontos szerepet játszik, ami befolyásolja az elektronikai alkatélemek szigetelő anyagának a megválasztását és az elektródák geometriai kialakítását. Ezzel szemben van egy teljesen más típusú elektronikus rendszer, a szupravezető áramkörök, ahol a kvantum effektusok nemcsak kisebb módosításokként jelennek meg, hanem alapjaiban változtatják meg az áramkörök tulajdonságait. Ebben a cikkben ezeket a kvantumáramköröket tárgyaljuk, amelyek mint tervezhető és hangolható mesterséges atomok a szupravezető kvantumszámítógépek [1] alapjául szolgálnak.



Gyenis András a Colorádói Boulder Egyetem adjunktusa. A BME-n diplomázott mérnök-fizikusként 2010-ben, majd a Princeton Egyetemen doktorált 2016-ban, ahol topológikus és szupravezető anyagokat tanulmányozott pásztázó alagútmikroszkóppal. Azóta szupravezető és félvezető kvantumos áramkörök tervezésével, modellezésével és mérésével foglalkozik. A fő kutatási témája a védett áramkörök létrehozása, vezérlése és új nemlineáris áramköri elemek kifejlesztése.

# A mechanikai rezgőmozgás klasszikus és kvantumos fizikája

Mielőtt rátérnénk az elektromos áramkörök kvantumfizikai leírására, érdemes felidézni egy mechanikai példát: az egydimenziós harmonikus oszcillátort. Ebben a rendszerben egy rugóhoz erősített tömegpont végez harmonikus rezgőmozgást egyensúlyi helyzete körül. A rendszer teljes energiája – a Hamilton-függvénye – a tömegpont kinetikus és potenciális energiájából adódik össze:

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2.$$

Itt  $k$  a rugóállandó,  $m$  a részecske tömege,  $p$  az impulzusa és  $x$  a helyének koordinátája. Fontos megjegyezni, hogy a helykoordináta és az impulzus konjugált fizikai mennyiségek, mivel  $\{x, p\} = 1$ , ahol  $\{x, p\} = (\partial x / \partial x) \cdot (\partial p / \partial p) - (\partial p / \partial x) \cdot (\partial x / \partial p)$  a Poisson-zárójelet jelöli. A mozgás dinamikáját a  $t$  idő függvényében a Hamilton-egyenletek megoldásával kapjuk meg, ami egy szinuszos rezgőmozgáshoz vezet:  $x(t) = x_0 \cos(\omega t + \varphi)$ , ahol  $\omega = \sqrt{k/m}$  a körfrekvencia,  $x_0$  a mozgás amplitúdója,  $\varphi$  pedig a fázisa.

A kvantumvilágban a harmonikus oszcillátor, ahogy számtalan más rendszer a nanométeres skálán, kvantált tulajdonságokat mutat. Ez például abban nyilvánul meg, hogy amikor az oszcillátor energiáját megmérjük, csak bizonyos diszkrét energiaértékeket kaphatunk. Ehhez úgy jutunk el, hogy a fizikai mennyiségeket, például az energiát, az impulzust vagy a helykoordinátát, operátorokkal írjuk le, és megköveteljük, hogy a mérhető fizikai mennyiségek csak olyan értékeket vegyenek fel, amelyek

sajátértékei a megfelelő operátoroknak. Emellett a rendszer állapotát egy hullámfüggvény képviseli, ami annak a valószínűség-eloszlását írja le, hogy például a részecske egy adott helyen található, vagy egy adott impulzussal rendelkezik. Fontos megjegyezni, hogy amikor a konjugált fizikai mennyiségeket lekepezzük operátorokra, ezek az operátok nem cserélhetők fel. Matematikailag az operátorok definiálásakor a klasszikus Poisson-zárójelekre vonatkozó összefüggéseket a kvantumos felcserélhetőségi relációkra váltjuk:

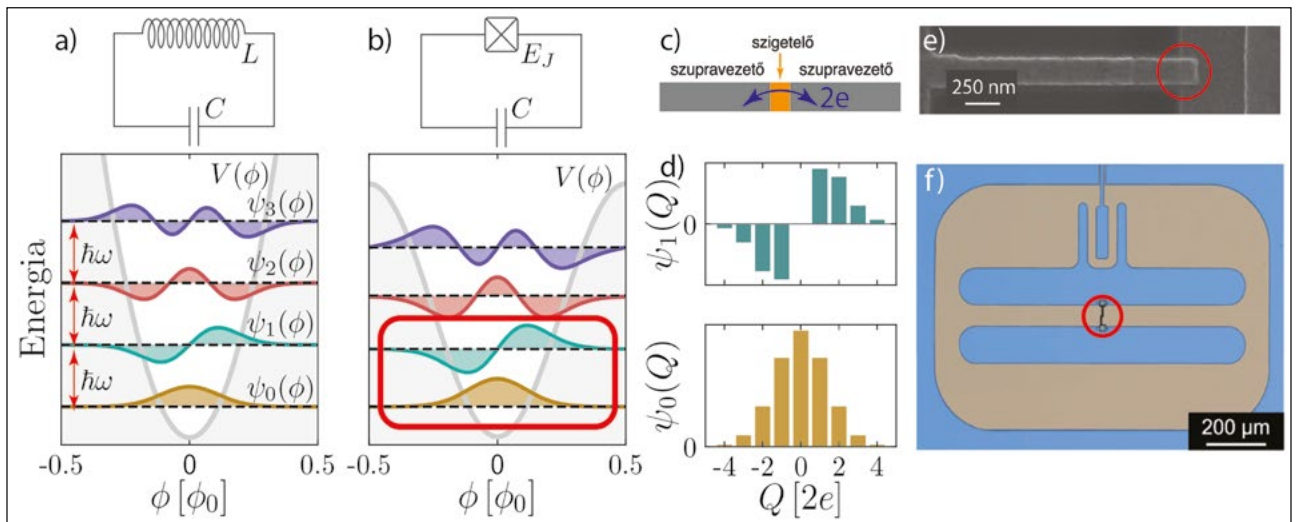
$$\{\dots\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[\dots],$$

ahol  $\hbar$  a redukált Planck-állandó. Az egyik leghíresebb példa nem felcserélhető operátorpárra a helykoordináta és az impulzus, amelyek teljesítik a Heisenberg-féle felcserélési relációt,  $[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$ . A kvantumrendszerek leírásának ezt a megközelítését, ahol a klasszikus fizikai mennyiségeket nem felcserélhető kvantumos operátorokkal helyettesítjük, kanonikus kvantálásnak nevezzük.

Visszatérve a harmonikus oszcillátor példájára, a kanonikus kvantálással a rendszert a Hamilton-operátor írja le:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2.$$

Ahhoz, hogy megkapjuk a rendszer kvantált energia-sajátállapotait, a Hamilton-operátor sajátértékeit kell megkeresnünk. Szerencsére ez a feladat analitikusan megoldható (ahogy az minden bevezető kvantummechanika-tankönyvben szerepel), ami arra vezet, hogy az energia megengedett  $E_n$  értékei lineárisan nőnek az  $n$  gerjesztési szám függvényében:



1. ábra. a) Az LC rezgőkör kapcsolási rajza és az energia-sajátállapotok hullámfüggvényei  $V(\phi)$  négyzetes potenciálvölgyben. Az energiaállapotok egyenlő távolságra vannak egymástól (piros nyilak). b) A transzmon áramkör kapcsolási rajza és az energia-sajátállapotok hullámfüggvényei a  $V(\phi) = -E_J \cos(2\pi\phi/\phi_0)$  potenciálvölgyben. Az alap- és az első gerjesztett állapot reprezentál egy qubitet (piros négyzet). c) A Josephson-átmenet sematikus rajza, ahol Cooper-párok ( $2e$ ) alagutaznak a szupravezető elektródák között egy szigetelőrétegen keresztül. d) A transzmon hullámfüggvényei töltésreprezentációban. e) Páztázó elektronmikroszkópos felvétel egy Josephson-átmenetről, amely két oxidált alumínium elektróda között alakul ki (piros kör). f) Optikai mikroszkópfelvétel egy transzmon qubitról [4], ahol a piros kör jelzi a Josephson-átmenetet

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right).$$

## A szupravezető harmonikus LC rezgőkör

Rezgőmozgás nemcsak mechanikai rendszerekben van jelen, hanem elektromos áramkörökben is. Az alapvető példa erre a párhuzamos kapcsolású LC rezgőkör dinamikája, ahol egy kondenzátor és egy tekercs periodikusan energiát cserél egymással (1a. ábra). A klasszikus rendszer energiája (Hamilton-függvénye) elektromos és mágneses energiából áll:

$$H(\phi, Q) = \frac{Q^2}{2C} + \frac{\phi^2}{2L},$$

ahol  $C$  a kondenzátor kapacitása,  $L$  a tekercs induktivitása,  $Q$  az elektromos töltés a kondenzátoron és  $\phi$  a tekercsben tárolt mágneses fluxus. Az LC rezgőkör dinamikája analóg a mechanikai oszcillátoréval: az elektromos töltés és a mágneses fluxus nagysága harmonikusan rezeg az áramkörben, mint ahogy a rugóhoz erősített részecske pozíciója és impulzusa is szinuszosan változik. Ez matematikailag abban nyilvánul meg, hogy a mechanikus és az elektromos oszcillátor Hamilton-függvényei lekepezhetőek egymásba a következő helyettesítéssel:  $p \leftrightarrow Q$ ,  $x \leftrightarrow \phi$ ,  $m \leftrightarrow C$ ,  $k \leftrightarrow 1/L$ . Továbbá látható, hogy az elektromos töltés és a mágneses fluxus konjugált fizikai mennyiségek, mivel  $\{\phi, Q\} = 1$ .

A mechanikus és elektromos oszcillátorok hasonlósága arra motivál, hogy egy kvantum LC rezgőkörben a fluxus és a töltés mennyiségeket is operátorokkal írjuk le, melyek ugyanolyan felcserélési relációt követnek, mint egy részecske helyének és impulzusának operátora [2]. Mára számtalan kísérleti eredmény bizonyítja, hogy ez valóban a helyes kanonikus kvantálása a kvantumáramköröknek, és a töltés- és a fluxusoperátorok kielégítik a következő felcserélési relációt:

$$[\hat{\phi}, \hat{Q}] = i\hbar.$$

Ezen a ponton egy fontos kérdés vetődik fel. Hogyan tudunk kísérletileg kvantum LC áramkört építeni? Ez elsőre lehetetlen feladatnak tűnik. A kondenzátor és a tekercs is megszámlálhatatlan sok atomból épül fel, amelyek között a globális fáziskoherencia hiányzik. Enélkül pedig a kvantum effektusok nem terjednek ki az egész áramkörre, és a töltések oszcillációja csupán klasszikus jelenség marad. Szerencsére, a szupravezető anyagok megoldást kínálnak erre a problémára. Bár a szupravezetők leginkább arról híresek, hogy ellenállás nélkül vezetik az elektromos áramot, van egy másik fontos tulajdonságuk: egy szupravezető anyagdarab vezetést adó elektronjai egyetlen makroszkopikus hullámfüggvényre írhatók le. Ez a globális hullámfüggvény biztosítja, hogy ha szupravezetőből építünk egy LC oszcillátort, és lehűtjük alacsony hőmérsékletre, akkor a fáziskoherencia az egész áramkörre kiterjed. Ennek következtében a rezgőkör kvantum effektusokat mutat, így például

a megengedett energiaértékei egy ekvidisztáns spektrumot adnak (1a. ábra). Mivel nemcsak az áram, hanem az elektromágneses mező is oszcillál az LC áramkörben, az energiaértékek közötti gerjesztéseket fotonoknak hívjuk, amelyek az elektromágneses sugárzás elemi részecskéi.

## A transzmon: egy anharmonikus LC rezgőkör

Bár a szupravezető LC áramkörnek kvantált energiaszintjei vannak, ez nem elég ahhoz, hogy kvantumszámitógéphez kvantumbit (qubit) építhessünk belőle. A qubit ugyanis vezérelhető kétállapotú kvantumrendszer kell legyen. A harmonikus rezgőkörben végtelen számú energia-sajátállapot van, ráadásul mindegyik energiaszint ugyanakkora távolságra van a szomszédjaitól, ezért nem tudunk elkülöníteni csupán két energiaszintet. Kézenfekvő megoldás erre, ha a rezgőkört anharmonikussá tesszük. A mechanikai oszcillátornál ehhez olyan rugó kell, melynek rugóállandója a megnyújtásától függően változik. Hasonlóan, az elektromos LC rezgőkörben nemlineáris tekercsre van szükség, amelynek induktivitása a benne tárolt fluxustól függ. Ha ez megvan, a klasszikus rezgés torzul az eredeti tisztán szinuszos mozgáshoz képest, a kvantum esetben pedig az energiaértékek már nem egyenlő távolságra lesznek egymástól (1b. ábra). Így a végtelen számú állapot közül már ki tudunk választani két tetszőleges energiaszintet, amelyek egy qubit 0 és 1 állapotát adják. A legegyszerűbb megoldás az alapállapotot a qubit 0 állapotának, az első gerjesztett állapotot a qubit 1 állapotának tekinteni.

Hogyan tudunk nemlineáris szupravezető tekercset készíteni? Erre a választ egy szupravezetőjelenség szolgáltatja: a Josephson-effektus. Ez akkor lép fel, amikor két szupravezető elektródát egy néhány nanométer szélességű szigetelőréteg választ el egymástól, és a lecsengő szupravezető-hullámfüggvények átfedésbe kerülnek a szigetelőrétegben (1c., e. ábra). Ekkor a Cooper-párok alagutazása révén szupravezető áram folyik a két elektróda között, a szigetelőrétegen pedig feszültség lép fel. Ez a feszültség arányos az áram időbeli változásával, éppen úgy, ahogy egy tekercs feszültsége a rajta átfolyó áram időbeli deriváltjával arányos. Ezt a szupravezető-szigetelő-szupravezető rendszert tehát egy effektív tekercsként kezelhetjük, amit Josephson-átmenetnek nevezünk. Erről az áramköri elemről megmutatható, hogy az induktivitása nemlineáris a benne tárolt  $\phi$  effektív mágneses fluxus függvényében, és a tekercs energiája  $E = -E_J \cos(2\pi\phi/\phi_0)$ , ahol  $E_J$  a Josephson-energia, ami a Josephson-átmenet anyagától és geometriájától függ, és  $\phi_0$  a mágneses fluxuskvantum.

Amikor egy ilyen Josephson-átmenetet és egy szupravezető kondenzátort párhuzamosan kapcsolunk, anharmonikus rezgőkört kapunk, amit transzmon áramkörnek hívnak [3, 4]. Ezzel a rendszer Hamilton-operátora:

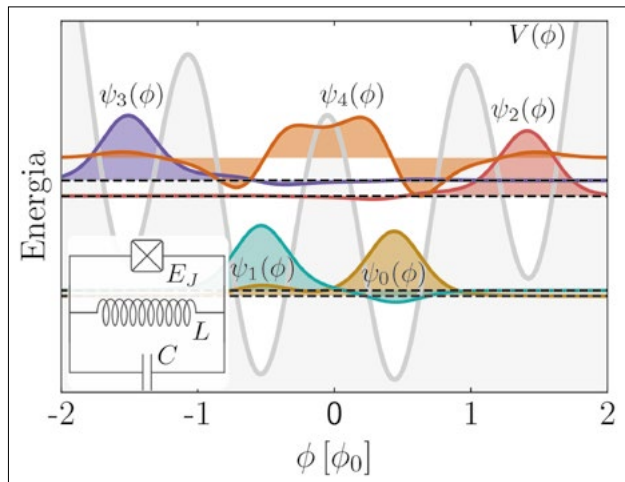
$$\hat{H} = \frac{\hat{Q}^2}{2C} - E_J \cos(2\pi\hat{\phi}/\phi_0),$$

ahol – a mechanikai példát követve – az első tagot a „kinetikus”, míg a második tagot a „potenciális” energiaként tekinthetjük. Az áramkör kvantált energiaszintjeit, potenciális energiáját és az állapotok hullámfüggvényeit az 1b. ábra, míg a transzmon áramkör egy legyártott példányát az 1f. ábra mutatja [4]. Látható, hogy a rendszer energiaértékei nem egyenletesen oszlanak el, mivel a koszinuszos potenciál eltér a négyzetes függvényétől.

Érdeemes megjegyezni, hogy a hullámfüggvényeket leírhatjuk akár fluxus-, akár töltésrepresentációban, ahogy egy részecske állapota is pozíció- és impulzusrepresentációban is ábrázolható. A hullámfüggvények a töltésrepresentációban fontos fizikai intuícióval szolgálnak: a transzmon energiaállapotai különböző töltésszcillációk koherens szuperpozíciói (1d. ábra). Például az alap- és az első gerjesztett állapot esetén néhány Cooper-pár oszcillál az áramkörben úgy, hogy az alapállapotban szimmetrikus, a gerjesztett állapotban pedig antiszimmetrikus amplitúdóval rezegnek. Mivel ez a kapcsolat egy egyszerű áramkör, amit mára a legtöbb tisztaszobában gyártani lehet, a transzmon az egyik legelterjedtebb szupravezető qubit mind a külföldi, mind a hazai egyetemeken [5], kutatóintézetekben és a kvantumos iparban. Például a legígéretesebb szupravezető kvantumprocesszorok, amelyeket a Google, az IBM vagy az Amazon gyárt, mind transzmon áramkörökből épülnek fel.

## A fluxónium: az áramok szuperpozíciója

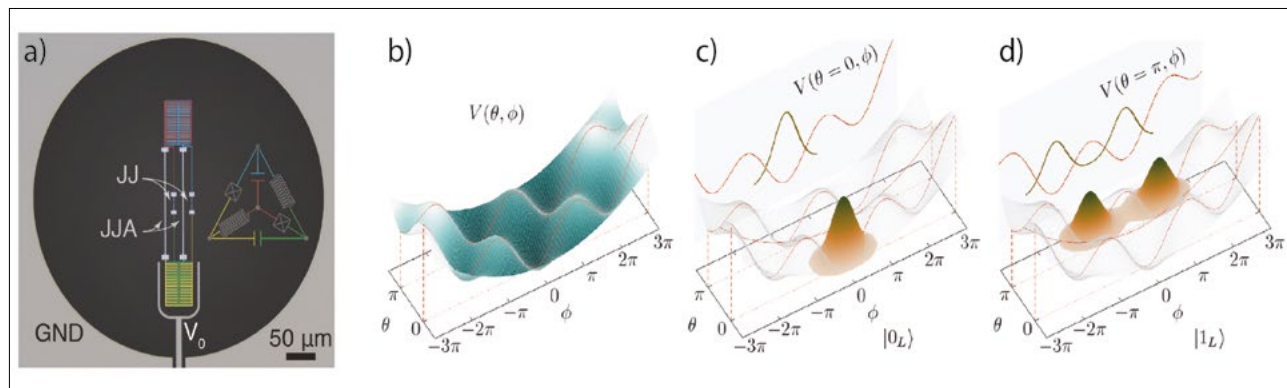
A 2010-es évek hajnalán kifejlesztettek egy másik, sokat ígérő szupravezető qubitfajtát, a fluxóniumot [6]. Itt a Josephson-átmenettel nemcsak egy kondenzátort, hanem egy (hagyományos, lineáris) tekercset is párhuzamosan kapcsoltak. Mivel ebben az áramkörben a lineáris tekercs is energiát tárol, a rendszer Hamilton-operátorát a következőképpen tudjuk leírni (ha nincs külső mágneses tér):



2. ábra. A fluxónium áramkör energia-sajátállapotaihoz tartozó hullámfüggvények külső mágneses tér esetén. A szürke görbe mutatja a potenciális energiát. A betétábra mutatja a fluxónium kapcsolási rajzát

$$\hat{H} = \frac{\hat{Q}^2}{2C} - E_J \cos(2\pi\hat{\phi}/\phi_0) + \frac{\hat{\phi}^2}{2L}.$$

Itt az áramkör potenciális energiája (az utolsó két tag) lényegesen különbözik a transzmonnál látotttól: több potenciálminimum is van, ahol a hullámfüggvények lokalizálódhatnak (2. ábra). Tehát a fluxónium nemcsak egy anharmonikus rezgőkör, hanem egy gazdag energiastruktúrával rendelkező mesterséges atom, ahol az atom potenciális energiáját az induktivitások, valamint kinetikus energiáját a kapacitás értéke határozza meg. Megmutatható, hogy a különböző potenciálvölgyekben található állapotok fizikailag különböző nagyságú makroszkopikus köráramokat jelentenek a rendszerben. Ennek egyik jelentősége, hogy a fluxóniumban a qubitállapotok különböző makroszkopikus áramokhoz tartoznak. Ezek a makroszkopikus, de mégiscsak kvantumos áramok jobban ellenállnak a lokális zajnak, mint más kvantumhardverek, így kevesebb hibát várunk az általuk megvalósított fluxóniumqubitekben, ami ígéretes a kvantumszámítógépek számára.



3. ábra. a) Optikai mikroszkópfelvétel a védett 0- $\pi$  áramkorról, és a kapcsolási rajza [9]. JJ: Josephson-átmenet, JJA: tekercs. b) Az áramkör kétdimenziós potenciális energiája, c) az alap- és d) az első gerjesztett állapotának hullámfüggvényei, amelyek két különböző potenciálvölgyben lokalizálódnak, így köztük az átmenet tiltott

## Magasabb dimenziójú és védett áramkörök

Eddig csak a legegyszerűbb áramköröket tárgyaltuk, ahol a rendszereknek csak egy szabadsági fokuk volt (a Hamilton-operátor egyetlen töltés-fluxus konjugált párt tartalmazott), így ezek az áramkörök egydimenziós mesterséges atomoknak tekinthetők. Ha nemcsak párhuzamosan, hanem sorosan is kapcsoljuk a szupravezető elemeket, több szabadsági fokú (magasabb dimenziós) kvantumáramköröket is tervezhetünk. Ahogy számtalan kísérleti eredmény bizonyítja, ezeknek az összetettebb rendszereknek a kvantálása is a kanonikus kvantálást követi. Az általános elméleti eljárás a kvantummechanikai leírásukra a következő [7]. Először definiáljuk a töltést és az általánosított fluxus mennyiségeket az áramkör különböző részein, mint az áram és a feszültség időbeli integráljait. Ezt követően megkeressük a kanonikus töltés-fluxus párokat az áramkörben, amiket az áramkör geometriája és gráfja határoz meg, és ezt egy ún. szimplektikus mátrixszal írjuk le. Ezt követően a töltéseket és fluxusokat operátorokkal helyettesítjük, amelyek felcserélési összefüggéseket elégítenek ki. Végül felírjuk az áramkör Hamilton-operátorát, aminek sajátértékei adják az áramkör lehetséges energiaértékeit, sajátfüggvényei a hullámfüggvényeket.

Mivel áramköri elemeket megszámlálhatatlan kombinációban tudunk összekapcsolni, rengeteg magas dimenziójú mesterséges atomot lehet tervezni szupravezető áramkörökből. A kvantumszámítógépek szempontjából egy különösen fontos irány az ún. védett áramkörök tervezése [8]. Ezen áramkörökben egyes sajátállapotok ellenállóak a környezeti zajjal szemben, így ezekkel hosszú élettartamú qubitet tervezhetünk, hasonlóan a metastabil atomi állapotokhoz. Például az ún.  $0-\pi$  qubitben [9] a kondenzátorok, a lineáris és nemlineáris induktivitások úgy kombinálódnak, hogy egy kettős potenciálvölgy jön létre, ahol a qubit állapotai stabilan lokalizálódhatnak (3. ábra).

## A kvantumáramkörök elektrodinamikája és a kvantumszimuláció

Amellett, hogy az áramköröknek kvantált energiaállapotaik vannak, még sok más kvantumos effektust is mutatnak, így kvantumszimulátorok alapjául szolgálhatnak [10]. Például a fotonok és atomok közötti kölcsönhatás, a kvantumelektrodinamika is nagy pontossággal tanulmányozható ezen kapcsolásokkal [11]. Amikor harmonikus és anharmonikus áramköröket kapcsolunk össze, az LC áramkör gerjesztései – a fotonok – az anharmonikus áramkör (a qubit) atomi állapotaival hatnak kölcsön. Ekkor, ha az LC áramkör rezonanciafrekvenciája meg-

egyezik a qubit energiaátmenetével, a foton energiát tud cserélni a qubittel. Ez a kvantumszámítógépek nyelvén egy logikai műveletnek felel meg, és a kölcsönhatás idejét változtatva a qubit 0 és 1 állapotainak tetszőleges szuperpozícióját eredményezi. Ha a fotonok energiája a qubit átmenetének energiájától eltér, a kölcsönhatás ahhoz vezet, hogy a fotonok frekvenciája kissé megváltozik attól függően, hogy a qubit a 0 vagy 1 állapotban van, ami a qubitek kiolvasásának az alapja. Emellett nagyszámú összekapcsolt áramkörrel szilárdtestfizikai rácsmodellek szimulálhatók, ami pl. a Mott-szigetelők [12] vagy a hiperbolikus görbült térben mozgó fotonok kísérleti vizsgálatát is lehetővé teszi [13] – hogy csak néhány példát említsünk a kvantumáramkörök sokrétű alkalmazásai közül.

## Irodalom

1. P. Krantz, M. Kjaergaard, F. Yan, T. P. Orlando, S. Gustavsson, W. D. Oliver: A quantum engineer's guide to superconducting qubits. *Appl. Phys. Rev.*, 6, (2019) 021318.
2. M. Devoret: Quantum Fluctuations in Electrical Circuits. Session LXIII. Elsevier, Amsterdam, 1997.
3. Jens Koch, Terri M. Yu, Jay Gambetta, A. A. Houck, D. I. Schuster, J. Majer, Alexandre Blais, M. H. Devoret, S. M. Girvin, R. J. Schoelkopf: Charge-insensitive qubit design derived from the Cooper pair box. *Phys. Rev. A* 76, (2007) 042319.
4. Alexander P. M. Place, Lila V. H. Rodgers, Pranav Mundada, Basil M. Smitham, Mattias Fitzpatrick, Zhaoqi Leng, Anjali Premkumar, Jacob Bryon, Andrei Vrajitoarea, Sara Sussman, Guangming Cheng, Trisha Madhavan, Harshvardhan K. Babla, Xuan Hoang Le, Youqi Gang, Berthold Jäck, András Gyenis, Nan Yao, Robert J. Cava, Nathalie P. de Leon, Andrew A. Houck: New material platform for superconducting transmon qubits with coherence times exceeding 0.3 milliseconds. *Nature Communications*, 12, (2021) 1779.
5. Kürtössy Olivér, Csonka Szabolcs, Makk Péter: *Fizikai Szemle*, jelen szám.
6. Vladimir E. Manucharyan, Jens Koch, Leonid I. Glazman, and Michel H. Devoret: Fluxonium: Single Cooper-pair circuit free of charge offsets. *Science*, 326, (2009) 113.
7. Andrew Osborne, Trevyn Larson, Sarah Garcia Jones, Ray W. Simmonds, András Gyenis, Andrew Lucas: Symplectic geometry and circuit quantization. *PRX Quantum*, 5, (2024) 020309.
8. András Gyenis, Agustin Di Paolo, Jens Koch, Alexandre Blais, Andrew A. Houck, and David I. Schuster: Moving beyond the transmon: Noise-protected superconducting quantum circuits. *PRX Quantum*, 2, (2021) 030101.
9. András Gyenis, Pranav S. Mundada, Agustin Di Paolo, Thomas M. Hazard, Xinyuan You, David I. Schuster, Jens Koch, Alexandre Blais, Andrew A. Houck: Experimental realization of a protected superconducting circuit derived from the  $0-\pi$  qubit. *PRX Quantum*, 2, (2021) 010339.
10. Pozsgay Balázs: *Fizikai Szemle*, jelen szám.
11. Alexandre Blais, Arne L. Grimsmo, S. M. Girvin, Andreas Wallraff: Circuit quantum electrodynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 93, (2021) 025005.
12. Ruichao Ma, Brendan Saxberg, Clai Owens, Nelson Leung, Yao Lu, Jonathan Simon, David I. Schuster: A dissipatively stabilized Mott insulator of photons. *Nature*, 566, (2019) 51.
13. Alicia J. Kollár, Mattias Fitzpatrick, Andrew A. Houck: Hyperbolic lattices in circuit quantum electrodynamics. *Nature*, 571, (2019) 45.

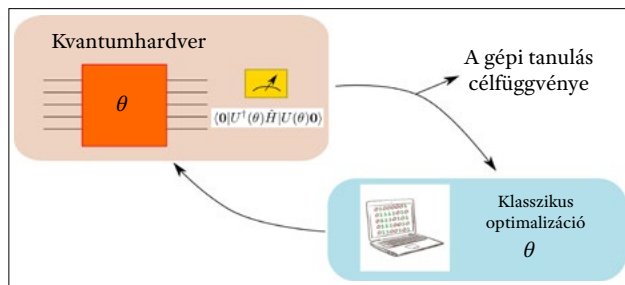
# KIHÍVÁSOK A VARIÁCIÓS KVANTUMÁRAMKÖRÖK OPTIMALIZÁCIÓJÁBAN

Rakya Péter

ELTE, Eötvös Quantum Transport Group, Budapest

E-mail: rakytap@gmail.com

A kvantumos gépi tanulás napjaink rohamosan fejlődő és növekvő tudományterülete, amely ötvözi a kvantuminformatica és a klasszikus gépi tanulás elveit összetett problémák megoldásának reményében. A kvantumszámítás két újszerű erőforrással bővíti a matematikai problémák megoldására alkalmazható eszközök táráát. A szuperpozíció és az összefonódás lehetővé teszik a kvantumszámítógépek számára, hogy olyan módon dolgozzák fel az információkat, amely alapvetően különbözik a klasszikus számítógépektől [1, 2]. A kvantumos gépi tanulás területén tevékenykedő kutatók ezen erőforrások legjobb felhasználási módszereinek munkálkodnak a gépi tanulási algoritmusok teljesítményének javítása érdekében. A klasszikus gépi tanulás területén alkalmazott algoritmusokban nagy komplexitású matematikai modellek hiperparamétereit (más néven súlyait) azzal a céllal optimalizáljuk, hogy pontos előrejelzéseket kapjunk vagy elemeket osztályozzunk. A kvantumos gépi tanulás során a matematikai modellekben kvantumos erőforrásokat alkalmaznak olyan célfüggvények kiértékelése végett, melyeket klasszikus módszerekkel túl sok erőforrásba (pl. időbe) kerülne kiértékelni, ahogy ezt az 1. ábra szemlélteti.



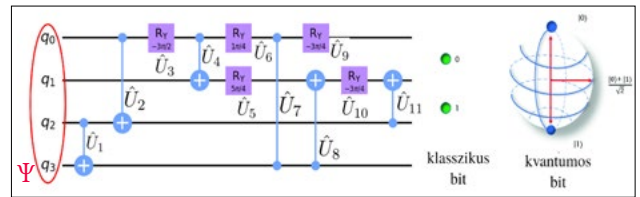
1. ábra. A kvantumos gépi tanulás során kvantumos erőforrásokat alkalmazunk a gépi tanulás célfüggvényének hatékony kiértékeléséhez. A kvantumos eszköz paramétereit klasszikus számítási eszközökkel optimalizáljuk

A kvantummechanika egyedülálló tulajdonságait kihasználva hatékonyra válhat ezen célfüggvények kiérté-



Rakya Péter az Eötvös Loránd Tudományegyetem és a HUN-REN Wigner FK Komputációs Tudományok Osztályának tudományos munkatársa. Igazságügyi szakértő forenzikus fizika szakterületen, valamint a QuantHun Computing Kft. ügyvezetője. Fő kutatási témája a gépi tanulásos alkalmazások fejlesztése.

kelése. A szuperpozíció (azaz a kvantumbitek 0 és 1 állapotainak egyidejű megnyilvánulása) és az összefonódás (azaz a kvantumbitek között fellépő kvantummechanikai korrelációk) lehetőséget nyújtanak az információ tárolására alkalmazott erőforrások exponenciális mértékű tömörítésére, jelentősen megnövelve kezelésük hatékonyságát. A klasszikus gépi tanulás folyamata általában a neurális hálózatok súlyainak beállítását jelenti annak érdekében, hogy minimalizáljuk a matematikai modell és a tanító adatok közötti eltéréseket. E folyamat analógiájaként a kvantumos gépi tanulás során a tanítási folyamat a kvantumprogramot leíró kvantumáramkörben lévő kapuműveletek [3] finomhangolását tűzi ki célul. A kvantumáramkörökben lévő kapuműveletek az egyes kvantumbitekben (azaz egyszerre egy kvantumbiten) vagy kvantumbitpárokon hatnak. Ez utóbbi két kvantumbites műveletek kvantumos korrelációk létrehozására alkalmazhatóak a kvantumbitek között.



2. ábra. Bal oldal: négy kvantumbites kvantumáramkör. A  $\Psi$  kvantumállapotot alkotó négy kvantumbitet egykvantumbites kapuk (lila négyzetek) és kétkvantumbites kapuk (kék) transzformálják balról jobbra terjedő sorrendben. Jobb oldal: a klasszikus bit kvantumos általánosítása. A kvantumbit a 0 és 1 állapot tetszőleges szuperpozícióját felveheti, mely állapot egy egységnyi sugarú gömb (Bloch-gömb) felületére mutató vektorral szemléltethető

Ahogy azt a 2. ábra szemlélteti, az egykvantumbites kapuműveletek a kvantumbitek olyan transzformációját hajtják végre, mely a kvantumbitek állapotának szemléltetésére alkalmazott egységnyi háromdimenziós vektor elfordításával írható le. A kvantumáramkör tanítása ebben a környezetben a kvantumkapuk forgatási szögeinek beállítását jelenti annak érdekében, hogy a kvantumáramkör által generált kvantumállapotból kinyerhető mennyiségek közel kerüljenek a tanítási adathalmaz megfelelő elemeihez. A kvantumkapuk forgatási szögeinek beállítási folyamata hasonló a klasszikus neurális hálózat súlyainak tanításához.

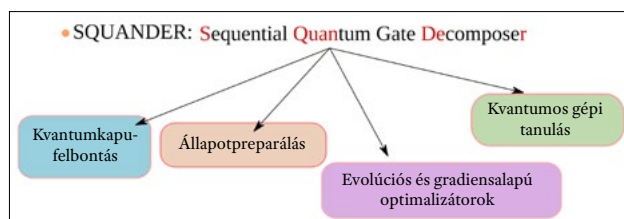
A kvantumos gépi tanulásos modellek közül a variációs sajátérték-megoldót (variational quantum eigensolver, VQE) jelentős érdeklődés övezte az elmúlt két évtizedben. A VQE a variációs elvet használja kvantumos rendszerek alapállapot energiájának meghatározására, amely

a kvantumkémia és az anyagfizika alapvető problémája. A probléma megoldására alkalmazott hagyományos módszerek a pontosság és a hatékonyság korlátaival kerülnek szembe, mivel a meghatározni kívánt kvantumállapotok kezelése exponenciálisan növekvő klasszikus számítási kapacitást igényel. A VQE algoritmus megoldást nyújthat e korlátok leküzdéséhez, ezért ez az egyik legígéretesebb alkalmazás a kvantumszámítással járó előny demonstrálására, akár zajosan működő hardveren is. Ahogy a neve is sugallja, a VQE célja egy olyan kvantumrendszer alapállapotának közelítése, amelyet a klasszikus hardver segítségével nehéz implementálni. Ennek során felső korlátot adhatunk az alapállapot energiára, ideális esetben nagyon közel kerülve az egzakt megoldáshoz. A gyakorlati megvalósításban a kvantumállapot egy kvantumáramkörrel állítható elő, és a VQE algoritmus a kvantumáramkör megfelelő paramétereinek beállítását tűzi ki célul egy optimalizációs folyamat árán. Az optimalizálási folyamat során a kvantumáramkör paramétereit iteratív módon frissítjük a konvergencia beálltáig. Ezért a klasszikus optimalizálási algoritmus kiválasztása döntő szerepet játszik az algoritmus eredményességében. A VQE lehetséges alkalmazási területei nagyon szerteágazóak, beleértve a gyógyszerkutatást, anyagkutatást, kémiaihoz köthető mérnöki tervező kutatásokat, kvantumos optimalizációt és egyéb kvantumos gépi tanulások alkalmazásokat.

A VQE-hez hasonló kvantumalgoritmusok tekintetében a kvantumos előny demonstrálásának érdekében az irodalom négy elsődleges kutatási területet emel ki. Ezek célja az i) optimális mérési technikák kifejlesztése, ii) párhuzamosítási módszerek létrehozása több kvantumszámítógép bevonásával, iii) a tanítás során fellépő eltűnő gradienssekkel kapcsolatos lehetséges kihívások kezelése és iv) a hibacsökkentési módszerek feltárása, melyre az angol nyelvű irodalomban *error mitigation* néven hivatkoznak.

Saját kutatási munkánkban a iii) kutatási terület célkitűzéseivel foglalkoztunk, amely az angol nyelvű irodalomban *barren plateau*-ként emlegetett, azaz a lapos paramétertér problémájának megoldását célozza meg. A lapos paramétertér annak a jelenségnek a következménye, hogy a kvantumos modellben a kvantumbitek számának növekedésével exponenciálisan csökken a célfüggvény gradiense. A lapos paramétertérterületeket mutató célfüggvények esetében exponenciálisan sok mérésre lehet szükség a gradiensalapú optimalizálás során. Ez a skálázási kihívás nemcsak a gradiensalapú optimalizálásra érvényes, hanem a gradiensmentes optimalizálási módszerekre is, és megoldatlan kihívás marad még a magasabb rendű optimalizálási technikák alkalmazása esetén is. Számos módszert javasoltak már a lapos paramétertér problémájának kezelésére. A korai kutatási kezdeményezések a platók megkerülésére irányuló stratégiákra összpontosítottak az algoritmusok inicializálási szakaszában. Más munkák a kvantumáramkörök rétegenkénti optimalizálását javasolták, míg egyéb

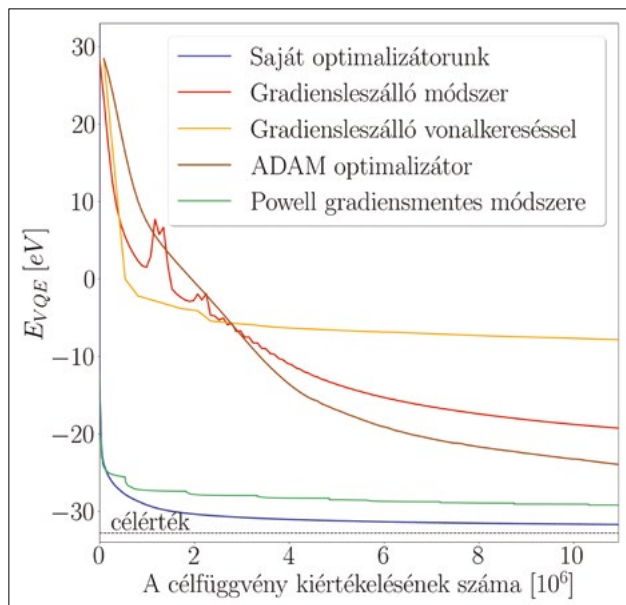
munkák egy véletlenszerű „kapuaktiváláson” alapuló módszert alkalmaztak, hogy fokozatosan lehessen növelni a kvantumáramkör kifejezőképességét. Új szemléletmódot hozott, amikor megmutatták, hogy platókat indukálhat a kvantumos összefonódás, de akár a zaj is. Fontos kiemelni, hogy a javasolt módszerek elsősorban arra összpontosítanak, hogy elkerüljék a platók kialakulását. Jelenleg nem létezik olyan ismert módszertan, amely képes lenne az optimalizálási folyamatot hatékonyan elvezetni a platók között.



3. ábra. Az Eötvös Loránd Tudományegyetem és a HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont által fejlesztett SQUANDER programcsomag felépítése [1]

A problémát saját kutatásaink keretein belül is megvizsgáltuk. Az Eötvös Loránd Tudományegyetem és a HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont által fejlesztett SQUANDER programcsomagban (3. ábra) implementált újszerű optimalizálási algoritmusunk jelentősen jobb hatékonyságot mutatott a VQE probléma megoldása során a hagyományos optimalizáló algoritmusokkal szemben. A SQUANDER nyílt forráskódú programcsomagot a GitHub közösségi megosztó platformon tettük elérhetővé a felhasználók számára [1]. Megmutattuk, hogy a költségfüggvény hosszú skálájú tulajdonságai felhasználhatóak az optimalizálási irány (melyet általában a gradiens iránya határoz meg) és a vonalkeresési távolság meghatározására. Módszerünk egy új vonalkeresésen alapuló megközelítést valósít meg a kvantumáramkörök tanítása során. Ezt úgy érjük el, hogy effektíve csökkentjük a tanítandó kvantumáramkör kifejezőképességét azzal, hogy az egyes iterációk az optimalizálási paramétereknek csak egy kisebb részhalmozát frissítik. A hagyományos gradiensalapú optimalizálási megközelítésekkel összehasonlítva – mint például a gradiensereszkedés vagy a gépi tanulás során gyakorta alkalmazott ADAM algoritmus – optimalizálási megközelítésünk hatékonyabbnak bizonyult az optimalizálási folyamat első szakaszában; itt a mi módszerünk jelentősen nagyobb javulást mutatott a célfüggvényben – sőt, kevesebb célfüggvény-kiértékeléssel ért el nagyobb javulást. A módszer matematikai hátterének részleteit egy korábbi publikációnkban mutattuk be [2]. A kifejlesztett optimalizálási stratégiánk hatékonyan csökkentette a VQE célfüggvényét több ezer iteráció alatt anélkül, hogy a platók csapdájába esett volna, ahogy ezt a 4. ábra szemlélteti.

A 4. ábra numerikus szimulációink eredményeit mutatja be, melyeket egy véletlenszerűen megkonstruált Heisenberg-modell alapállapotának becslése végett foly-



4. ábra. Különböző gradiensalapú és gradiensmentes optimalizáló eljárások hatékonysága (az alapállapot energiájának közelítése a célfüggvény-kiértékelési iterációk számának függvényében). Az optimalizálás célja egy véletlenszerű 16 kvantumbites Heisenberg-modell alapállapotának meghatározása

tattunk. A Heisenberg-modell, amely a spineken ható spinoperátorokkal írható le, a kvantum rendszerek legáltalánosabb formáját állítja elénk, amelyeket egy kvantumbit-alapú kvantumprocesszoron meg lehet valósítani. A spinek között fellépő, mágneses alapokon nyugvó kölcsönhatásokat többnyire a spinek egymás közti távolsága határozza meg. Pozsgay Balázs a *Fizikai Szemle* jelen példányában megjelent, az integrálható modellekről szóló cikkében részletesen ír a Heisenberg-modell matematikai megfogalmazásáról láncok mentén elhelyezkedő spinek esetében, ahol a kölcsönhatások a szomszédos spinek között lépnek fel. Ez a kép tovább általánosítható, ha a spinek a térben véletlenszerűen helyezkednek el. Ebben az esetben párok helyett egyszerre több spin is kölcsönhatásba léphet egymással. A 4. ábrán szemléltetett eredményeink olyan esetre vonatkoznak, amikor a spinek közelségéből kifolyólag spinhármasok között lépett fel kölcsönhatás. A véletlenszerűen kiválasztott spineken definiált Heisenberg-modellt nehéz szimulálni klasszikus eszközökkel. Mivel jelenleg még nem állnak rendelkezésünkre kellően alacsony zajszintű kvantumszámítógépek, a vizsgált kvantumáramköröket a SQUANDER programcsomagban elérhető nagyteljesítményű kvantumszámítógép-szimulátor felhasználásával tanítottuk. Az új optimalizálási technika hatékonyságának felméréséhez szándékosan kizártunk minden zajforrást az áramkörök szimulációjából, és tökéletes méréseket feltételeztünk a kvantumbiteken. Ez a megközelítés lehetővé tette számunkra, hogy kifejezetten a kifejlesztett optimalizáló módszer teljesítményének vizsgálatára összpontosítsunk a munkánk során.

A 16 kvantumbites rendszer elemzése során identitásoperátorokkal inicializáltuk az optimalizálást (azaz

nulla forgatási paraméterekkel kezdjük az optimalizálást), lehetővé téve a költségfüggvény meredek csökkenését, ahogyan azt a 4. ábra mutatja. Összehasonlításunk azt mutatja, hogy a gradiensalapú optimalizálók jelentősen alacsonyabb hatékonyságot mutatnak a 16 kvantumbites probléma megoldásában. Ezzel szemben az általunk kifejlesztett optimalizálási módszer fenn tartja hatékonyságát az iterációk első negyedében, gyorsan megközelítve az optimalizálás célértékét, ahogy azt a kék vonal mutatja a 4. ábrán. Meg kell azonban említenünk Michael Powell gradiensmentes optimalizálási módszerét is, mivel megközelítésünk hasonlóságokat mutat ezzel a módszerrel. Ebből kifolyólag a Powell optimalizálási módszerével végzett numerikus kísérletek nagyon közel kerültek eredményeinkhez. A mi megközelítésünk azonban két szempontból múlja felül Powell módszerét. Először is, az általunk kifejlesztett módszer a tanítandó kvantumáramkört leíró matematikai modell analitikus tulajdonságaira támaszkodva állapítja meg az optimalizálási irányt, az optimalizálandó célfüggvény függvényalakjához igazodva. Ezzel szemben Powell módszere általános elvekre támaszkodva, iteratív módon határozza meg az optimalizálási irányt, az előző iteráció során kinyert eredmények alapján, nem pedig a célfüggvényből kinyerhető információk alapján. Másodszor, Powell módszerével ellentétben megközelítésünk párhuzamosítható (az optimalizálási irányt párhuzamosan kiértékelhető mennyiségek határozzák meg), jelentősen lerövidítve a kvantumáramkör tanításához szükséges időt. Sajnos numerikus kísérleteink nem tudták pontosan reprodukálni a keresett alapállapotot. Ez azzal magyarázható, hogy az alkalmazott kvantumáramkör – annak alulparaméterezettségéből kifolyólag – nem feltétlenül alkalmas minden tetszőleges kvantumállapot előállítására.

Annak érdekében, hogy megértsük az általunk kifejlesztett optimalizálási módszer sikerét megalapozó tényezőket, összehasonlítjuk azt a gradiensalapú optimalizálókkal. Sajnos a paramétertér magas dimenziója nem teszi lehetővé a jelenség explicit vizsgálatát, ezért csupán kvalitatív magyarázattal szolgálhatunk. Az egyes iterációkban az optimalizálandó paraméterek kis részhalmozának kiválasztásával a kvantumáramkör kifejezőképessége effektíve csökken, hatékonyan mérsékelve ezzel az optimalizálás platóra jutásának kockázatát, amennyiben platómentes területről indítjuk az optimalizálást. Egy alacsony kifejezőképességű kvantumáramkör optimalizálásával a képzési folyamat minden iterációjában hatékonyan elkerülhetjük a platókat. Ezt a tendenciát a gradiensalapú megoldók esetében is megfigyeltük: az optimalizálás jelentősen hatékonyabbá vált, amennyiben az összes paraméter helyett azok véletlenszerű részhalmozát frissítettük iterációnként. A gradiensalapú megoldók azonban így sem értek fel módszerünk hatékonyságához, mivel azok nem támaszkodtak az optimalizálandó célfüggvény azon analitikus tulajdonságaira, melyek meghatározzák a célfüggvény hosszú léptékű tulajdonságait.

A felvázolt eljárás azonban nem oldja meg teljes mértékben a platók problémáját, mivel a paramétertér egy kiválasztott alterének optimalizálása csak az adott alternek megfelelő minimumot érheti el. Ha már közel kerültünk egy lokális minimumhoz (vagy egy platóhoz), a célfüggvény javulása is kicsivé válik. Egyszerre előnyös tehát bővíteni is és csökkenteni is az iterációnként kiválasztott paraméterek számát. Ez a két egymással versengő szempont meghatároz egy optimális paraméterszámosságot, melyeket iterációnként optimalizálva a leghatékonyabbá válik a VQE probléma megoldása. Numerikus eredményeink azt sugallják, hogy a paraméterek számosságának 50 körüli értéke válik a leghatékonyabb választássá az optimalizálás során.

Numerikus eredményeinkből azt a következtetést vonhatjuk le, hogy a munkánkban kifejlesztett valószínűség-alapú optimalizáló algoritmus – kihasználva a paramétertér hosszú léptékű tulajdonságait – ígére-

tes jelöltnek bizonyul a variációs kvantumproblémák nagyobb léptékű megoldásához, új lendületet adva a kvantumos gépi tanulás területéhez kapcsolódó kutatásoknak. Módszerünket ugyan kvantumszámítógépszimulátor segítségével fejlesztettük ki, azonban mindvégig szem előtt tartottuk annak valódi kvantumszámítógépen történő alkalmazhatóságát. Az optimalizálási módszert valódi kvantumprocesszorok alkalmazásával tervezzük továbbfejleszteni.

## Irodalom

1. <https://github.com/rakytap/sequential-quantum-gate-decomposer>
2. J. Nádori, G. Morse, Z. Majnay-Takács, Z. Zimborás, P. Rakytá, arXiv:2402.05227. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2402.05227>
3. R. S. Sutor: *Dancing with Qubits: From Qubits to Algorithms, Embark on the Quantum Computing Journey Shaping Our Future*. 2nd ed., Packt Publishing, March 2024. ISBN 978-1837636754

# KÖLCSÖNHATÓ KVANTUMRENDSZEREK SZIMULÁCIÓJA GÉPI TANULÁSSAL

Szabó Attila

Zürichi Egyetem, Fizika Tanszék, Zürich

E-mail: attila.szabo@physik.uzh.ch

Nagyszámú kölcsönható test mozgásának leírása a klasszikus fizikában is komoly kihívás. Jól ismert például (lásd Pozsgay Balázs cikkét a jelen számban), hogy három, gravitációsan kölcsönható test dinamikája általában kaotikus, és nem lehet pontosan megoldani. Ettől függetlenül a klasszikus mozgásegyenletek megoldásához szükséges számítási teljesítmény legfeljebb a testek számának hatványaival nő, így pl. a Naprendszer összes objektumának dinamikája pontosan szimulálható.

A kölcsönhatások kvantummechanikai kezelése még nagyobb kihívást jelent. A klasszikus mozgásegyenleteket a Schrödinger-egyenlet váltja fel, amelynek megoldásai nem egyszerűen a rendszer elemeinek pályái, hanem hullámfüggvények, amelyek a rendszer összes lehetséges konfigurációjának valószínűségét tartalmazzák. Ennek megfelelően a hullámfüggvény információtartalma exponenciálisan nő a részecskék számával, így egzak-

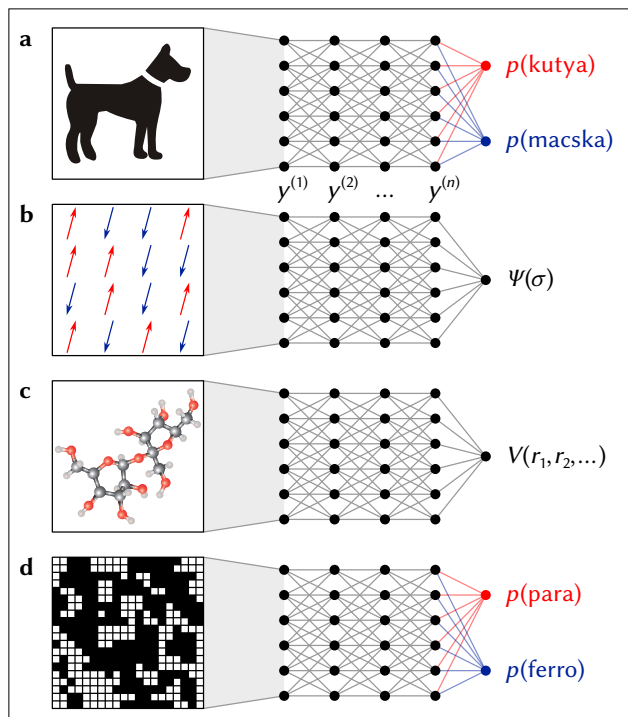
tul, nyers erővel csak nagyon kicsi rendszerek szimulálhatók. A kvantumkémiai és anyagtudományi szimulációk ezt a problémát számos különböző módon közelítik meg:

- Nem túl nagy rendszerek hullámfüggvénye továbbra is kiszámítható, feltéve, hogy az információtartalmukat kezelhető számú paraméterbe sűrítjük. Nyilvánvalóan egy megoldás sem alkalmas az összes lehetséges hullámfüggvény tömörítésére, így fontos, hogy a tömörített forma ki tudja fejezni a fizikailag fontos hullámfüggvényeket.
- Nagy molekulák hullámfüggvény-alapú szimulálása nem praktikus; ehelyett kémiai viselkedésüket az atommagok (közelítőleg klasszikus) mozgásából is levezethetjük. Az atommagokra ható erők viszont az elektronok kvantumos mozgásának függvényei, így ezek hatékony kiszámítása továbbra is fontos.
- A kvantumszámítógépeken és hasonló új platformokon végzett kísérletek nagy mennyiségű, részletgazdag adatot produkálnak, amelynek teljes hasznosítása kifinomultabb adatfeldolgozást igényel, mint a hagyományos, anyagokon végzett kísérletek.

Ebben a cikkben a gépi tanulás és különösen a neurális hálózatok alkalmazásait járjuk körül a három fenti példára, amelyek messze nem merítik ki az összes lehetőséget [1]; Rakytá Péter cikke a jelen számban a gépi tanulás kvantumszámítógépekre való alkalmazásait járja körül.



Szabó Attila a Zürichi Egyetem (Universität Zürich) tudományos munkatársa. Fő kutatási területe a szorosan kölcsönható sokrészecskerendszerek elméleti és számítógépes modellezése, különös tekintettel a mágneses anyagok kvantumos tulajdonságaira.



1. ábra. Neurális hálózatok négy lehetséges alkalmazása. a) *Képfelismerés*: a bemenet egy kép (pixelek világosságértékei), a kimenet annak a valószínűsége, hogy a kép különböző dolgokat ábrázol. b) *Neurális hullámfüggvény*: a bemenet a rendszer szabadsági fokainak egy konfigurációja (spinek iránya, elektronok helyzete, ...), a kimenet e konfiguráció amplitúdója a hullámfüggvényben. c) *Neurális potenciálfüggvény*: a bemenet egy molekula atom(mag)jainak helyzete, a kimenet a molekula alapállapotú energiája ebben a konformációban. d) *Fázisfelismerés*: a bemenet a rendszer pillanatnyi konfigurációja, a kimenet annak a valószínűsége, hogy a rendszer különböző termodinamikai fázisokban van

A neurális hálózatok rövid bevezetése után látni fogjuk, hogyan használhatjuk őket akár hullámfüggvények leírására, akár egy molekulában az atomokra ható erők modellezésére, akár arra, hogy kísérleti vagy szimulációs adatokból azonosítsuk egy rendszer fázisait (1. ábra). Mindhárom példa jól illusztrálja, hogy a feladat fizikai megértése – beleértve annak szimmetriáit és a lokalitás szerepét – elengedhetetlen ahhoz, hogy hatékony neurális hálózatokat tervezzünk.

## Neurális hálózatok...

Az első neurális hálózatok az 1960-as években jelentek meg a gépi tanulásban. Ezeket az emberi agyat működető neuronhálózatok inspirálták, ahol a neuronok elektromos jeleket küldenek egymásnak, amelyek együttes hatása dönti el, hogy milyen jeleket küldenek tovább. Ugyanígy, egy egyszerű *előrecsatolt neurális hálózat* (feedforward neural network) először a bemenetek (pl. egy kép pixeleinek világosságértékei) lineáris kombinációját veszi, majd egy  $f$  nemlineáris függvényt alkalmaz rájuk:

$$y_j^{(1)} = f\left(\sum_i W_{ij}^{(1)} x_i\right), \quad (1)$$

ahol  $W_{ij}^{(1)}$  egy sor optimalizálható („tanulható”) paraméter. Az agy az érzékszervekből érkező jeleket hierarchikusan dolgozza fel: a „nyers adatok” több agyi területen is áthaladnak, amelyek egyre magasabb szintű információt vonnak ki belőlük. Egy mesterséges neurális hálózatot ugyanígy kibővíthetünk további rejtett rétegekkel, amelyek az előző rétegek kimeneteit dolgozzák fel tovább:

$$y_j^{(k)} = f\left(\sum_i W_{ij}^{(k)} y_i^{(k-1)}\right). \quad (2)$$

Néhány ilyen réteg után a bemenő adatokat a kívánt kimenet formátumára (pl. annak a valószínűségére, hogy a kép egy kutyát vagy macskát ábrázol) hozzuk.

A hálózatot ezután *tanítani* kell, azaz a  $W$  paramétereket úgy kell beállítani, hogy a hálózat a kívánt kimeneteket adja vissza. A legegyszerűbb megoldás az *ellenőrzött tanulás* (supervised learning) ahol számos bemenet-kimenet pár már adott. A „tanulás” egy *hibafüggvény* (loss function) minimalizálását jelenti, amely a hálózat kimenetének a kívánt kimenettől való eltérését méri. A fenti „kutya vagy macska” példában

$$L = - \sum_{\text{minták}} \log p(\text{helyes válasz}) \quad (3)$$

egy megfelelő hibafüggvény:  $L$  mindig legalább 0, ezt a minimumot pedig akkor éri el, ha a hálózat minden bemenetre 100% valószínűséggel a helyes választ adja vissza.  $L$  a hálózat paramétereinek függvénye, így a feladat azok optimalizálása úgy, hogy  $L$  minél kisebb legyen. A legegyszerűbb algoritmus a *gradiensleszállás* (gradient descent).  $L$  gradiense,  $\partial L / \partial W_i$  a leggyorsabb növekedés irányába mutat, így a paraméterek ellenkező irányba lép-tetésével  $L$  csökkenthető:

$$W_i \rightarrow W_i - \alpha \frac{\partial L}{\partial W_i}, \quad (4)$$

ahol  $\alpha$  az optimalizálás sebességét szabályozó paraméter. A gradiens sokrétű neurális hálózatokban is hatékonyan kiszámítható a láncszabály segítségével; modern gépi tanulási könyvtárakban ez a folyamat már teljesen automatizált.

A gépi tanulás elmúlt évtizedének sikerei túlnyomórészt annak köszönhetőek, hogy a sokrétű („mély”) neurális hálózatok tetszőlegesen bonyolult függvényeket is pontosan képesek közelíteni, míg a gradiensleszálláshoz hasonló optimalizációs algoritmusok viszonylag kis hálózatokkal is hatékonyan megtalálják ezeket a közelítéseket.

...mint hullámfüggvények

Egy sokrészeske-hullámfüggvény leírása sok szempontból hasonlít a fenti képfelismerési feladathoz: a rendszer lehetséges konfigurációit ( $x$ ) egy sor „bemenet” (pl. az összes elektron helyzete) írja le; a hullámfüggvényt úgy definiáljuk, hogy ezek minden kombinációjához egy

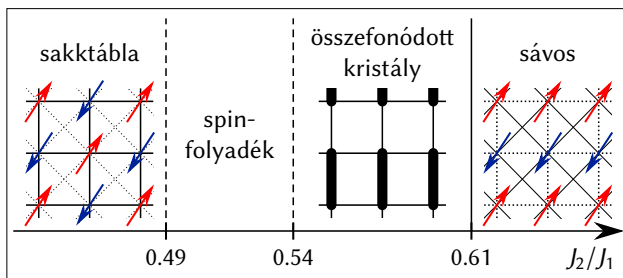
$\Psi(x)$  valószínűség-amplitúdót rendelünk. Sok esetben ezek a szabadsági fokok egy szabályos rácsot alkotnak, akárcsak egy digitális kép pixelai. Ebből az analógiából kiindulva a hullámfüggvényt egy neurális hálózattal is leírhatjuk, amely a paraméterek optimalizálásával „megtanulhatja” a kérdéses kvantumállapotot. Konkrétabban egy Hamilton-operátor alapállapotának keresésénél a hibafüggvény szerepét a kvantumállapot energiája,  $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ , tölti be, lévén az energia az alapállapotban a legalacsonyabb.  $E$  és a gradiense,  $\partial E / \partial W_i$  nem számolható ki egzaktul nagyobb rendszerekre, viszont megbízhatóan becsülhető a hullámfüggvényből való mintavétel-lel [2], így a gradiensleszállás hatékonyan használható.

Ezt a módszert először mágneses kvantumrendszerekre alkalmazták [3]. Az alábbi Hamilton-operátor különösen sok figyelmet kapott:

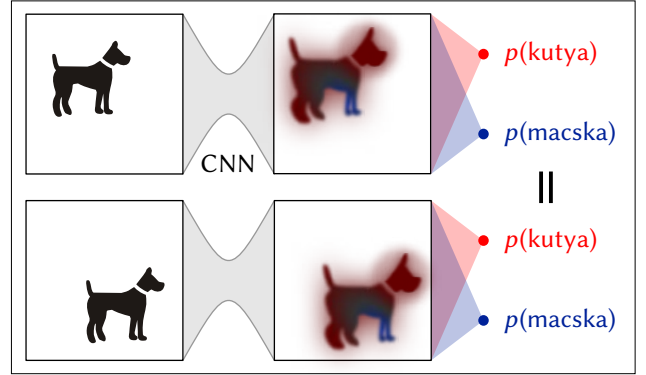
$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (5)$$

ahol a két összeg egy négyzetrács élein és átlóin fut végig; minden rácspontban pedig egy erősen fluktuáló feles spinoperátor  $\vec{S}_i$  helyezkedik el. Külön-külön mindkét tag alapállapota rendezett: az első tag akkor a legalacsonyabb, ha a szomszédos spinek ellentétes irányba mutatnak, így az alapállapotban a spinek irányai sakktáblamintába rendeződnek; a második tag alapállapota hasonló elven ellentétes spinű sávokból áll (2. ábra).  $J_2/J_1 = 1/2$  körül a két fázis közti vetélkedés minden hagyományos mágneses rendeződést meggátol; az alapállapotot ehelyett a spinek szoros kvantumos összefonódása határozza meg. E köztes fázisok természete régóta nyitott kérdés és a magas hőmérsékletű szupravezetők fizikájának megértése szempontjából is érdekes. A neurális hullámfüggvények minden korábbinál jobban megközelítik az alapállapot energiáját, így pontosabb betekintést nyújtanak a 2. ábrán látható fázisdiagramba [4, 5].

Ehhez a sikerhez fontos, hogy a Hamilton-operátor szimmetriáit (pl. a rács eltolás- és forgásszimmetriáját) beépítsük a neurális hálózat szerkezetébe. Ez egy újabb analógia a képfelismerési feladattal: egy kutya képét mindig ugyanúgy kell felismerni, függetlenül a kutya



2. ábra. A  $J_1$ - $J_2$  modell (5) alapállapoti fázisdiagramja [4]. Ha az élek (átlók) menti kölcsönhatások dominálnak, az ellentétes irányba mutató spinek sakktábla- (sáv-) mintába rendeződnek. A kettő közti vetélkedés mágneses rendeződés nélküli, kvantum-összefonódás által dominált átmeneti fázisokhoz vezet. Ez az összefonódás lehet rövid távú és rendezett (angolul *valence bond solid*) vagy hosszú távú és teljesen szimmetrikus (spinfolydék)



3. ábra. Egy konvolúciós neurális hálózat (CNN) minden rejtett rétege a bemenet geometriájára hasonlít, és a bemenet eltolásával a kimenet is ugyanúgy tolódik el, ezért az összes kimenet összege eltolásszimmetrikus

helyétől a képen. Az eltolásszimmetriát *konvolúciós neurális hálózatok* (convolutional neural networks, CNN, 3. ábra) használatával garantálhatjuk: ezekben a rejtett  $y^{(k)}$  rétegek geometriája megegyezik a bemenetével, és a  $W_{ij}^{(k)}$  paraméterek csak  $i$  és  $j$  egymáshoz viszonyított helyzetétől függenek. Ennek eredményeként a bemenet eltolásától a rejtett rétegek tartalma nem változik, csak ugyanannyira eltolódik, így az utolsó réteg elemeinek összege szimmetrikus lesz. Mivel a szimmetrikus hullámfüggvények Hilbert-tere kisebb, mint minden lehetséges állapoté, egy szimmetrikus neurális hálózat gyorsabban és megbízhatóbban tanul, és a végeredmény is pontosabb lesz.

A neurális hullámfüggvények kölcsönható elektronok szimulálására is használhatók. A hullámfüggvény szimmetriája itt is kulcsszerepet játszik: a Pauli-féle kizárási elv miatt egy elektron-hullámfüggvény előjele ellentétesre vált, ha bármely két elektron sorrendjét megcseréljük, azaz

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots) = -\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots). \quad (6)$$

A legtöbb szimulációs módszerben a folytonos elektronkoordinátákat véges számú atomi vagy molekulapályára kell korlátoznunk. Ezzel szemben a neurális hullámfüggvények ideális bemenete éppen az elektronok helyzete,  $\mathbf{r}_i$  [6]. A Pauli-elv (6) betartatására  $\Psi(\mathbf{r}_i)$ -t egy általánosított Slater-determinánssként számítjuk ki. A neurális hálózat nem közvetlenül a teljes sokrészecske-hullámfüggvényt írja le, hanem a Slater-determinánst alkotó effektív molekulapályákat, amelyek a többi elektron helyzetére is érzékenyek (pl. kisebb valószínűséggel közelítenek meg másik elektronokat, amelyekkel elektromosan taszítják egymást), így sokkal kompaktabb neurális hálózatokkal is pontos eredmények érhetők el. Mivel a neurális hullámfüggvények nemcsak bizonyos molekulapályákra, hanem a teljes Hilbert-térre definiáltak, jelentősen javítanak minden korábbi szimulációs módszeren, és jelentős hatással vannak a kvantumkémiaira és újabban a szilárdtestfizikára is. Rácsokon definiált modellekre (pl. a magas hőmérsékletű szupravezetők standard modelljeire) ugyanez a siker még várat magára; a rács szimmetriáinak

beépítése a neurális hálózatokba egy különösen fontos megoldandó probléma.

...mint molekuláris energiafelületek

Néhány száznál több elektron teljes hullámfüggvényének szimulálása kifinomult közelítő módszerekkel is szinte lehetetlen, viszont a legtöbb kémiai folyamat megértéséhez nem is szükséges. Mivel az elektronok sokkal könnyebbek az atommagoknál, sokkal gyorsabban mozognak, így szinte azonnal követik az atommagok mozgását, és mindig a pillanatnyi alapállapotban maradnak (ez az ún. Born–Oppenheimer-közelítés). Továbbá, az atommagok mozgása sokkal kevésbé kvantumos, mint az elektronoké, azaz jó közelítéssel klasszikus részecskéként mozognak egy  $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$  potenciálban:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad (7)$$

ahol  $-\partial V/\partial \mathbf{r}_i$  az egyes atommagokra ható effektív erő. A Born–Oppenheimer-közelítésben  $V$  az elektronok alapállapotú energiája az adott molekulakonformációban: a sűrűségfukcionál-elmélet (density functional theory, DFT) segítségével ez az energia és az effektív erők hatékonyan becsülhetők a teljes hullámfüggvény kiszámítása nélkül.

Nagy molekulákra (pl. fehérjék) azonban a DFT-alapú számítás is időigényes, ezért nem célszerű újra és újra elvégezni a (7) mozgásegyenlet megoldása közben. A számítási idő drasztikusan csökkenthető, ha a DFT-adatpontokhoz egy egyszerűbben kiszámítható függvényt illesztünk, feltéve hogy a függvény jól közelíti a valódi energiafelületet két adatpont között. Molekuladinamikai szimulációkat pl. polinomiális közelítésekkel a modern gépi tanulás megjelenése előtt is sikerrel végeztek kis molekulákra. Mivel azonban a neurális hálózatok haték-

konyabban közelítenek bonyolult sokváltozós függvényeket, célszerűbben használhatók a  $V(\mathbf{r}_i)$  energiafelület közelítésére.

Ideális esetben a hálózatot sok különböző molekulát használva egyszer s mindenkorra betanítanánk úgy, hogy utána új összetételű molekulákat is szimulálhassunk vele. Ehhez a hálózatot az egyes atomokat képviselő blokkokra kell osztanunk, amelyeket a kívánt összetétel szerint adhatunk a hálózathoz vagy hagyhatunk el; az extenzív teljes energiát is célszerű az egyes atomok hozzájárulásának összegeként kifejezni. A legsikeresebb ilyen struktúra az *üzenetváltó neurális hálózat* (message-passing neural network, MPNN, 4. ábra), amelyben az atomok mint egy gráf csúcsai jelennek meg, és ennek élei egy határértéknél (általában 5–10 Å) közelebbi atomokat kötnek össze. Először a gráf csúcsaihoz és éleihez egy sor számot ( $x_i, x_{ij}$ ) rendelünk (pl. pozíció, atomi rendszám, oxidációs szám; kötéstávolság stb.). Maga a neurális hálózat egy sor üzenetváltásból áll. Minden irányított élhez egy *üzenetet* rendelünk:

$$m_{i \rightarrow j} = M(x_i, x_{ij}, x_j), \quad (8a)$$

amelyeket minden csúcson összesítünk (pl. összeadjuk ezeket). A csúcsok adattartalmát ezen üzenetek alapján frissítjük:

$$x'_i = V(x_i, \sum_j m_{j \rightarrow i}). \quad (8b)$$

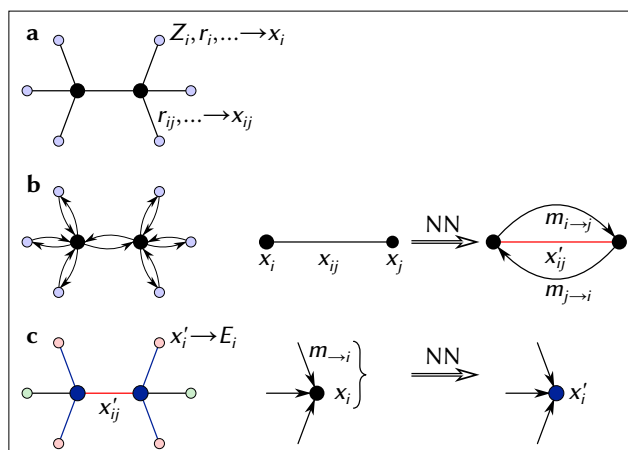
Az élek adattartalmát szintén frissítjük a két végpont adattartalmának függvényében:

$$x'_{ij} = E(x_{ij}, x_i, x_j). \quad (8c)$$

A gyakorlatban az  $M, V, E$  függvények kis neurális hálózatok. Egy sor üzenetváltás után a molekula teljes energiáját az egyes atomok hozzájárulásának összegeként kapjuk meg, amelyeket a csúcsok végső adattartalma alapján számítunk ki.

A fenti struktúra a neurális potenciálok második generációjára [7] jellemző. Ezek szerkezetüknél fogva extenzívek és lokálisak, tanítás után tetszőleges molekula-összetételhez használhatóak, és a kimenetük nem függ az atomok felsorolásának sorrendjétől a bemenetben: mindezek komoly problémákat okoztak az első generációs, egyszerű előrecsatolt neurális hálózatokon alapuló potenciálfelületeknek. Továbbá, ha a csúcsok és élek adattartalmát skalár, vektor, ... komponensekre bontjuk,  $V$  szimmetrikussá tehető a koordináta-rendszer eltolására és elforgatására, ami kulcsfontosságú az atomokra ható erők és forgatónyomatékok megbízható becsléséhez. A hálózatok pontossága tovább javítható hosszú távú (pl. Coulomb-) erők explicit hozzáadásával (ún. harmadik és negyedik generációs potenciálok); a javulás azonban viszonylag kicsi és praktikus célokra nem áll arányban a szükséges számítási erőforrásokkal.

Ezek a neurális potenciálfelületek széles körben használatosak a kémiai, anyagtudományos és molekuláris biológiai kutatásban. A gépi tanulás más széles körben



4. ábra. Egy üzenetváltó neurális hálózat (MPNN) elemei. a) Az atomok (csúcsok) és kötések (élek) adataiból bemeneti adatsorokat ( $x_i, x_{ij}$ ) készítünk. b) Az él és két végpontjának adataiból egy neurális hálózat üzeneteket ( $m_{i \rightarrow j}, m_{j \rightarrow i}$ ) generál és frissíti az él adatait ( $x'_{ij}$ ). c) A beérkező üzenetek alapján egy neurális hálózat frissíti a csúcsok adatait ( $x'_i$ ). Az utolsó üzenetváltások után az egyes atomok hozzájárulását a teljes energiához a csúcsok adataiból számítjuk ki

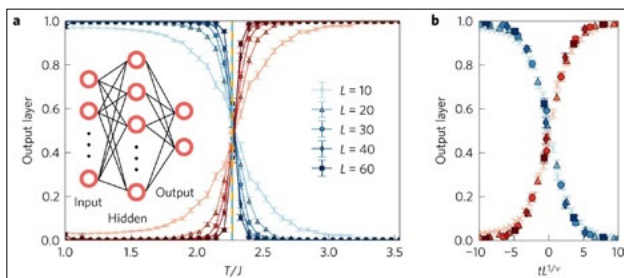
elterjedt alkalmazásaihoz hasonlóan számos, nagyszámú példán előre betanított potenciál is létezik [8], amelyek tovább egyszerűsítik a szimulációkat.

### ...fázisátalakulások azonosítására

Egy klasszikus termodinamikai rendszer szimulálásának legegyszerűbb módja a statisztikus eloszlásból való mintavétel. Első közelítésben egy ilyen szimuláció több adatot (egy sor pillanatfelvételt a rendszer összes szabadsági fokáról) produkál, mint amit egy ember közvetlenül át tud tekinteni. Ha a rendszer fázisai ismertek vagy megípellhetők, az egyes rendezett fázisok rendparaméterei és ezek fluktuációi és korrelációi kiszámíthatók a nyers adatokból. Ezek segítségével a paraméterek különböző értékeit hozzárendelhetjük az egyes fázisokhoz, azaz megrajzolhatjuk a rendszer fázisdiagramját (erre egy példa a 2. ábra).

Ezzel a módszerrel viszont sosem lehetünk teljesen biztosak, hogy a rendszer összes fázisát megtaláltuk. A gépi tanulás haszna ebben a feladatban az, hogy a bemenet szabályosságait anélkül tudja felismerni, hogy előre megadnánk, hogy mik ezek a szabályosságok, így egy gépi tanulási algoritmus akkor is meg tud különböztetni két fázist, ha egyszerű rendparaméterek nem ismertek vagy nem léteznek.

Ha tudjuk, hogy létezik két különböző fázis, ezeket standard képfelismerő stb. algoritmusokkal meg tudjuk különböztetni egymástól [9]. A neurális hálózat tanításához szükséges adatokat a fázisátmenettől távol generáljuk mindkét fázisban; maga a tanítás ugyanúgy történik, mint az első „kutya vagy macska” példában. A betanított hálózatot ezután a fázisátárhoz közelebbi szimulációkra futtatjuk le: ahogy átlépjük a határt, az egyes fázisok becsült valószínűsége folytonosan változik 0-ról 1-re; az átmenet annál élesebb, minél nagyobb rendszereket szimulálunk (5. ábra).

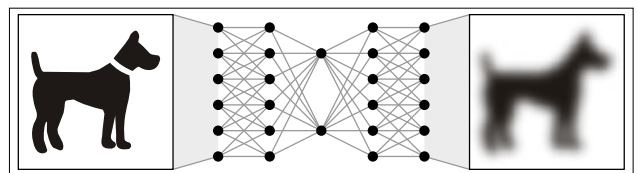


5. ábra. Neurális hálózat által becsült fázisok egy  $L \times L$ -es négyzetláncos definiált Ising-modellre [9]. Az adatsorok a paramágneses (piros) és a rendezett ferromágneses (kék) fázisok becsült valószínűségét mutatják. A fázisátalakulástól (függőleges szaggatott vonal) távol mindkét fázis pontosan beazonosítható; az átmenet a másodrendű fázisátalakulástól elvárt módon nagyobb rendszerekre egyre élesebb

Szerencsésebb lenne viszont, ha ilyen előzetes információk nélkül is azonosítani tudnánk a rendszer fázisait. Az előző technikát ehhez az *ellenőrizetlen tanulási* (unsupervised learning) feladathoz is felhasználhatjuk: vegyünk két közeli pontot a paraméterek terében, *tegyük*

*fel*, hogy különböző fázisokban vannak, és tanítsunk be egy neurális hálózatot, hogy megkülönböztesse ezeket. Ha a két pont valóban különböző fázisokban van, a hálózat sokkal sikeresebb lesz, mintha ugyanabban a fázisban lennének. Ezt a műveletet ismételve a rendszer minden fázisátmenete feltérképezhető.

A különböző paraméterekkel végzett szimulációkat automatikusan, pusztán az adatok hasonlóságai és különbségei alapján is különböző fázisokra oszthatjuk. Az *autoencoder* neurális hálózatokat (6. ábra) ilyen osztályozásra tervezték: a bemenet és a kimenet szerkezete megegyezik, de van egy szűk keresztmetszet középen, sokkal kevesebb neuronnal, mint a bemenet információ-tartalma. A tanításhoz használt hibafüggvény a bemenet és a kimenet közti eltérés, így a betanított hálózat a lehető legpontosabban reprodukálja az összes adatot, amit a tanítás során látott. A betanított hálózat szűk keresztmetszete így az adatok legfontosabb jellemzőit tartalmazza, erősen tömörítve. Márpedig a különböző fázisokban gyűjtött szimulációs adatok közti legdrasztikusabb különbségek éppen az egyes fázisok között mutatkoznak, ezért az ugyanahhoz a fázishoz tartozó összes paraméterválasztás a tömörített formában egymáshoz közel képeződik le, a különböző fázisok reprezentációi eltávolodnak egymástól, így kiemelve a fázisokat és a határaikat [10].



6. ábra. Egy autoencoder neurális hálózat bemenete és kimenete azonos szerkezetű, és betanítás után minden bemenetet a lehető legpontosabban önmagára képez. A középen levő szűk keresztmetszet ezért a tanításhoz használt adatok legfontosabb eltéréseit tanulja meg kivonni

Az ily módon talált fázisok fizikai leírásához hasznos lenne rendparamétereket találni, amelyek megkülönböztetik ezeket más fázisoktól. A neurális hálózatok bonyolult szerkezetük miatt nem ideálisak erre a célra, más gépi tanulási technikák viszont használhatóak. Egy lehetséges megoldás az, hogy a rendszer összes korrelációját kiszámítjuk egy adott rendig (pl. legfeljebb 4 szabadsági fok), és megkeressük az egyes komponensek közül a legnagyobbakat, azaz a legvalószínűbb rendparamétereket [11]. Ezt az értelmezhetőséget azonban a hatékonyság kárára érjük el: a fenti példában előre el kell döntenünk, hogy milyen típusú rendparamétereket veszünk figyelembe, így a bonyolultabb fázisok továbbra is rejtve maradnak. Ezzel szemben egy neurális hálózat közvetlenül a szimulált adatokkal is tud dolgozni, így elvben bármilyen fázist képes azonosítani; ezeket a fázisokat azonban továbbra is nehéz lehet leírni.

A fentiek nemcsak számítógépes szimulációkhoz hasznosak, hanem olyan új kísérleti platformokon is, mint a kvantumszámítógépek vagy az optikai rácsokban mozgó ultrahideg atomok, ahol valódi anyagokban el képzelhetetlen mérések is elvégezhetők. Mivel ezekben

a rendszerekben minden szabadsági fok jól elkülönül a többitől, lehetőség van arra, hogy külön-külön mind-egyiket megmérjük, lényegében olyan pillanatfelvételt készítve, mint amelyet egy számítógépes szimulációban kapnánk. A fenti gépi tanulási módszerek ezért kitűnőek arra, hogy ezekből az adatokból a lehető legtöbb információt kinyerjük. Ennél ambiciózusabb feladat, hogy egy kvantumesszközön végzett mérések segítségével rekonstruáljuk a teljes kvantumállapotot, hogy így minden más mérési eredményt is megjósolhassunk. A neurális hullámfüggvények ilyen *kvantumállapot-tomográfiára* (quantum state tomography) is jól használhatók.

## Kitekintés

A fenti példák messze nem fedik le a gépi tanulás minden fizikai alkalmazását [1]; a részecskefizikai kísérletek által produkált óriási mennyiségű adat feldolgozása például elképzelhetetlen lenne hatékony gépi tanulás nélkül. Azt viszont jól illusztrálják, hogy a sikeres gépi tanuláshoz elengedhetetlen, hogy a feladat fizikai tulajdonságai által motivált neurális hálózatokat és algoritmusokat használjunk. A nyitott kutatási kérdések is főleg ekörül forognak: ki lehet-e vonni egy rendszer fázisainak fizikai leírását egy neurális hálózattól? Milyen neurális hálózat tud jól leírni elektron- (spin-, ...) hullámfüggvényeket? E kérdések megválaszolásához a közkeletű elképzeléssel szemben nem csak számítógépekre van szükség: az emberi kreativitás és intuíció legalább olyan fontos, mint bármely más kutatási területen.

## Irodalom

1. G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer, L. Daudet, M. Schuld, N. Tishby, L. Vogt-Maranto, L. Zdeborová: Machine learning and the physical sciences. *Rev. Mod. Phys.*, 91, (2019) 045002, arXiv:1903.10563.
2. F. Becca, S. Sorella: Quantum Monte Carlo Approaches for Correlated Systems. Cambridge University Press, Cambridge, 2017.
3. G. Carleo, M. Troyer: Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science*, 355, (2017) 602, arXiv:1606.02318.
4. Y. Nomura, M. Imada: Dirac-type nodal spin liquid revealed by refined quantum many-body solver using neural-network wave function, correlation ratio, and level spectroscopy. *Phys. Rev. X*, 11, (2021) 031034, arXiv:2005.14142.
5. C. Roth, A. Szabó, A. H. MacDonald: High-accuracy variational Monte Carlo for frustrated magnets with deep neural networks. *Phys. Rev. B*, 108, (2023) 054410, arXiv:2211.07749.
6. D. Pfau, J. S. Spencer, A. G. D. G. Matthews, W. M. C. Foulkes: Ab initio solution of the many-electron Schrödinger equation with deep neural networks. *Phys. Rev. Res.*, 2, (2020) 033429, arXiv:1909.02487.
7. E. Kocer, T. W. Ko, J. Behler: Neural network potentials: A concise overview of methods. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 73, (2022) 163, arXiv:2107.03727.
8. I. Batatia, D. P. Kovács, G. N. C. Simm, C. Ortner, G. Csányi, MACE: Higher order equivariant message passing neural networks for fast and accurate force fields. (2022) arXiv:2206.07697.
9. J. Carrasquilla, R. G. Melko: Machine learning phases of matter. *Nat. Phys.*, 13, (2017) 431, arXiv:1605.01735.
10. S. J. Wetzel: Unsupervised learning of phase transitions: From principal component analysis to variational autoencoders. *Phys. Rev. E* 96, (2017) 022140, arXiv:1703.02435.
11. J. Greitemann, K. Liu, L. D. C. Jaubert, H. Yan, N. Shannon, L. Pollet: Identification of emergent constraints and hidden order in frustrated magnets using tensorial kernel methods of machine learning. *Phys. Rev. B* 100, (2019) 174408, arXiv:1907.12322.

# INTEGRÁLHATÓ MODELLEK A KVANTUM-SZÁMÍTÓGÉPEN

Pozsgay Balázs

ELTE, Elméleti Fizikai Tanszék, Budapest  
E-mail: pozsgay.balazs@gmail.com

## 1. A kvantum szimuláció ötlete

A legtöbb fizikai rendszer olyan, hogy bár ismerjük a rendszer viselkedését leíró mozgástörvényeket, alapvető egyenleteket, ezek megoldása és a rendszer visel-



Pozsgay Balázs elméleti fizikus az ELTE Fizikai Intézetében, az Elméleti Fizikai Tanszéken dolgozik, ahol egy „Lendület” kutatócsoportot vezet. Munkájában elsősorban az integrálható modellek dinamikájával foglalkozik.

kedésének pontos előrejelzése analitikus módszerekkel nem lehetséges. Viszonylag kevés olyan probléma van, ahol egzakt megoldást tudunk adni. A klasszikus fizikában fontos példa a gravitációs soktestprobléma: míg egy bolygónak a Nap körüli mozgását pontosan le tudjuk írni a Kepler-törvényekkel, három gravitáló test egymásra hatását és a kialakuló mozgást már nem lehet képletekkel leírni, előrejelezni. Ugyanakkor egy klasszikus fizikai soktestprobléma, még ha nem oldható is meg képletekkel, legalább számítógépen viszonylag könnyen szimulálható.

Ezzel ellentétben a kvantummechanikai soktestproblémák nem szimulálhatóak hatékonyan – a Hilbert-tér exponenciálisan növekvő mérete miatt. Ez a probléma vezette Richard Feynmant arra, hogy megalkossa a kvan-

tumszámítógép elgondolását. Egy 1981-es előadásában fogalmazta meg a híressé vált szavait [1]: „Nature isn’t classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you’d better make it quantum mechanical, and by golly it’s a wonderful problem, because it doesn’t look so easy.”

Feynman tehát azt javasolta, hogy ha a kvantummechanikai törvényekkel leírható természetet akarjuk szimulálni, akkor legyen a számítógépünk is kvantum. Évtizedekkel később ez az elgondolás végül megvalósult, legalábbis bizonyos részleteiben. Ma már léteznek kvantumszámítógépek, amelyek képesek kvantummechanikai „számítások” elvégzésére. Ezáltal – legalábbis elvben – lehetővé vált, hogy kivitelezzük Feynman eredeti tervét.

A ma elérhető kvantumszámítógépek nagyon zajosak (kb. 0,1%-os hibaráta logikai kapunként), és túl kevés kvantumbit (kb. 100) tartalmaznak ahhoz, hogy a gyakorlati hasznosításuk lehetővé váljon. Olyan típusú feladatokat, mint például új gyógyszerek vagy egyéb molekulák tervezése a közeli jövőben valószínűleg nem fognak tudni megoldani. Mindamellet a mai technológia ahhoz már elegendő, hogy bizonyos egyszerű fizikai rendszereket a kvantummechanika szabályai szerint szimuláljon. Ez egy jelentős mérföldköve a mai fizikának és a mérnöki tudásnak.

Ebben a cikkben ezekre a ma már megvalósított kvantum szimulációkra mutatunk példákat, mégpedig az integrálható modellek területéről. Az alább említett példákban különösen érdekes módon fonódnak össze az analitikus számolások, a klasszikus szimulálhatóság és a kvantum számítások témakörei.

## 2. Az integrálható modellek

Az integrálható modellek a fizikai rendszerek szűk, speciális osztályát írják le. Ezek olyan rendszerek, amelyekben sok extra megmaradó mennyiség létezik a hagyományos megmaradó mennyiségeken túl. Ezek az extra megmaradó mennyiségek a mozgástörvények nagyon speciális voltából fakadnak. Ezek a különleges tulajdonságok lehetővé teszik a modellek egzakt megoldását, vagy legalábbis bizonyos fizikai mennyiségek egzakt, analitikus módon történő kiszámítását. Integrálható modelleket találunk a klasszikus fizikában és a kvantum világban is. Ezek a rendszerek szinte kizárólag egy térbeli dimenzióban léteznek. Ugyanakkor ezek a rendszerek egyáltalán nem triviálisak, és mint látni fogjuk alább, ezt a területet jelenleg is aktívan kutatják mind elméleti, mind kísérleti oldalról.

Az integrálható modellek története egészen a kvantummechanika hőskoráig nyúlik vissza. Az első ilyen típusú modell felfedezése és megoldása közel egyidős a kvantummechanikával: Hans Bethe 1931-ben adta meg az ún. Heisenberg-spinlánc egzakt megoldását. Ez a modell eredetileg a mágnesség leírására szolgált, azonban később a matematika és fizika számos ágának fejlődését befolyásolta. A modell Hamilton-operátora a következő

tömör alakba írható:

$$\hat{H} = \sum_j \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1}. \quad (1)$$

Itt  $\mathbf{S}$  egy operátorokból alkotott 3 elemű vektor, melynek komponensei  $S^a = \hat{\sigma}^a/2$ , ahol  $a = x, y, z$  és  $\hat{\sigma}^a$  a Pauli-mátrixokat jelöli. A  $j$  index adja meg a spinek sorszámát, koordinátáját.

Ebben a modellben viszonylag egyszerűen leírhatóak a magasabb megmaradó mennyiségek. Az első új megmaradó mennyiség például a következő, háromrácspontos operátorsűrűséggel leírható töltés:

$$\hat{Q}_3 = \sum_j \hat{\mathbf{S}}_j \cdot (\hat{\mathbf{S}}_{j+1} \times \hat{\mathbf{S}}_{j+2}). \quad (2)$$

A magasabb töltések bonyolultabb alakúak, de viszonylag egyszerűen lehet rájuk egzakt formulákat találni, lásd [2].

A fenti spinláncmodellen kívül számos más rácsmo-dell is ismeretes. Híres és központi szerepet tölt be az ún. Ising-féle kvantum spinlánc. 1944-ben Lars Onsager oldotta meg a kétdimenziós Ising-modellt, ami a statisztikai fizika egyik központi modellje. A kétdimenziós klasszikus rendszer megoldásához szorosan kapcsolódik az Ising-spinlánc, melynek Hamilton-operátora a következő:

$$\hat{H} = \sum_j \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z + h \hat{S}^x, \quad (3)$$

ahol  $h$  a transzverzális mágneses tér.

A Heisenberg-modellnek, az Ising-láncnak és más integrálható modelleknek is különleges, szokatlan dinamikai tulajdonságaik vannak. A modellekben jelen levő extra megmaradó mennyiségek ahhoz vezetnek, hogy az elemi gerjesztések szórási folyamatai teljesen elasztikusak. Emiatt tehát nincsen energia- és impulzusátadás az elemi gerjesztések között, a kölcsönhatás csak a gerjesztések terjedési sebességét befolyásolja, a szórási folyamatokban keletkező kvantummechanikai fázistolásokon keresztül. Ennek következtében ezekben a rendszerekben léteznek megmaradó áramok, a megmaradó mennyiségek transzportja pedig általában ballisztikus. Mindez hasonló a szupravezetés tulajdonságaihoz, bár a mögöttes mechanizmus teljesen más.

Ezek és más, ehhez kötődő egzotikus tulajdonságok motiválták a kutatókat arra, hogy az integrálható modelleket kísérletekben is megvalósítsák. Eleinte csapdázott hideg atomokkal dolgoztak, és különböző csoportok igazolták az integrálható modellek dinamikáját leíró elméleteket – lásd például [3–5]. Jelen cikkünkben a hideg atomos kísérleteket nem ismertetjük, helyettük a kvantumszámítógépekkel történő kvantum szimulációkkal foglalkozunk.

Fontos, hogy az integrálható modellek mindig finomhangoltak: általában bármilyen kis perturbáció (például a környezettel való kölcsönhatás) megsérti az extra megmaradási törvényeket. Ugyanakkor az integrálhatóság sértése lehet olyan kicsi, hogy egy adott kísérlet időtarta-

ma alatt nem jelentkezik a hatása, és ezáltal a gyakorlatban is tanulmányozni lehet az adott rendszer különleges dinamikai tulajdonságait.

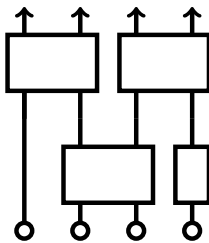
### 3. Spinláncmodellek kvantumoszimulációja

Ahhoz, hogy konkrét kísérletekről tudjunk beszélni, először pár szót kell szólni a kvantumoszámolások kvantumáramkörös modelljéről, és hogy ezt hogyan lehet valós idejű dinamika szimulálására használni.

A kvantummechanikában az időfejlődést a Hamilton-operátor generálja. Az úgynevezett analóg kvantumszámítógépekben van lehetőség arra, hogy egy adott rendszer folytonos időfejlődését egy választott Hamilton-operátorral lehessen irányítani. Egy ilyen kísérletben a Hamilton-operátor paraméterei lehetnek előre beállított értékek vagy akár időben változóak is. Az időfejlődés maga azonban mindig folytonos.

Ezzel ellentétben a digitális kvantumszámítógépek diszkrét idejű dinamikát tudnak szimulálni, és mindez az úgynevezett kvantumáramkörös számítási modell kereteiben történik. Ez a keret a következőket foglalja magában.

A kvantumszámítógép a számítás elején a felhasznált qubiteket beállítja egy előre kiválasztott, összefonódás nélküli állapotba. Ezt követően a számítógép egy- vagy kétbites kvantum kapukkal hat a rendszeren. A választott kvantum operációk sorozatát kvantum algoritmusnak vagy kvantumáramkörnek nevezzük. A számolás végén a rendszer állapotáról mérésekkel lehet információt kinyerni. A kvantummechanikai mérés valószínűség alapú, ezért a pontos információk megszerzése érdekében az algoritmust többször egymás után meg is lehet ismételni. Egy kvantumáramkör látható az 1. ábrán.



1. ábra. Példa a kvantumáramkörök ábrázolására négy qubiten. A függőleges vonalak felelnek meg a qubiteknek, az ábra alján szerepel a bemeneti állapot, a tetején pedig a kimenet. A téglalapok egy-, illetve kétrácspontos kvantum kapuknak felelnek meg

Annak ellenére, hogy a kvantum algoritmusok csak lépésenként történő időfejlődést tesznek lehetővé, van arra mód, hogy közelíteni lehessen egy adott Hamilton-operátor által generált folytonos idejű dinamikát. Vegyünk például egy olyan spinláncmodellt, ahol csak szomszédos spinek hatnak kölcsön! Ilyenkor a Hamilton-operátor általánosságban így írható:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^L \hat{h}_{j,j+1}, \quad (4)$$

ahol  $\hat{h}_{j,j+1}$  a  $j$  és  $j+1$  indexű spineken ható kölcsönhatási tag. A Schrödinger-egyenlet által generált időfejlődést az  $e^{-i\hat{H}t}$  uniter operátor írja le. Ezt az operátort közelíthetjük az ún. Trotter–Suzuki-felbontással, annak is egy speciális változatával. A  $t$  véges időt felbontjuk  $N$  darab  $\Delta t = t/N$  kis időlépésre. Ezután a Hamilton-operátor tagjait szétbontjuk két csoportba úgy, hogy egy adott csoporton belül az egyes tagok különböző kvantum biteket érintsenek:

$$\hat{H} = \left( \sum_{j=1}^{L/2} \hat{h}_{2j, 2j+1} \right) + \left( \sum_{j=1}^{L/2} \hat{h}_{2j+1, 2j+2} \right). \quad (5)$$

Ezután az egyes tagokat külön-külön exponencializáljuk a  $\Delta t$  idejű folytonos időfejlésztésre, a következő elrendezésben:

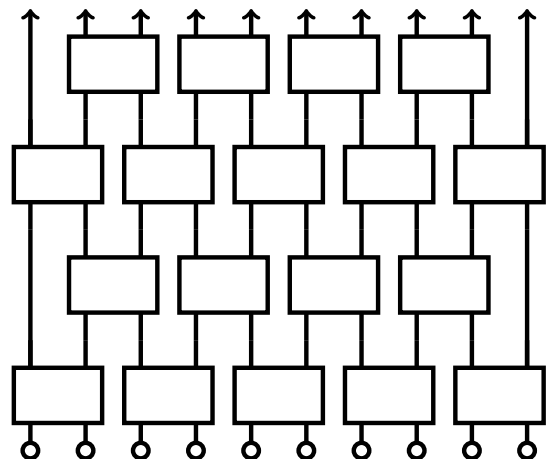
$$\exp(-i\hat{H}\Delta t) \approx \left( \prod_{j=1}^{L/2} \hat{U}_{2j, 2j+1} \right) \left( \prod_{j=1}^{L/2} \hat{U}_{2j+1, 2j+2} \right), \quad (6)$$

ahol

$$\hat{U}_{k,k+1} = \exp(-i\hat{h}_{k,k+1}\Delta t). \quad (7)$$

A közelítés hibája  $(\Delta t)^2$ -tel arányos. Ennek a közelítő eljárásnak az az előnye, hogy az  $\hat{U}_{k,k+1}$  egy kétrácspontos kvantum kapu, ami különféle digitális kvantumszámítógépeken valódi futtatások során megvalósítható. Ezáltal a kvantumszámítógép valóban szimulálni fogja az adott Hamilton-operátor által generált dinamikát, ha a (6) által leírt műveletek összességét megismételjük  $N$  alkalommal.

A kvantum kapuk fenti elrendezését, a kialakuló kvantum számítást „tégla falas kvantumáramkör”-nek (brickwork quantum circuit) is szokás hívni, és egy nagyon elterjedt algoritmus a kvantum szimulációknak. Az elnevezés onnan ered, hogy az áramkör ábrázolása egy téglafalra emlékeztet (2. ábra).



2. ábra. A kvantum szimulációk téglafal-áramkörös modellje. Az ábra alján szerepel a bemeneti állapot, a tetején pedig a kimenet. Az egyes kétrácspontos kapuk a (7) egyenlet által leírt uniter operátort valósítják meg

Ezt az elrendezést az elmúlt pár évben használták már integrálható kvantumspinláncok vizsgálatára is. Ezekből a kvantumszámítógépes kísérletekből ismertetünk lentebb kettőt, melyek az ún. Heisenberg-spinláncokkal foglalkoztak. A téglafalas geometriájú kvantum áramkörök egy másik típusú alkalmazását (a véletlen kapus áramköröket) Rakovszky Tibor cikke tárgyalja [6].

Felmerülhet az olvasóban a kérdés, hogy a (6) egyenletben írt közelítés vajon megsérti-e az integrálhatóságot. Szerencsére ez a probléma nem áll fenn: be lehet bizonyítani, hogy annak ellenére, hogy az egyenlet két oldala valóban csak közelítőleg azonos, a jobb oldalon lévő szorzat a legtöbb esetben önmagában is egy egzaktul integrálható rendszert ír le. Ennek a speciális tulajdonságnak köszönhető, hogy a téglafalas kvantumáramkör valóban ideális módszer az integrálható spinláncok kvantumszámítógépes tanulmányozására.

## 4. Heisenberg-spinláncok

Az XXZ Heisenberg-spinlánc az egyik legtöbbet vizsgált integrálható modell. A Hamilton-operátor, mely az (1) egyenletben szereplő operátor anizotrop általánosítása, a következő alakot ölti:

$$\hat{H} = \sum_j \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y + \Delta \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z. \quad (8)$$

Itt  $\hat{\sigma}_j^{x,y,z}$  a  $j$ . rácsponton ható Pauli-operátort jelzi,  $\Delta$  pedig az úgynevezett anizotropiaparaméter. A modellben megmarad a mágnesezettség  $z$  komponense, vagyis a Hamilton-operátorral kommutál az

$$\hat{S}^z = \sum_j \frac{1}{2} \hat{\sigma}_j^z \quad (9)$$

operátor. Az  $SU(2)$  forgatási szimmetriával rendelkező eredeti Heisenberg-modellt (vagy másképp: az XXX-modellt) a  $\Delta = 1$  speciális esetben kapjuk vissza.

A következőkben két kísérletet ismertetünk, amelyekben a fenti modellek viselkedését tanulmányozták digitális kvantumszámítógépen. Az időfejlesztést mindkét esetben a téglafalas kvantumáramkör segítségével valósították meg.

Mindkét kísérletet a Google Quantum AI részlegén valósították meg. A Google kvantumszámítógépei a szupravezető qubites technológiát használják. A qubitek két lehetséges állapotát transzmonok kódolják, lásd Gyenis András cikkét [7]. A  $|0\rangle$  állapot az alapállapot, míg az  $|1\rangle$  a gerjesztett állapot. A gerjesztésben részt vesz az elektromágneses tér is, emiatt az irodalomban gyakran használják a gerjesztésre a foton kifejezést. Ez azonban nem összekeverendő a vákuumban terjedő fotonnal, ugyanis itt egy soktestrendszer kollektív gerjesztéséről van szó.

A kísérletben a qubitek egy kétdimenziós rácsban helyezkednek el, ahol a szomszédok tudnak egymással kölcsönhatni, illetve szomszédos qubitpárokon lehet két-rácspontos uniter kapukkal hatni. Azonban a kapukat jól

megválasztva elérhető az is, hogy a rendszer igazából egy egydimenziós spinláncot szimuláljon.

### 4.1. Kötött állapotok elbomlása

Az első kísérletben [8] a Google Quantum AI egyik kvantumszámítógépén, 24 szupravezető qubiten megvalósítottak egy integrálható modellt, az XXZ Heisenberg-spinláncához tartozó téglafalas kvantumáramkört.

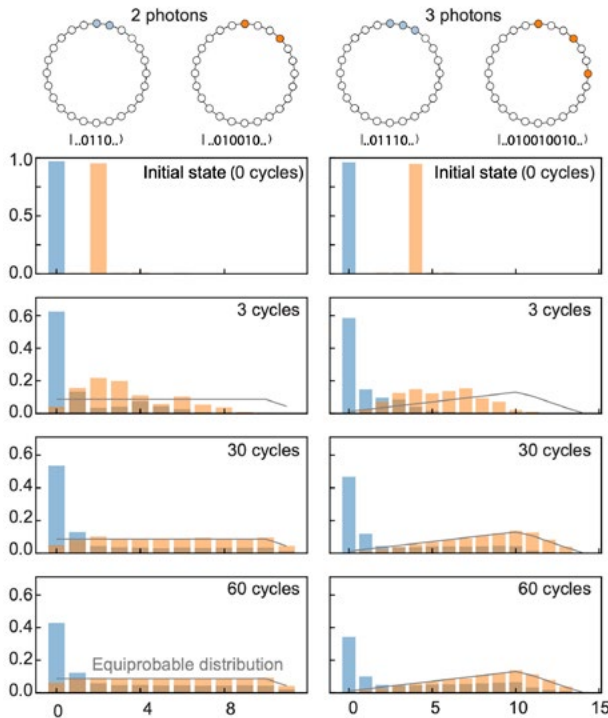
A kísérlet célja kettős volt. Egyrészt demonstrálni akarták azt, hogy az akkori legjobb technológiával már ki lehet mutatni az integrálható modellek speciális dinamikai tulajdonságait. Másrészt pedig meg akarták vizsgálni az integrálhatóság megsértésének következményeit egy konkrét fizikai szituációban. Az alábbiakban ismertetjük a kísérlet elvi háttérét és értelmezését, az olvasónak pedig ajánljuk a [9] összefoglalót is.

Ebben a kísérletben a megmaradási törvényeknek egy speciális következményét, a kötött állapotok megmaradását vizsgálták. Ismeretes, hogy az XXZ Heisenberg-spinláncokban az elemi spingerjesztések kötött állapotokat tudnak alkotni. A kötött állapotoknak ismeretes az egzakt hullámfüggvénye, és mind az energiájuk, mind a térbeli kiterjedésük kiszámolható. Különleges tulajdonsága a modellnek, hogy a kötött állapotok energiái bele tudnak nyúlni a spektrumnak azon folytonos részébe, amit az azonos számú szeparált részecskék alkotnak. Ezért egy tipikus nem integrálható modellben a kötött állapotok – legalábbis egy részük – nem lehetnének stabilak, mert mindenféle dinamikai folyamat során elbomlanának a kontinuumba. Ezzel ellentétben a Heisenberg-spinlánc extra megmaradó mennyiségei meggátolják a kötött állapotok elbomlását, és ezek teljesen stabilak maradnak minden nemegyensúlyi folyamatban.

A kísérletben ezt a stabilitást tesztelték. Az ötlet az volt, hogy vették a spinlánc ferromágneses állapotát, amit a részecskék nyelvén a vákuumként lehet értelmezni. A kvantumbitek nyelvén ezt például  $L$  darab  $|0\rangle$  állapotú qubittel lehet leírni. Ezután preparáltak  $n$  darab részecskét egymás melletti pozíciókban, a részecskéket a qubitek  $|1\rangle$ -es állapota kódolta. Ezután futtatták a téglafalas kvantumáramkört, majd megmérték a rendszer qubitjeinek az állapotát későbbi időpontokban.

Az eredetileg preparált szorzatállapot nem sajátállapot a rendszernek, emiatt kialakult egy nemegyensúlyi dinamika. A kezdeti állapotnak nagy átfedése van az  $n$  részecskés, különböző impulzusú egzakt kötött állapotokkal. Ezek a kötött állapotok nem tudnak elbomlani. Ezért ha egy későbbi időpontban megmérték az egyes qubitek állapotát, akkor viszonylag nagy valószínűséggel kaptak olyan bitsorozatokat, amelyekben a részecskék (az 1-es bitek) egymáshoz közeli helyeken voltak. Más szavakkal: a kutatók azt tapasztalták, hogy az elemi részecskék tényleg nem tudtak kiszabadulni a kötött állapotból. Ez pedig a rendszer integrálhatóságát demonstrálja.

A mérést ezután lefuttatták olyan kezdeti állapotokból is, ahol az eredeti részecskék egymástól távolabb vannak, majd a kvantumáramkör futtatása után szintén megmérték a rendszert. Ilyenkor azt tapasztalták, hogy a részecskék külön-külön bejárták a rendelkezésre álló teret. Vagyis önállóan mozgó (bár egymással kölcsönható) részecskék dominálták a dinamikát.



3. ábra. Kiemelt részlet a [8] cikk eredményeiből. A kísérletek során a spinláncban a fent látható kezdeti elrendezéseket választották, kettő, illetve három  $|1\rangle$  állapotú qubittel. Ezután futtatták a kvantum áramkört többször,  $N$  számú cikluson át. A részecskék helyzetét minden egyes futtatás után megmérték, ezt sokszor megismételték, és ábrázolták a részecskék távolságának (a köztük levő rácspontok számának) valószínűségi eloszlását. Azt tapasztalták, hogy a bal oldali esetekben (kék szín) kicsi maradt a valószínűsége annak, hogy a részecskék eltávolodjanak egymástól, vagyis a kötött állapot egyben maradt. Ezzel ellentétben a jobb oldali esetekben (sárga szín) kellő számú futtatás során egyenletes eloszlás alakult ki, ami annak felel meg, hogy különálló részecskék mozgottak a láncban

Ezután pedig az integrálhatóság sértését egy különleges ötlettel vizsgálták. A spinlánchoz hozzácsatoltak még extra qubiteket is, amelyekre külön kétrácspontos kapukkal hatottak. Az így nyert időfejllesztő operátor nem volt már integrálható. Ennek ellenére azt tapasztalták a kísérletben, hogy a kötött állapotok sokáig épek maradtak annak ellenére, hogy már nem voltak érvényesek a megmaradási törvények. Ez meglepő kísérleti eredmény volt, ugyanis a geometria megváltozása miatt az integrálhatóság sértése „nagyinak” tűnik, és ezért az volt a várakozás, hogy a kötött állapotok rövid idő alatt elbomlanak.

Később egy másik kutatócsoport egy hagyományos számítógépen elvégzett numerikus munkával igazolta, hogy a kötött állapotok látszólagos stabilitása végül is csak egy véges méretű effektus volt, ami nagy mére-

tű spinláncok esetében fokozatosan eltűnik [10]. Ezen utóbbi munka miatt mondhatjuk, hogy végeredményben ebben a problémában a klasszikus számítógép egyelőre hatékonyabb, mint a kvantumos. Mindamellett a kísérlet fontos mérőföldkő volt, ugyanis ez volt az első eset, hogy az integrálhatóság következményeit digitális kvantum-számítógépen is meg lehetett már figyelni.

#### 4.2. További kísérletek

Egy későbbi kísérletben a Google Quantum AI az integrálható modellek nemegyensúlyi dinamikáját vizsgálva olyan eredményekhez is eljutott, amiket korábban hagyományos számítógéppel nem sikerült elérni [11]. Ennek a kísérletnek és a vizsgált dinamikai effektusnak a részletesebb ismertetése már túlnyúlik ezen cikk keretein, ezért itt csak nagyon tömören összegezzük az eredményeket.

A [11] cikkben a kutatók téglafalas kvantumáramkör segítségével tanulmányozták az XXX spinlánc nem-egyensúlyi spintranszportját 46 szupravezető qubiten. Ez azért nagyon érdekes probléma, mert van egy jelenleg is folyó vita a kutatók között, hogy a spintranszport milyen univerzalitási osztályba tartozik. A problémának egzakt megoldása egyelőre még nincsen, a klasszikus számítógépen elvégzett numerikus számolások pedig nem kielégítő minőségűek a számítás bonyolultsága miatt. Végül a [11] kísérlet egy döntő információt tett hozzá a kérdéshez: megmutatták, hogy bár a spintranszportot látszólag a  $3/2$ -es dinamikai exponenssel leírható ún. Khardar–Parisi–Zhang- (KPZ-) skálázás írja le, a magasabb rendű kumulánsok már eltérést mutatnak a KPZ-alaktól. A kísérlet ezzel egy olyan választ tudott megadni, amely a klasszikus számítógép számára túl nehéz volt.

#### 5. További kutatási irányok

Az integrálható modellek kvantumszámítógépen történő vizsgálata továbbra is aktív kutatási terület, amely számos kihívást tartogat. Ezek közül most megemlítünk néhány kutatási irányt.

Nyitott kérdés az integrálható modellek egzakt sajátállapotainak belső komplexitása. A konkrét kérdés az, hogy milyen komplex kvantumos algoritmusokkal lehet preparálni egy egzakt sajátállapotot. Egy nem integrálható modellben az állapotokat preparáló kvantumos algoritmus számítási igénye a részecskék számával exponenciálisan növekszik, azonban az integrálható modellekben talán csak polinomiális a komplexitás növekedése. Ez egy elméleti kérdés, aminek viszont lehet alkalmazása a kvantumos fölény demonstrálásának szempontjából. A szerző aktívan foglalkozik ezzel a kérdéssel [12, 13].

Nyitott kérdés, hogy az integrálható modelleket fel lehet-e használni a kvantumszámítógépek hatékony tesztelésére (benchmarking). Ha az integrálható modellekben analitikusan (papíron vagy klasszikus számítógépen

hatékonyan) is ki tudunk számolni fizikai mennyiségeket, akkor ezek segítségével tesztelhetővé válnak a kvantumszámítógépek.

További érdekes téma a kvantumkorrelációk kísérleti vizsgálata akár egyensúlyban, akár nemegyensúlyi dinamika során. Erre példa a fenti második kísérlet, azonban még sok olyan szituáció van, ahol az integrálható modellek egzotikus hatványkitevővel leírható, algebrailag csökkenő korrelációkkal bírnak.

Összefoglalásként kijelenthető, hogy a digitális kvantumszámítógépek technológiája mára már elérte azt a szintet, hogy érdekes fizikai jelenségeket lehessen velük vizsgálni, az integrálható modellek világa pedig alkalmas terepnek bizonyul mindehhez. Így találkozunk egymással az egzakt elméleti számolások világa és a kvantum szimulációk Feynmanig visszanyúló elgondolása. Az integrálható modellek gyakorlatilag egyidősek a kvantum-

mechanikával, és úgy tűnik, hogy a legújabb technológiai fejlődés során is hasznosnak bizonyulnak.

## Irodalom

1. R. P. Feynman: *Int. J. Theor. Phys.*, 21 (1982) 467–488.
2. M. P. Grabowski, P. Mathieu: *Mod. Phys. Lett.*, A9 (1994) 2197–2206.
3. T. Kinoshita, et al.: *Nature*, 440 (2006) 900.
4. T. Langen, et al.: *Science*, 348 (2015) 207–211.
5. N. Malvania, et al.: *Science*, 373 (6559) (2021) 1129–1133.
6. Rakovszky T.: *Fizikai Szemle*, jelen szám.
7. Gyenis A.: *Fizikai Szemle*, jelen szám.
8. A. Morvan, et al.: *Nature*, 612 (2022) 240–245.
9. T. Prosen: *Nature*, 612 (2022) 217–218.
10. F. M. Surace, O. Motrunich: *PRX Quantum*, 5(1) (2024) 010317.
11. E. Rosenberg, et al.: *Science*, 384 (6691) (2024) 48–53.
12. R. Ruiz, et al.: preprint, arXiv:2411.02519
13. R. Ruiz, et al.: preprint, arXiv:2411.15132

# VÉLETLEN KVANTUMOS ÁRAMKÖRÖK

Rakovszky Tibor

BME, Elméleti Fizikai Tanszék, Budapest

E-mail: rakovszky.tibor@ttk.bme.hu

## Bevezető: a kvantuminformáció dinamikája zárt rendszerekben

A nagyszámú egymással kölcsönható részecskéből álló makroszkopikus rendszerekkel foglalkozó kvantum soktestfizika hagyományosan főleg a hőmérsékleti egyensúlyban vagy ahhoz közel lévő rendszerek leírására koncentrált, amelyekben a statisztikus fizika alapelvei érvényesülnek. Ezen túlmutat az egyensúlytól távoli rendszerek leírásának problémája. Hagyományosan ezek mint nyílt rendszerek jelennek meg, amelyek energiát és információt cserélnek a környezetükkel. Ehhez képest a kvantum soktestfizikának egy egészen új terepét jelenti a nemegyensúlyi zárt kvantumrendszerek problémája, amely az elmúlt évtizedek kísérleti áttöréseinek eredményeképpen került a kutatások előterébe.

Ezen áttöréseknek hála ma már számos különböző kísérleti platform (hideg atomok, csapdázott ionok, szupravezető áramkörök stb.) áll rendelkezésre, amelyek olyan mértékben elszigeteltek a környezetüktől, hogy

viselkedésük egy aránylag hosszú időskálán jól leírható a kvantummechanikai Schrödinger-egyenlettel, anélkül hogy a környezeti dekoherencia elrontaná a rendszer koherens kvantum viselkedését. Ugyanezek a platformokon egyszerre mind a kísérletezők sokkal erősebb kontrollt gyakorolhatnak a rendszer viselkedése fölött a megszokott szilárdtestfizikai kísérletekhez képest. Ennek segítségével különböző, egyensúlytól távoli kezdőállapotokat tudnak létrehozni, illetve kontrollált módon tudnak kölcsönhatásokat indukálni a különböző részecskék között. Mindez egy sor izgalmas új fizikai kérdést vet fel azzal kapcsolatban, hogy hogyan fejlődik időben egy ilyen zárt, erősen kölcsönható kvantum rendszer.

Különösen érdekes annak a vizsgálata, hogy a rendszer időfejlődése során hogyan alakulnak ki különféle kvantumkorrelációk a rendszer alkotóelemei között, különös tekintettel a kvantum-információelméletben kulcsszerepet játszó *kvantum összefonódásra*. Az idő előrehaladtával a kölcsönhatások következtében összefonódás alakul ki kezdetben csak a térben egymáshoz közeli, később pedig egyre távolabbi részecskék között. Hogyan tudjuk leírni az összefonódás dinamikáját zárt kvantumrendszerekben? Követ-e a viselkedése olyan univerzális szabályszerűségeket, amelyek a fizikai rendszerek valamilyen nagyobb osztályára egyaránt jellemzőek?

Az ilyen kérdések megválaszolását nehezíti a rendelkezésre álló elméleti eszköztár szűkössége. Míg például egyensúlyi kvantum soktestrendszerek leírására a numerikus módszerek széles arzenálja áll rendelkezésre



Rakovszky Tibor 2024 óta a BME Elméleti Fizika Tanszék docense, Marie Curie-ösztöndíjas kutató, a HUN-REN „Kvantumos hibajavító kódok és nemegyensúlyi fázisok” Kutatócsoport vezetője. Ezenfelül tagja a 2025-ben megalakult HUN-REN-BME-BCE Kvantumtechnológia Kutatócsoportnak. 2020 és 2024 között a Stanford Egyetemen volt posztdoktori kutató, doktori tanulmányait pedig a Münchener Műszaki Egyetemen (TU München) végezte. Kutatási területe a kvantum soktestrendszerek vizsgálata, különös tekintettel azok nemegyensúlyi viselkedésére, illetve a kvantum hibajavítás.

(pl. Monte Carlo-módszerek, illetve tenzorhálózatok), ugyanezen módszerek az egyensúlytól távol általában csak igen rövid időskálákra adnak megbízható eredményt – többek között éppen a részecskék közötti erős összefonódás miatt! Bár ezek a rövid idejű szimulációk is sok hasznos információt szolgáltatnak, mégis szükség van olyan egyszerű modellekre, amelyekben a rendszer dinamikáját hosszabb skálákra tudjuk követni, de amelyek mégis betekintést tudnak nyújtani a fent említett univerzális törvényszerűségekbe. Ilyen egyszerű modellt nyújtanak különféle kvantumos áramkörök, amelyek egyszersmind a kvantum-számítástudomány problémái felé is összekötő kapocsként szolgálnak. A továbbiakban ezekről lesz szó.

## Kvantumos áramkörök

Egy zárt kvantumos rendszert vizsgálunk, amelynek kvantumállapota,  $|\psi\rangle$  a jól ismert időfüggő Schrödinger-egyenletet követi:

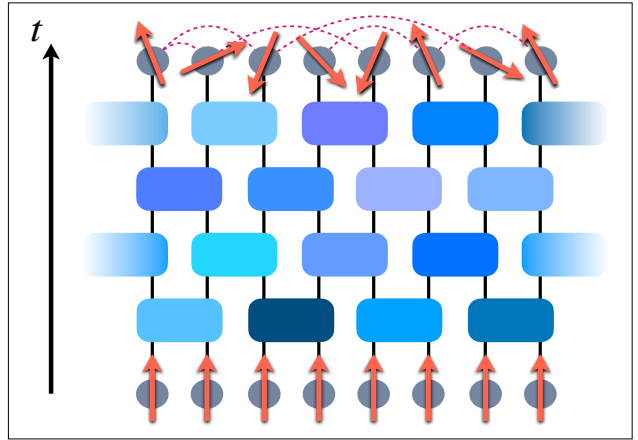
$$\partial_t |\psi(t)\rangle = -i\hat{H}|\psi\rangle. \quad (1)$$

Itt, ahogy ezentúl végig,  $\hbar = 1$  egységrendszerben dolgozunk, és  $\hat{H}$  a Hamilton-operátor, amely fizikailag a rendszer összenergiájának felel meg, és tartalmazza a részecskék közötti különféle kölcsönhatásokat, illetve a különféle külső (pl. elektromágneses) terek rájuk gyakorolt hatását.<sup>1</sup>

A jelen cikkben olyan rendszerekkel foglalkozunk, ahol a részecskék térbeli helyzete egy szabályos rácsot alkot, amelyet időben rögzítettnek tekinthetünk (pl. hideg atomos kísérletekben az atomok egy lézerekkel létrehozott ún. „optikai rácsban” helyezkednek el). A részecskék mozgásállapotát tehát elhanyagoljuk, és csupán belső szabadsági fokaikra (pl. egy atom legkülső elektronjának állapotára) fókuszálunk: ezek állapotát írja le a  $|\psi\rangle$  hullámfüggvény. Legyen egy adott rácpontban a lehetséges belső állapotok száma  $q$ ; a legegyszerűbb nem triviális esetben  $q = 2$ , tehát minden részecskét két belső szabadsági fokkal írhatunk le. Ezeket tekinthetjük pl. egy effektív spin „fel” és „le” állapotainak (ebben az értelmezésben  $q > 2$  egy magasabb spinű részecskének felel meg). Ez a  $q = 2$  eset tipikus a kvantuminformatika kontextusában, ahol egy ilyen kétállapotú rendszer egy kvantumos bitnek, avagy qubitnek felel meg. Ebben a kontextusban a  $q > 2$  esetre mint „qudit”-re szokás hivatkozni. Az alábbiakban mi is ezt az elnevezést fogjuk használni.

Az (1) Schrödinger-egyenlet megoldása  $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi(0)\rangle$  alakú, ahol az időfejllesztést az  $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}$  uniter operátor hajtja végre. Mit mondhatunk ennek az időfejlődésnek a struktúrájáról?

A térbeli lokalitás elve alapján a  $\hat{H}$  Hamilton-operátor csak az egymáshoz közeli rácpontokban lévő ré-



1. ábra. Két quditen ható uniter kapukból álló „tégla-fal geometriájú” kvantumos áramkör egy dimenzióban. Egy véletlen áramkör esetén a kapukat valamilyen véletlen eloszlásból választjuk

szecskék közötti kölcsönhatásokat tartalmaz.<sup>2</sup> Ilyen lokális Hamilton-operátorokra érvényes az ún. *Lieb–Robinson-tétel* [1]. Ennek értelmében az időfejlődés során a korrelációk a rendszerben valamilyen véges  $v_{LR}$  sebességgel terjednek, vagyis  $t$  idő után az adott helyen lévő részecske csak a tőle legfeljebb  $v_{LR}t$  távolságban lévő részecskékkel tud nem elhanyagolható mértékű korrelációt kialakítani, ettől távolodva a korrelációk exponenciálisan lecsengenek.<sup>3</sup> Ez hasonlít a speciális relativitáselméletben megszokott helyzetre, ahol a fizikai hatások legfeljebb a fénysebességgel terjednek; az általunk vizsgált lokális operátorok esetén  $v_{LR}$  játssza egy emergens „fénysebesség” szerepét.

Tovább egyszerűsíthető a probléma az időfejllesztő operátor „diszkrétizálásával”. Erre kínál lehetőséget a *Solovay–Kitaev-tétel* [2], amelyre építve bármely uniter operátor tetszőleges pontossággal közelíthető olyan uniter operátorok szorzataként, amelyek egyszerre csak egy vagy két részecskén hatnak. Ez alapozza meg az *univerzális kvantumszámítógép* gondolatát, amelyben a Hilbert-téren ható tetszőleges uniter operátor előáll egy elemi operációkból felépített *kvantumáramkör* formájában; az áramkört alkotó egy- és kétqudites uniter operátorokat a „kvantumkapu” elnevezéssel illetik.

Az időfejllesztő  $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}$  operátort ilyen áramköri alakban felírva könnyen elérhetjük a Lieb–Robinson-tétel által megkövetelt lokalitást, ha csak olyan kapukat engedünk meg, amelyek egymáshoz közeli (pl. szomszédos) rácpontokon hatnak. A legegyszerűbb ilyen áramkört, amelyben a kapuk egy egydimenziós rácson „tégla-fal” elrendezésben helyezkednek el, az 1. ábra szemlélteti. Jól látható, hogy egy ilyen áramkörben a fi-

<sup>2</sup> Pontosabban előfordulhatnak kölcsönhatások távoli részecskék között, de ezek erőssége gyorsan – általában exponenciálisan – lecseng a távolsággal.

<sup>3</sup> A pontos állítást általában a Heisenberg-képben szokták megfogalmazni. Eszerint, ha  $A$  egy lokális operátor, amely  $A(t) = e^{i\hat{H}t} A e^{-i\hat{H}t}$  módon időfejlődik,  $B$  pedig egy másik lokális operátor tőle  $d$  távolságra, akkor az  $[A(t), B]$  kommutátor jó közelítéssel eltűnik, ha  $d \gg v_{LR}t$ .

<sup>1</sup> Mivel a rendszert zártan tekintjük, a rendszer részecskéinek ezen külső terekre gyakorolt visszahatását elhanyagoljuk.

zikai hatások véges sebességgel kell, hogy terjedjenek. A  $t$  idő az áramkör „mélységének”, avagy az azt alkotó rétegek számának felel meg. A Lieb–Robinson- és a Solovay–Kitaev-tételeket kombinálva tehát elmondhatjuk, hogy a lokális hamiltoni időfejlődés struktúráját jól megragadják az ilyen áramkörök.<sup>4</sup>

A kvantumdinamika megértésében jelentős előrelépést hozott az ilyen lokális kvantumáramközők vizsgálata. Ehhez arra volt szükség, hogy az áramkörmodellt elvonatkoztassuk a fenti motivációtól, és egy olyan általánosabb esetet vizsgáljunk, ahol az áramkört alkotó kapuknak valamilyen általánosabb, nem pedig infinitezimális idejű hamiltoni időfejlődésből származó uniter operátorokat választunk. Ezzel feláldozzuk az eredeti probléma egyes elemeit (elsősorban az energiamegmaradást; lásd lentebb), cserébe azonban a kapuk megfelelő megválasztása esetén olyan leegyszerűsített modelleket kapunk, amelyekben sok minden egzaktul kiszámítható. Az ilyen áramkörmodellek fontos fogódzót kínálnak a kvantumos dinamika megértéséhez, és sok esetben a belőlük levont következtetések az eredetileg vizsgált hamiltoni dinamikára is érvényesek. A továbbiakban ezen áramkörmodelleknek egy fontos osztályával, az ún. *véletlen kvantumáramkörökkel* foglalkozunk.<sup>5</sup>

Ahogy a név is mutatja, a véletlen áramkörös modellben az áramkört alkotó kapuk nem valamilyen fix („determinisztikus”) uniter operátornak felelnek meg, hanem azokat véletlenszerűen választjuk a kétqudites uniter operátorok halmazából. Egy ilyen modell tehát nem egy konkrét áramkör, hanem hasonló geometriai struktúrájú áramkörök statisztikus sokasága. Azt vizsgálva, hogy ennek a sokaságnak egy „tipikus” tagja hogyan viselkedik, betekintést nyerünk a lokális dinamika univerzális tulajdonságaiba.

A fenti leírás a lehetséges modelleknek még mindig egy tág osztályát engedi meg, hiszen megadhatjuk, hogy az áramköröknek milyen halmazát vizsgáljuk, és hogy a lehetséges áramkörökhöz milyen valószínűségeket rendelünk. Az alábbiakban áttekintjük a legegyszerűbb esetet, majd megemlítjük néhány fontos általánosítást.

Maradjunk tehát az 1. ábrán látható egydimenziós „téglafalas” geometriájú áramköröknél. A problémát tovább egyszerűsíthetjük, ha az áramkörben szereplő kapuk mindegyikét egymástól függetlenül választjuk a kétqudites uniter operátorok közül. Továbbá mindegyik kaput ugyanabból az eloszlásból választjuk: így tehát – bár egy konkrét áramkör térben és időben inhomogén (különböző helyeken különböző kapuk) – az áramkörök sokasága mégis statisztikusan homogén és invariáns a tér- és időbeli eltolásra.

Már csak egy dolgot kell rögzítenünk: azt a valószínűségi eloszlást, amelyből a kapukat választjuk. A kapuk

két quditen hatnak, így a  $q^2 \times q^2$  méretű uniter mátrixok halmazán kell egy eloszlást definiálnunk. Szerencsére erre kínálkozik egy természetes választás, a Haar Alfréd magyar matematikusról elnevezett *Haar-eloszlás*. Ennek definiáló tulajdonsága, hogy invariáns egy tetszőleges uniter mátrixszal való szorzásra: ha  $\mu_H(\hat{U})$  a Haar-eloszlásban a valószínűségi mértéke egy  $\hat{U}$  uniternek, és  $\hat{V}$  egy tetszőleges, rögzített uniter mátrix, akkor  $\mu_H(\hat{U}) = \mu_H(\hat{U}\hat{V}) = \mu_H(\hat{V}\hat{U})$ . A Haar-eloszlás tehát egyenletes az uniter mátrixok halmazán. Ha az áramkör minden elemét (egymástól függetlenül) a Haar-eloszlásból választjuk, akkor kapjuk az ún. *Haar-féle véletlen kvantumáramkört*. A következő fejezetben ezt vesszük közelebből szemügyre.

## A kvantumdinamikától a statisztikus fizikáig és vissza

Fentebb azt állítottuk, hogy a véletlen áramkörök sokszor egzakt megoldásokhoz vezetnek. Most röviden vázolunk erre egy példát, amely megmutatja, hogy a véletlen áramkörök érdekes kapcsolatot létesítenek a fizika két távolinak tűnő ága, a kvantumos dinamika és a klaszikus egyensúlyi statisztikus fizika között: az utóbbi jól ismert eredményei átültethetők az előbbi kontextusába. Alább egy konkrét számításon keresztül mutatjuk be ezt a konstrukciót – emiatt a cikk ezen része a többihez képest több technikai részletet tartalmaz. További részletek találhatóak a [4] hivatkozásban.

Mint a bevezetőben jeleztük, célunk annak megértése, hogy hogyan alakul ki kvantumos összefonódás a rendszert alkotó részecskék között. Az összefonódás jellegzetessége, hogy bár az egész rendszer (amelyet zártnak tekintünk) egy tiszta kvantumállapottal (a Hilbert-tér egy egységvektorával) írható le, a részrendszereit már *kevert állapotokkal* (matematikailag: sűrűségmátrixokkal, azaz a Hilbert-téren ható pozitív definit, egységnyi nyomú operátorokkal) tudjuk csak leírni.<sup>6</sup> Az  $A$ -val jelölt részrendszerhez (azaz a quditok valamilyen részhalmazához) tartozó  $\hat{\rho}_A$  sűrűségmátrixot megkapjuk mint az egész rendszer állapotának „részleges nyomát”:  $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_{\bar{A}}(|\psi\rangle\langle\psi|)$ , ahol  $\bar{A}$  az  $A$  részrendszer komplementumát jelöli.

Az összefonódás egyik lehetséges mérőszáma a  $\hat{\rho}_A$  sűrűségmátrix ún. „tisztasága” (*purity*),  $\mathcal{P}_A = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^2)$ . Minél kisebb  $\mathcal{P}_A$  értéke, annál erősebb az összefonódás az  $A$  és az  $\bar{A}$ -beli részecskék között. Azt várjuk tehát, hogy a kölcsönható kvantumos rendszer dinamikája során  $\mathcal{P}_A$  időben egyre csökkenni fog, míg végül valamilyen kis értéken szaturálódik, ami az összefonódás maximális mértékének felel meg. A Haar-féle véletlen áramkörös modell segítségével képesek vagyunk ezt az intuíciót egzakt számolássá konvertálni.

Legyen  $\hat{U}$  egy  $t$  mélységű uniter áramkör,  $|\psi_0\rangle$  pedig a rendszer kezdőállapota; az időfejllesztett állapot tehát

<sup>4</sup> Ugyanezen áramkörmodellnek a Schrödinger-egyenletből való levezetésével kapcsolatban ajánljuk Pozsgay Balázs cikkét a *Fizikai Szemle* ugyanezen számában.

<sup>5</sup> Az áramkörmodelleknek egy másik fontos osztályára példa [3].

<sup>6</sup> A tiszta és kevert kvantumállapotok közötti különbségre lásd Kormos Márton cikkét a *Fizikai Szemle* 2025. áprilisi számában.

$|\psi(t)\rangle = \hat{U}|\psi_0\rangle$ . Célunk a következő mennyiség meghatározása:

$$\mathcal{P}_A(t) = \text{Tr}_A \left[ \text{Tr}_{\bar{A}} (\hat{U}|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\hat{U}^\dagger) \cdot \text{Tr}_{\bar{A}} (\hat{U}|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\hat{U}^\dagger) \right]. \quad (2)$$

A fenti kifejezés függ az  $\hat{U}$  áramkörtől, amely láthatóan négyyszer jelenik meg, ebből kétszer komplex konjugálva. Ha a tisztaság *átlagos* viselkedését akarjuk megérteni, átlagolva a véletlen áramkör különböző realizációira, akkor tehát szükségünk lesz ennek a „megnégyeszerezett” uniter operátornak az átlagára. Itt azonban segítségünkre van az a feltevésünk, hogy az áramkör kapui egymástól függetlenek, így az átlagolást elvégezhetjük az egyes kapukra külön-külön. Legyen  $u$  egy ilyen uniter kapu! Amire ezek után szükségünk van, az az alábbi kifejezés (a véletlen eloszlásra való átlagolást felülvonással jelöljük):

$$\overline{u_{a_1 b_1} u_{a_2 b_2}^* u_{a_3 b_3} u_{a_4 b_4}^*} = [u \otimes u^* \otimes u \otimes u^*]_{a_1 a_2 a_3 a_4, b_1 b_2 b_3 b_4}, \quad (3)$$

ahol az alsó indexek mind 1-től  $q$ -ig terjedő értékeket vehetnek fel. Mint azt a (3) jobb oldalán jeleztük, ez az operátor egy megnégyeszerezett,  $(q^2)^4$  dimenziós Hilbert-téren hat.

Szerencsére a Haar-eloszlás (3) típusú momentumai-ra jól ismert formulák állnak rendelkezésre. Ezekből azt kapjuk, hogy a keresett átlag két tag összege, ahol mindkét tag egy-egy projektornak felel meg a négyeszeres Hilbert-téren. Azaz pontosan két állapot van (a négyeszeres Hilbert-térben, amit duplázott kacsacsőrrel jelölünk), amely minden  $u$  operátor esetén invariáns az  $[u \otimes u^* \otimes u \otimes u^*]$  kifejezéssel való szorzásra:

$$\begin{aligned} |+\rangle\rangle &= \sum_{a_1 a_2 a_3 a_4} |a_1 a_2 a_3 a_4\rangle \delta_{a_1 a_2} \delta_{a_3 a_4}, \\ |-\rangle\rangle &= \sum_{a_1 a_2 a_3 a_4} |a_1 a_2 a_3 a_4\rangle \delta_{a_1 a_4} \delta_{a_2 a_3}. \end{aligned} \quad (4)$$

Az ennek a két állapotnak megfelelő projektort  $P_+$ -szal és  $P_-$ -szal jelölve azt kapjuk, hogy

$$\overline{u \otimes u^* \otimes u \otimes u^*} = P_+ + P_- = \sum_{\sigma=\pm} P_\sigma. \quad (5)$$

Így tehát – bár egy  $q^8$  dimenziós Hilbert-térből indultunk – az átlagolás után az eredményt egyetlen bináris változóval,  $\sigma$ -val jellemezhetjük.

Ahhoz, hogy megkapjuk a (2) egyenletben definiált  $\mathcal{P}_A(t)$  mennyiséget, a fenti átlagolást az áramkör minden kapujára külön-külön el kell végeznünk, így ha az áramkör  $N$  kapuból áll, akkor egy  $2^N$  tagból álló összeget kapunk. Az összeg tagjait a  $\sigma_i = \pm$  változókkal inde-

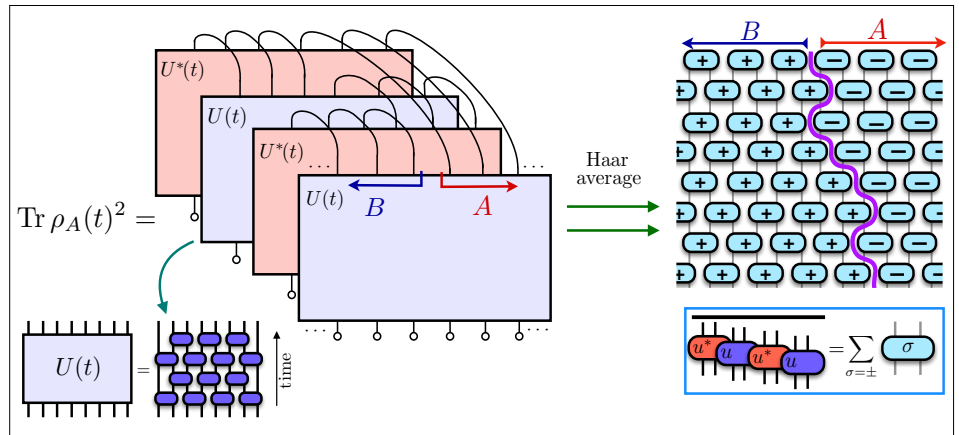
xelhetjük, ahol  $i = 1, \dots, N$  jelöli, hogy melyik kapuról van szó. Ezekre a  $\sigma_i$ -kre egy-egy *klasszikus* spin két lehetséges állapotaként gondolhatunk. Az összeg tagjai levezethetők a (4) definíciókból, és azt kapjuk, hogy mindegyik tag pozitív valós számnak adódik. Így tehát arra a meglepő következtetésre jutunk, hogy a tisztaság a Haar-áramkörben megegyezik egy *klasszikus statisztikus fizikai spinmodell állapotösszegével*:

$$\mathcal{P}_A(t) = \sum_{\{\sigma_i=\pm\}} e^{-\mathcal{H}(\{\sigma_i\})}$$

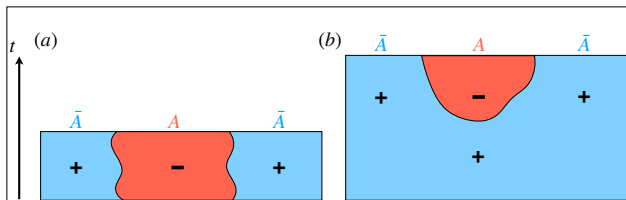
(lásd a 2. ábrát). Az áramkör struktúrájából adódik, hogy a  $\mathcal{H}$  klasszikus energia lokális lesz, és belátható, hogy egy ferromágneses Ising-modellhez fog hasonlítani.

A klasszikus statisztikus modell a fizikai kvantumrendszerhez képest eggyel magasabb dimenziójú, ahol az extra dimenzió az időnek (az áramkör mélységének) felel meg. Ebben az irányban a határfeltételek nem periodikusak, hanem a (2) egyenletből adódnak. Az egyenletet megvizsgálva azt kapjuk, hogy a tisztaság definíciójában megjelenő nyomok (trace-ek) éppen megfelelnek a négyeszeres Hilbert-tér (4) egyenletben definiált kétféle állapottal való belső szorzatnak: az  $A$  részrendszerben a  $||-\rangle\rangle$  állapot jelenik meg, míg az  $\bar{A}$ -ban a  $||+\rangle\rangle$  állapot (2. ábra). Ha  $A$  egy térben összefüggő régió, ez éppen egy doménnek felel meg a klasszikus spinmodell felső határfelületén. A másik határfelület határfeltételét a kezdeti  $|\psi_0\rangle$  állapot határozza meg; a leg-egyszerűbb esetben, amikor a kezdőállapot nem tartalmaz semmilyen összefonódást, ún. szabad határfeltételt kapunk, azaz minden lehetséges spinkonfigurációra összegeznünk kell.

A statisztikus fizikai problémára való leképezés hasznos perspektívát nyújt az összefonódás dinamikájára nézve. A felső határfeltétel egy mágneses doménfalat indukál a  $\sigma = +$  és a  $\sigma = -$  régiók között. A kulcsfontosságú megállapítás az, hogy, a spinek közötti ferromágneses kölcsönhatások következtében a  $-\log \mathcal{P}_A(t)$  „szabadenergia” arányos lesz ennek a doménfalnak a



2. ábra. Leképezés a kvantumállapot tisztaságáról a Haar-féle véletlenáramkör-modellben egy klasszikus spinmodell állapotösszegére (Forrás: [4])



3. ábra. Az  $A$  részrendszer tisztaságánál megjelenő statisztikus modell tipikus konfigurációi, (a) amikor az eltelt idő kisebb a részrendszer átmérőjénél (az összefonódás időben nő), és (b) amikor nagyobb (az összefonódás szaturálódik)

felületével, vagyis a nagyobb doménfal nagyobb kvantumösszefonódásnak felel meg. Ennek a viselkedésben két különböző tartományt különböztethetünk meg, attól függően, hogy a  $t$  idő (amely most a klasszikus spinmodell térbeli kiterjedését adja meg a domén-határfeltételre merőleges irányban) kisebb vagy nagyobb-e, mint az  $A$  részrendszer átmérője.

Az első esetben a domén lényegében a felületre merőlegesen terjed ki a rendszer tömbi része felé (3a. ábra), így felületére  $\approx t|\partial A|$  adódik, ahol  $|\partial A|$  az  $A$  régió határfelületének mérete. Ezzel szemben, amikor  $t$  sokkal nagyobb  $A$  átmérőjénél, akkor a domináns kontribúció az, amikor a domén a rendszer felületéhez közel marad (3b. ábra), és felülete arányos  $|A|$ -val. Előbbi annak felel meg, hogy az összefonódás időben növekszik, ahogy az  $A$  részrendszert alkotó részecskék összefonódnak a rajta kívüli részecskékkal, míg utóbbi azt jelzi, hogy az összefonódás szaturálódik, amikor a részrendszer tisztasága elérte a lehetséges minimumát.

A két szakasz közötti átmenet akkor következik be, amikor  $t \sim |A|/|\partial A|$ , azaz  $A$  átmérőjével arányosan növekszik. Ebből definiálhatunk egy ún. „összefonódási sebességet”, amely az összefonódás kialakulásának gyorsaságát jellemzi, és amelynek értéke különbözik a Lieb–Robinson-sebességtől ( $v_E < v_{LR}$ ). Az egydimenziós esetben (ahol a statisztikus modell egy kétdimenziós Ising-moddal analóg) az állapotösszeg egzaktul kiszámítható és az összefonódási sebesség értéke meghatározható.

Bár a fenti számolás a tisztaságra mint legkönnyebben számolható mennyiségre fókuszált, hasonló megfontolások érvényesek az összefonódás más jellemzőire, például az ún. *Neumann-entrópiára* is. Ennek számításánál az  $\hat{U}$  áramkör összes hatványa megjelenik, ami nagyban megnehezíti a számolást, azonban részleges eredmények elérhetőek egy  $1/q$  szerinti sorfejtés alakjában abban az esetben, amikor a qudit  $q$  dimenziója végtelenhez tart. Az így kapott eredmények alátámasztják, hogy a Neumann-entrópiára is érvényes egy doménfalas kép.

Bár ezt a doménfalas képet a Haar-áramkör tulajdonságaiból vezettük le, valódi fontosságát az adja, hogy általánosítható más fizikai rendszerekre is, beleértve a hamiltoni dinamikát is, amint az numerikus számításokkal és elméleti megfontolásokkal alátámasztható. Így tehát a véletlen áramkör általános kvalitatív képet ad, amely a kvantum dinamika bizonyos univerzális

tulajdonságait ragadja meg. Ehhez hasonló kvalitatív leírások vezethetők le más fizikai mennyiségekre is. Összességében ezek a kvantuminformáció terjedésének egyfajta „hidrodinamikai” leírását adják (bizonyos mennyiségek esetén konkrétan klasszikus hidrodinamikai egyenletek, pl. aszimmetrikus diffúzió alakját öltik).

## Variációk egy témára

Az előző fejezetben vázolt számolás a véletlen áramkörök erényeit illusztrálja. Az elmúlt években tudományos cikkek sokasága épített az ehhez hasonló megfontolásokra. Ezek részben a fentihez hasonló Haar-áramkörök különböző tulajdonságait vizsgálják, részben a modellnek olyan módosításait tekintik, amelyek segítségével újabb fizikai effektusok vehetők figyelembe. Most ezen kutatási irányok közül foglalunk össze néhányat.

*Véletlen áramkörök és a kvantumförlény.* A véletlen uniter áramkörök nagy szerephez jutottak a kvantum-számítástudományban is mind elméleti, mind kísérleti szempontból. Ennek az adott jelentős lökést, hogy ezek olyan számítási problémákhoz vezetnek, amelyek klasszikus számítógépen nem szimulálhatóak hatékonyan [5]. Szemben pl. a Shor-algoritmussal, ezek nem kecsegtetnek gyakorlati haszonnal, viszont már a jelenleg elérhető kvantumszámítógépeken is megoldhatóak, így használhatók a gépek tesztelésére.

Egy tipikus példa az ún. mintavételezési probléma. A véletlen áramkör által létrehozott összefonódott kvantumállapoton méréseket végezve a mérési eredményekre egy erősen korrelált valószínűségi eloszlás adódik. Ezt az eloszlást nehéz reprodukálni egy klasszikus algoritmussal, legalábbis akkor, ha a kvantumállapot kellően összefonott (az áramkör nagy mélységű). Ezen az ötleten alapult a Google kvantumszámítógépes csoportjának kísérlete 2019-ben, amelynek kapcsán bejelentették az ún. „kvantumförlény” elérését, azaz végrehajtottak egy olyan számítást, amelyet állításuk szerint a létező legnagyobb klasszikus szuperszámítógépek sem tudnának belátható idő alatt reprodukálni [6]. Ezen számítási problémák vizsgálatánál a fentiekhez hasonló klasszikus statisztikus fizikai megfontolások is szerepet kapnak.

*Kvantumkáosz.* Az (1) Schrödinger-egyenletet jól jellemzik a  $\hat{H}$  Hamilton-operátor sajátértékei és sajátvektorai. A fent vizsgált véletlen áramkörben ezek nem jól definiáltak, hiszen az időfejllesztő operátor időben folyamatosan változik. Ezt azonban orvosolhatjuk, ha a modellt úgy módosítjuk, hogy csak térben legyen véletlenszerű, időben nem. Ekkor az áramkör  $\hat{U} = \hat{V}^t$  alakú, ahol  $\hat{V}$  egy csupán néhány rétegből álló véletlen uniter áramkör, ami időben determinisztikusan ismétlődik. Ekkor  $\hat{V}$  spektruma hasonlóan jellemzi a dinamikát, mint a szokásos esetben a Hamilton-operátoré.

A fenti megközelítés lehetővé teszi az ún. *kvantumkáosz* kérdésének vizsgálatát. Ez azt mondja ki, hogy

egy általános (nem integrálható) kvantumos rendszer esetén a sajátértékek spektrumának bizonyos tulajdonságai megegyeznek a teljesen véletlenszerű (térben nem lokális) véletlen mátrixokéval [7].<sup>7</sup> Bár ezt a sejtést sok numerikus számítás támasztja alá, a véletlen áramkörök szolgáltatják az egyik legelső olyan konkrét modellt, amelyben analitikusan is belátható volt a kaotikus spektrum megjelenése egy térben lokális kölcsönhatásokkal rendelkező rendszerben [8]. Ezen túlmenően a véletlen áramkörök spektruma olyan struktúrát is tartalmaz, amely a térbeli lokalitás következményeként túlmutat a véletlen mátrixok szokásos elméletén, viszont releváns a lokális Hamilton-operátorok megértése szempontjából.

*Szimmetriák és megmaradó mennyiségek.* Mint arra már utaltunk, a véletlen áramkörös modell egyik hiányossága az energiamegmaradás elvének sérülése. Az (1) Schrödinger-egyenlet esetében – hála a Hamilton-operátor lokalitásának – az energiasűrűsége egy lokális kontinuitási egyenlet érvényesül. Ez a rendszer dinamikájának fontos aspektusa, amelyet a fenti áramkörös modellek nem ragadnak meg (ez igaz még az imént tárgyalt, időben determinisztikus áramkörökre is).

Bár az energiamegmaradást nem tudjuk az áramkörös modellben helyreállítani, az ezzel járó fizikai effektusok egy jelentős részét igen, ha az energia helyett valamilyen más folytonos megmaradó mennyiséggel ruházzuk fel őket. Ha például a részecske állapotának  $q$  lehetséges értékére úgy gondolunk, mint egy spin  $z$  komponensének lehetséges állapotaira, módosíthatjuk az áramkört alkotó kapukat olyan módon, hogy a rendszer teljes „mágnesezettsége” a  $z$  irányban megmaradjon az időfejlődés során.<sup>8</sup> Ekkor a mágnesezettségre egy kontinuitási egyenlet érvényesül, transzportját egy egzaktul levezethető diffúziós egyenlet adja meg.

A megmaradó mennyiség jelenléte a kvantumos korrelációk dinamikáját is befolyásolja. A tisztaság vizsgálatához elvégezhető egy, az előző fejezetben tárgyalt-hoz hasonló leképezés egy statisztikus fizikai modellre, amely azonban jóval bonyolultabb; a klasszikus energia komplex lesz (így szigorú értelemben véve ez nem tekinthető statisztikus fizikai modellnek). Egzakt analitikus megoldás ebben az esetben nem ismert, de belátható, hogy a tisztaság viselkedése kvalitatívan megváltozik a megmaradó mennyiség hatására: diffúzív  $-\log \mathcal{P}_A(t) \sim \sqrt{t}$  viselkedést mutat a Haar-féle véletlen áramkörben látott ballisztikus  $-\log \mathcal{P}_A(t) \sim t$  helyett [9]. Numerikus számítások szerint hasonló szubballisztikus viselkedés figyelhető meg hamiltoni rendszerekben is.

*Méréssel indukált fázisátmenetek.* Az eddigiekben zárt rendszerek uniter időfejlődését vizsgáltuk. Módosíthat-

juk modellünket úgy, hogy figyelembe vegye a környezettel való kölcsönhatásból származó nem uniter effektusokat is. Ezeknek két fajtáját különböztethetjük meg. Az egyik a kontrollálatlan zaj, amely során az információ a rendszerből a környezetbe távozik, és az egész rendszer állapota tisztából kevertté változik. A másik, amikor a kísérletező maga végez méréseket a rendszeren; ekkor az állapot tiszta marad, de a kvantummechanika mérési axiómájának értelmében nem uniter módon fejlődik.

Különösen sok figyelmet kapott az elmúlt években az utóbbi eset vizsgálata, és az ezzel kapcsolatos „méréssel indukált fázisátmenet” fogalma. Ennek alapja az uniter kapuk és az egyes quditiken végrehajtott mérések hatásai közötti versengés. Míg az előbbiek a fent vázolt módon összefonódást generálnak, addig a mérések a részecskék közötti összefonódás csökkenéséhez vezetnek (pl. ha minden részecskét megmérnénk, akkor egy teljesen összefonódás-mentes szorzatállapotot kapnánk). Ez a versengés egy fázisátalakuláshoz vezet annak függvényében, hogy a qudithek mekkora hányadát mérjük meg időlépésenként [10]. Ha ez a hányados kicsi, a dinamika kvalitatívan hasonlít a tisztán uniter esethez, és hosszú idő után az  $A$  részrendszer összefonódása arányos lesz a méretével:  $\lim_{t \rightarrow \infty} (-\log \mathcal{P}_A(t)) \sim |A|$ . Ezzel szemben, ha az időlépésenként megmért részecskék száma meghalad egy kritikus hányadost, akkor bármilyen sokáig várunk is, az összefonódás csupán a részrendszer határának méretével fog skálázódni:  $\lim_{t \rightarrow \infty} (-\log \mathcal{P}_A(t)) \sim |\partial A|$ . A két tartományt egy másodrendű fázisátalakulás választja el, amely a megszokott fázisátalakulásokhoz hasonlóan kritikus exponensekkel jellemezhető. Az összefonódás mértékének és jellegének ilyen hirtelen fázisátmenetei nagy érdeklődést keltettek, és más kontextusokban is alkalmazásra találtak.

## Záró gondolatok

A véletlen kvantumos áramkörök a kvantummechanikai időfejlődésnek nagyon sokoldalú modelljei. Velük a dinamika lényeges aspektusai (lokalitás, megmaradó mennyiségek, mérések stb.) figyelembe vehetők minden más részlet elhanyagolása mellett úgy, hogy a véletlen mátrixok egy megfelelő osztályára átlagolunk. Ennek előnye kettős: egyfelől a véletlen áramkör átlagos viselkedésének vizsgálata sokszor egyszerű, egzaktul (vagy majdnem egzaktul) megoldható problémákhoz vezet, másfelől olyan univerzális tulajdonságok ragadhatók meg, amelyek az időfejlődések valamilyen nagy osztályát egységesen jellemzik. Ezen az úton eljuthatunk a kvantuminformáció dinamikájának különféle univerzalizációs osztályaihoz, amelyeket egyszerű hidrodinamikai jellegű egyenletekkel írhatunk le, a klasszikus statisztikus fizikából vett fogalmakkal jellemezhetünk, jelentősen megkönnyítve a fizikai intuíciónak kialakítását. Ezeknek az univerzalizációs osztályoknak (és az őket elválasztó fázisátmeneteknek, pl. a méréseket is tartalmazó modellek esetében) feltérképezése továbbra is aktív kutatási

<sup>7</sup> Ezzel kapcsolatban lásd Takács Gábor cikkét a *Fizikai Szemle* 2025. áprilisi számában.

<sup>8</sup> Ez annak felel meg, hogy a kapukat leíró uniter mátrixok blokkdiagónálisak a megfelelő bázisban.

terület, amelyben a véletlen áramkörös modellek kulcs-szerepet játszanak. Egyszersmind a véletlen áramkörök összekötő kapocsként szolgálnak a fizika és a kvantum-számítástudomány között, ahol az egyik területen felmerülő kérdések egyre többször találhatnak visszhangra (és időnként megoldásra) a másik területen.

## Irodalom

1. E. H. Lieb, D. W. Robinson: The finite group velocity of quantum spin systems. *Communications in Mathematical Physics*, 28, (1972) 251.
2. C. M. Dawson, M. A. Nielsen: The Solovay-Kitaev algorithm. arXiv preprint quant-ph/0505030 (2005).
3. B. Bertini, P. W. Claeys, T. Prosen: Exactly solvable many-body dynamics from space-time duality. arXiv:2505.11489 (2025).
4. M. P. Fisher, V. Khemani, A. Nahum, S. Vijay: Random quantum circuits. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 14, (2023) 335.
5. S. Boixo, S. V. Isakov, V. N. Smelyanskiy, R. Babbush, N. Ding, Z. Jiang, M. J. Bremner, J. M. Martinis, H. Neven: Characterizing quantum supremacy in near-term devices. *Nature Physics*, 14, (2018) 595.
6. F. Arute, K. Arya, R. Babbush, D. Bacon, J. C. Bardin, R. Barends, R. Biswas, S. Boixo, F. G. Brandao, D. A. Buell, et al.: Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 574, (2019) 505.
7. L. D'Alessio, Y. Kafri, A. Polkovnikov, M. Rigol: From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics. *Advances in Physics*, 65, (2016) 239.
8. A. Chan, A. De Luca, J. T. Chalker: Solution of a minimal model for many-body quantum chaos. *Physical Review X*, 8, (2018) 041019.
9. T. Rakovszky, F. Pollmann, C. Von Keyserlingk: Sub-ballistic growth of Rényi entropies due to diffusion. *Physical Review Letters*, 122, (2019) 250602.
10. B. Skinner, J. Ruhman, A. Nahum: Measurement-induced phase transitions in the dynamics of entanglement. *Physical Review X*, 9, (2019) 031009.

# SZUPRAVEZETŐ KVANTUMÁRAMKÖRÖK A BME-N

Kürtössy Olivér, Csonka Szabolcs, Makk Péter\*

BME, Fizika Tanszék, Budapest

\*E-mail: makk.peter@ttk.bme.hu

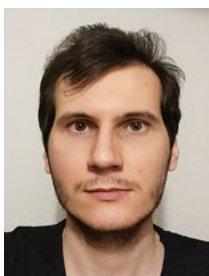
Az elmúlt években a kvantumszámítógép-architektúrák robbanásszerű fejlődésen mentek keresztül, és olyan speciális problémákat lehet velük már most megoldozni, amik klasszikus számítógépekkel komoly kihívást jelentenek – ahogy ez a *Fizikai Szemle* jelenlegi számának több cikkéből is kiderül. Az egyik legperspektivikusabb irány a szupravezető áramkörökre épít, ezekről egy összefoglalás Gyenis András cikkében található. Ebben a cikkben először röviden bemutatjuk a mai legnépszerűbb architektúra, a *transzmon* qubit alapjait és a méréseket, amelyeket a Kvantuminformatika Nemzeti Laboratórium keretében végeztünk, majd újfajta, szilárdtestfizikai alapú, topologikus jelleggel bíró qubitek kutatását ismertetjük.

A qubitek működése a kvantummechanika törvényein alapul, ahol egy kétállapotú rendszer nemcsak az ún. bázisállapotokban – az alapállapotban (0) vagy a gerjesztett állapotban (1) – lehet, hanem ezek tetszőleges szuperpozíciójában. Ezt a Bloch-gömbbel lehet szemléltetni, ahol a qubit állapotát a gömb tetszőleges pontjába mutató vektor jellemzi – szemben a klasszikus bitet jellemző két állapottal, ami az északi és déli saroknak felel

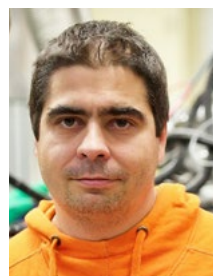
meg (1a. ábra). Az északi (1) és déli sarkot (0) jelentő két állapot, aminek szuperpozíciójaként az összes állapot előállítható, nagyon sokféle fizikai megvalósítással bírhat. A transzmon qubit szupravezető alagútátmeneteken, ún. Josephson-átmeneteken alapszik [1]. A transzmon geometriában egy kis méretű szupravezető fém szigetet egy vékony, szigetelő réteg választ el egy másik szupravezetőtől. A szigetelők az elektronok kvantummechanikai alagutazással át tudnak jutni. Pontosabban, mivel a vezetési jelenségben részt vevő elektronok szupravezetőkben Cooper-párokba rendeződnek, ezek a párok alagutaznak át a Josephson-átmeneteken. A qubit két bázisállapota



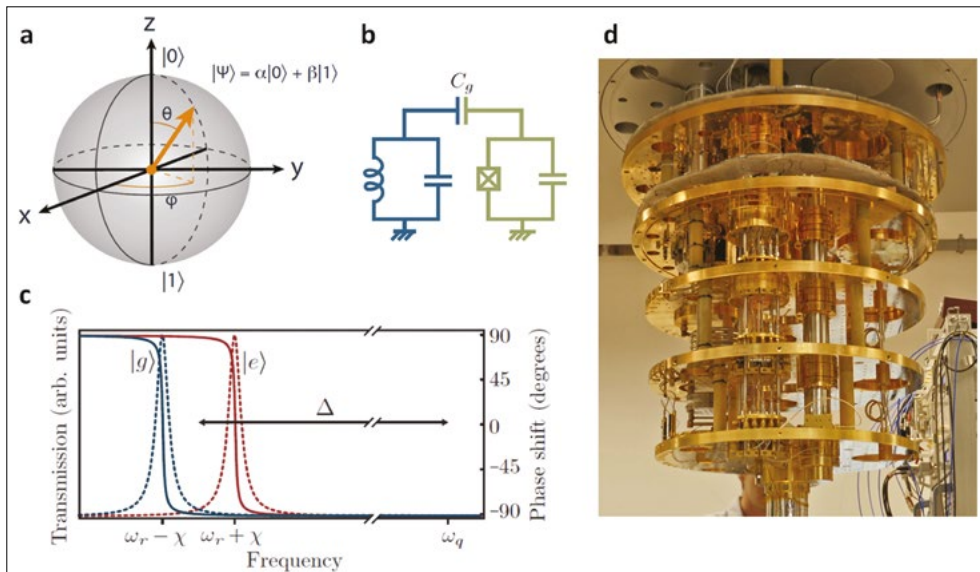
Csonka Szabolcs a BME Fizika Tanszék docense és tanszékvezetője, illetve a Szupravezető Nano-elektronika Lendület Csoport vezetője. A Báze-li Egyetemen töltött Marie Curie-ösztöndíjas posztdoktori kutatásai alatt kezdett foglalkozni a félvezető-szupravezető heterostrukturákkal, majd hazatérve egy ERC Starting Grant segítségével kezdte el kiépíteni a minták készítéséhez és méréséhez szükséges infrastruktúrát. Később a Kvantuminformatika Nemzeti Laboratórium keretén belül vezette a szupravezetőqubit-kutatásokat. Az elmúlt évet az Aacheni Egyetemen töltötte Humboldt-ösztöndíj keretében.



Kürtössy Olivér Csaba a BME Fizika Tanszékének posztdoktori kutatója, a HUN-Ren Nanoérzékelők Csoport munkatársa. Korábban Nemzeti Felsőoktatási, Zemplén Győző Ifjúsági, valamint ÚNKP ösztöndíjat nyert. Kutatási területe az alacsony dimenziós szupravezető-félvezető hibrideken alapuló nanoáramkörök kísérleti vizsgálata.



Makk Péter a BME Fizika Tanszék docense, tanszékvezető-helyettese, a MTA-BME „Korrelált van der Waals Heterostrukturák” Kutatócsoport vezetője. Posztdoktori kutatásait a báze-li egyetemen végezte, ami után Marie Curie-ösztöndíjasként tért haza. Sok egyéb pályázata mellett nemrégiben elnyerte az ERC Consolidator pályázatát. Kutatási területe magában foglalja a szupravezető-elektronika mellett a spintronikát és az új fázisok vizsgálatát kétdimenziós anyagokban.



1. ábra. A transzmon qubit elve. a) A qubit állapotának szemléltetése a Bloch-gömbön.  $\Psi$  a „0” és „1” bázisállapotok szuperpozíciója, amelyek a  $\Theta$  és  $\varphi$  szögekkel parametrizálhatók. b) A transzmon qubit helyettesítő kapcsolási rajza. A Josephson-átmenetek egy kapacitással és hangolható induktivitással modellezhetők (zöld), amit egy kiolvasó rezonátorhoz csatolnak (kék). c) A qubit állapotának meghatározása a rezonátor frekvenciájának vizsgálatával. A transzmisszió rezonancia- (szaggatott) és a fázisgörbéje (folytonos) eltér az alapállapotban és a gerjesztett állapotban. d)  $^3\text{He}/^4\text{He}$  keveréses hűtőrendszer belseje (BME Fizika Tanszék). A folyékony hélium keringetése révén a fémváz lehűl, amelyhez a minták termalizálódnak

lehet például egy Cooper-pár helyzete is: az információt ez esetben az hordozza, hogy a bal, vagy a jobb oldalon helyezkedik-e el. Ezt hívják töltésqubitnek. A transzmon qubit ennek egy változata, ahol nem egy kiszemelt Cooper-pár pozíciójába, hanem sok Cooper-pár kollektív hullámfüggvényébe van az információ kódolva.

A transzmon qubiteket sokszor áramköri helyettesítő képpel írják le (lásd Gyenis András írását). A szupravezetők közt alagutazással átjutó elektronok által szállított áramhoz nem tartozik feszültségesés, az átmenetnek nulla az ellenállása. Azonban a Josephson-átmenetekhez lehet egy induktivitást is társítani, ami a két szupravezető közt levő kapacitással együtt egy rezgőkört eredményez (1b. ábra, zöld rezgőkör). Ez azonban egy veszteségmentes, ugyanakkor nem harmonikus rezgőkör. Ez azért fontos, mert kvantummechanikai rendszerként kezelve a rezgőkört, diszkrét de nem ekvidisztáns energiaszintek jellemzik, amelyek közül a két alsó szintet azonosítjuk a qubit két bázisállapotával, az alap- és gerjesztett állapottal. Mivel az alsó két szint energiakülönbsége eltér más szomszédos szintek energiakülönbségétől, kellően szűk spektrumú mikrohullámú sugárzással ezek közt átmenetek gerjeszthetők anélkül, hogy a többi szintre gerjesztenénk a rendszert (hasonlóan az atomi nívók esetéhez).

Az áramkörök kiolvasásához mikrohullámú szupravezető rezonátorokat használnak (1b. ábra, kék rezgőkör). Ezek a koaxiális kábelhez hasonló geometriával készülnek: egy középső vezetékkel és az azt körülölelő földsíkkal, azonban itt sík geometriában (2a. ábra). Ahhoz, hogy egy rezonátor jöjjön létre, a középső vezetőt általában kapacitással szakítják meg. Ha ezt optikai rezonátorokhoz hasonlítjuk, akkor a kapacitások játsszák

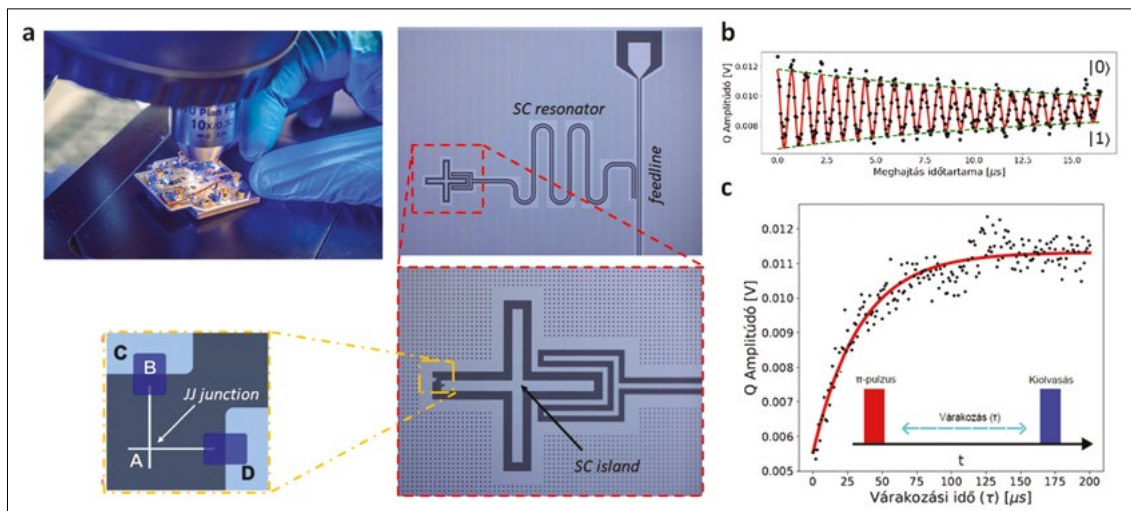
a gyengén áteresztő tükrök szerepét, és a középső vezetőben alakulnak ki a centiméteres hullámhosszú állóhullámok. Mivel az áramkör szupravezetőből készül, a belső veszteségei nagyon kicsik, és ha a kapacitásokat megfelelően tervezik, nagy jósági tényezőjű rezonátorok jöhetnek létre, ahol a mikrohullámú fotonok akár  $10^6$ -szor is oda-vissza pattoghatnak, mielőtt kiszabadulnak a rezonátorból. A nagyon nagy jósági tényező eredményeképp a rezonátor éles rezonanciával bír. Ez látható az 1c. ábrán [2]. A qubiteket a rezonátorhoz közel helyezve,

a rezonátor elektromos tere kölcsönhatást létesít a qubit és a rezonátor közt, hasonlóan az elektromos térbe helyezett atomokhoz. Ennek eredményeképp a rezonátor rezonanciafrekvenciája más és más lesz, ha a qubit 0 vagy 1-es állapotban van, így a rezonátort vizsgálva a qubit állapotát is meg tudjuk határozni.

A qubiteket rádiófrekvenciás terekkel lehet manipulálni: a qubit a bázisállapotok energiakülönbségének megfelelő (Larmor- vagy Rabi-) rádiófrekvenciás térrel jól meghatározott ideig besugározva a Bloch-gömbön tetszőleges állapotba forgatható. Ez a technika jól ismert a mágneses rezonanciás mérésekből [3].

A BME Fizika Tanszékének kvantumeletronika-laborjában is vizsgáltunk transzmon qubiteket, melyeket a göteborgi Chalmers Műszaki Egyetemtől egy közös projekt keretében kaptunk. Az általunk vizsgált áramkör a 2a. ábrán látható. A qubit forgatását jellemző ún. Rabi-mérésnél (2b. ábra) azt mérjük, mekkora valószínűséggel lesz a qubit az alap- és a gerjesztett állapotban különböző hosszúságú besugárzás után. A periodikus jel a qubit  $x$  tengely körüli forgatását jellemzi, míg a forgatás szögét az impulzus hossza adja meg. A forgatás utáni mérés a kvantummechanika szabályainak megfelelően, 0-t vagy 1-et fog adni, az 1a. ábrán jelölt állapot esetén  $|\alpha|^2$  és  $|\beta|^2$  valószínűséggel. A mérést sokszor elvégezve kapjuk meg a 2b. ábrán látható görbét.

A kvantumszámítógépek nagy kihívása, hogy a qubitek a környezethez csatolódnak, ami információvesztéshez is vezet. Az információvesztést általában két számmal jellemzik: a  $T_1$  relaxációs idővel, ami azt mondja meg, milyen időskálán relaxál a qubit az alapállapotba, illetve a  $T_2$  fázisvesztési idővel, ami az 1a. ábrán a  $\varphi$  polárszög



2. ábra. Transzmon qubit mérése. a) Transzmont tartalmazó chip képe. A nagyítás az óramutató járásának megfelelően nő: a bal felső képen a mintatartó fej, majd a rezonátor, és maga a Josephson-átmenet látható. b) Qubit Rabi-mérése. A mikrohullámú elektromos térrel való besugárzással a „0” és „1” bázisállapotok között folytonos forgatások hajthatók végre, az oszcilláció pedig a relaxáció miatt cseng le. c) A relaxációs idő mérése impulzusokkal. A kiolvasás előtt eltelt idő függvényében a rendszer  $T_1$  karakterisztikus idővel relaxál (ahol  $Q$  a rezonátorral visszavert jel 90 fokkal fázistolt komponense)

értékének randomizálását, azaz a síkbeli polarizáció elvesztését írja le. Ezek viszonylag könnyen mérhető mennyiségek; például a  $T_1$  meghatározásához a qubitet az 1-es állapotba gerjesztjük, és megadott idő után kiolvassuk. Ezt a mérést elvégeztük a transzmon qubitre (2c. ábra), ahol a mért  $Q$  amplitúdó az alapállapot betöltési valószínűségével arányos. A  $T_1$  időskála kb. 60  $\mu$ s-nak adódik ebben a mérésben. Hasonló nagyságrendű idő adódik transzmonok esetén a  $T_2$ -re is.

Bár a transzmon információvesztését jellemző  $T_1$  és  $T_2$  időskálák 60  $\mu$ s-os értéke nagyon rövidnek hat, érdemes ezt az értéket kontextusában vizsgálni. Egyrészt ma már akár másodperces  $T_1$  és  $T_2$  időskálák is előfordulhatnak különböző szilárdtestfizikai architektúrákban [4], míg az első qubiteket ns-os időskálák jellemezték. Ez a hatalmas fejlődés nagyon sok fejlesztés eredménye, amelyek egy része anyagtudományi jellegű volt, ami jobban definiált, tökéletesebb minták létrehozására koncentrált, míg egy másik része a környezettel való kölcsönhatások megértését, és azok csökkentését tűzte ki célul. Másrészt a qubit-beli információ várható élettartamát a rajta elvégzendő logikai műveletek hosszához érdemes viszonyítani; ez a mai kvantumszámítógépeken kb. 10 ns.

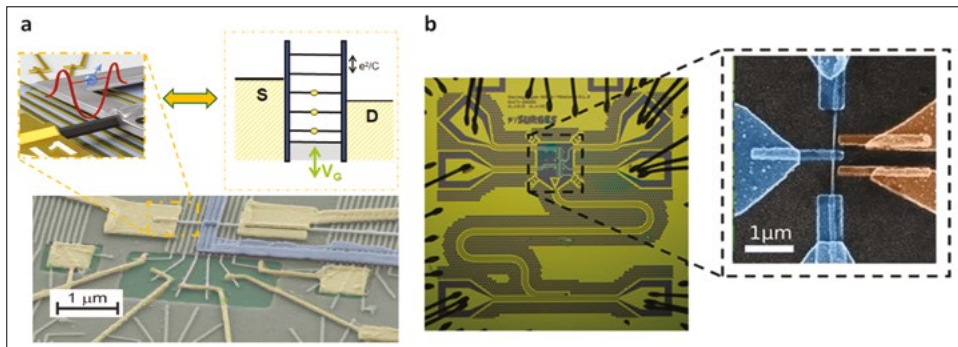
Ma a szupravezető qubitek kutatása két irányban halad. Az egyik, hogy a meglévő qubiteket – mint például a transzmon – optimalizálják, hogy minél többet integrálhassanak egy chipre, azaz egy áramkörbe. Ez azért is fontos, mert sok qubit együttes kvantumállapotait használva logikai qubitként, hibajavító algoritmusokkal kezelhető az információvesztés [5].

A másik irány, amiről a cikk második része szól, és a mi kutatásainkat is motiválja, hogy olyan újfajta qubitarchitektúrákat hozzunk létre, amelyekben az információ hosszabb ideig megőrizhető. Ez egyrészt elérhető a fentebb tárgyalt építőkövek (Josephson-átmenet, kapacitás, induktivitás) használatával, ha azokból bonyolultabb,

összetettebb áramköröket, úgynevezett *védett* (protected) qubiteket készítünk [6]. Másrészt újfajta építőkövekkel ún. topologikus qubiteket lehet létrehozni, amik valamiféle belső védelemmel bírnak az információvesztéssel szemben [7, 8]. Ez a belső védelem a rendszert ellenállóvá teszi a fizikai paraméterek inhomogenitásaival, akár a működés közbeni lassú változásaival szemben is. Ez hasonlít arra, ahogy a geometriában (topológiában) a különböző geometriai objektumok topologikus tulajdonságai robusztusak: mondjuk, a bögre a fánkba apróbb deformációk segítségével átvihető, de a bennük lévő lyukak száma nem változtatható meg. A topologikus qubiteknél ezek a geometriai tulajdonságok általában a részecskék hullámfüggvényére vonatkoznak, például az impulzustérben.

Bár topologikus qubitet még nem sikerült megvalósítani (a sajtóközleményekkel ellentétben még a Microsoftnak sem, legalábbis erről még nem közöltek tudományos eredményt), de sok elméleti javaslat létezik erre. Ezek a javaslatok általában úgynevezett mesterséges atomokból (kvantumpöttyök), spin-pálya kölcsönhatást erősítő anyagokból és szupravezetőkből építkeznek [9]. A mi kutatásaink ezen rendszerek alapvető tulajdonságainak megértésére koncentrálnak, ahol a kvantumpöttyöket félvezető InAs struktúrában hozzuk létre.

Kutatásaink a következő menetrend szerint zajlanak. Az elméleti modelleket általunk tervezett és megvalósított áramkörökön teszteljük. Ehhez platformként vagy kvázi-egydimenziósnak tekinthető InAs-nanopálcákból, vagy félvezetők hatásán kialakított kétdimenziós elektrongázokból indulunk ki. Ahhoz, hogy az elektronokat a félvezető egy szűk térrészébe, azaz egy kvantumpöttybe csapdázzuk, a tranzisztoroknál is használt úgynevezett kapuelektrodákat veszünk igénybe. Ezekre a kapuelektrodákra negatív feszültséget kapcsolva egy elektrosztatikus potenciálgátat hozhatunk létre az elekt-



3. ábra. Kvantumpöttyön alapuló nanoáramkörök. a) Szupravezetővel (kék) és normál fém (sárga) elektródákkal kontaktált nanopálca döntött elektronmikroszkópos felvétele (lent). A kvantumpötty sematikus képe bal fent, a szerkezeti ábrája jobb fent látható. A hangolást a vékony kapuelektrodák biztosítják. b) Szupravezető rezonátort és a hozzácsatolt, párhuzamos Josephson-átmenetekből felépülő nanoáramkört tartalmazó chip (balra). Az átmenetek (jobbra) közötti hibridizáció képezi az Andrejev-molekulát

ronok számára, így két ilyen kaput használva egy kvantumpötty alakítható ki egy nanopálca esetén (ahogy kétdimenziós elektrongáznál is). A kis térfogat következtében – akárcsak valódi atomoknál – az elektronok diszkrét nívókat tölthetnek be, így további elektródákat használva ezen energiaszinteket hangolni tudjuk. Ahhoz, hogy elektromos méréseket tudjunk végezni, a pálcákra vezető további elektródákat készítünk, melyek egy része a szupravezetés létrehozásáért is felelős.

Az áramköröket a chipgyártásban is használatos elektronsugár-litográfiai módszerekkel hozzuk létre a HUNREN EK MFA tisztaterében. Az áramkört CAD-szoftverekkel megtervezzük, majd a szilíciumlapkát (amire a minta készül) egy érzékeny lakkréteggel vonjuk be. A megtervezett rajzolat mentén elektronnalábbal világítjuk meg a mintát, ami után szelektíven el tudjuk távolítani a lakkréteget, és egy következő lépésben ezekre a helyekre fémet (Au, Al, ..., amire szükség van) tudunk párologtatni. Egy ilyen minta (3. ábra) elkészítése öt-hat ilyen lépéssorozatból áll, és egy-két hetet igényel. Ezután a BME Fizika Tanszékén, a laborunkban a mintát vékony, 100  $\mu\text{m}$ -es vezetékekkel kötjük ki a chiptartó áramkörökre, melyek a mérőrendszerhez további vezetékekkel kapcsolódnak.

Ahhoz, hogy az áramkörökben kvantumbites viselkedést tudjunk kimérni, azokat ultraalacsony hőmérsékletre, pár 10 mK-es tartományra kell hűteni. Ennek egyik oka, hogy az általunk használt szupravezetőben, az alumíniumban, csak 1 K alatt alakul ki a szupravezető állapot. Másrészt a mintát minél jobban szeparálni kell a környezettől – például a magas hőmérsékleten nagyobb intenzitással megjelenő rácsrezgésektől. Végül a qubitek esetén arra is figyelni kell, hogy ne jöjjön létre a gerjesztett állapotnak egy elhanyagolható arányú betöltése csupán a hőmérséklet hatására, illetve, hogy a szupravezető rezonátorokban ne jelenjenek meg termikusan gerjesztett fotonok.

Az általunk használt hűtőrendszer egy ún. *keveréses hűtő* (dilution fridge, 1d. ábra), ahol a hűtés folyékony  $^3\text{He}$  és  $^4\text{He}$  keverése révén történik. A két keveréses hűtőgépünk és egy He-cseppfolyósító, mely a BME kampuszán, külön épületben van, Magyarországon egyedülálló ala-

csony hőmérsékleti infrastruktúrát alkotnak. A keveréses hűtőket a világon három cég gyártja, egyedileg készülnek el, és építésük egy évet igényel. A hűtőgép belső térfogatát az 1d. ábrán látható aranyozott tárcsa alakú lapok osztják részekre, fokokatokra. A lapok a rendszernek a környezettől való elszigetelését biztosítják: fentről lefele haladva a különböző fokozatok egyre hidegebbek. Az alacsony

hőmérséklet eléréséhez fontos, hogy az elektromágneses és egyéb zajokat, hőmérsékleti sugárzást, minimálisra csökkentsük. Ehhez a mérőelektronika egy részét is (például erősítőket) valamelyik hűtött fokozaton tartjuk, a tárcsákhoz rögzítve, hogy az általuk létrehozott elektronikai zajt is minimalizáljuk.

Két elkészült minta látható a 3. ábrán. A bal alsó elektronsugár-mikroszkópos képen jól kivehetők a fésű fogaihoz hasonlóan elhelyezkedő kapuelektrodák, melyek a rájuk helyezett nanopálcákban hozzák létre a kvantumpöttyöt (lásd a bezáró potenciált, illetve a sematikus nívószerkezetet a 3a. ábrán). A kék elektróda felelős a szupravezető elektrópárok félvezetőbe injektálásáért. Ebben az áramkörben a szupravezető két oldalán két kvantumpötty is létrehozható – ezek energiasajátállapotai hibridizálhatnak a szupravezető elektródán keresztül. Szerkezetét tekintve egy ilyen struktúra a hidrogénmolekulával analóg; a kvantumpöttyök töltik be a hidrogénatomok szerepét, míg a csatoló közeget a szupravezető kondenzátum biztosítja a vákuum helyett [10]. Ezt az ún. Andrejev-molekulát először nekünk sikerült megmutatnunk [11], és ez lehet a topologikus qubitek alapvető építőköve. Egy hasonló rendszer látható a 3b. ábrán, ahol a kvantumpöttyöket oldalsó kapuelektrodákkal lehet hangolni, és hasonlóan a transzmon architektúrához, az áramkör egy szupravezető rezonátorhoz csatolódik. Ez az áramkör két újfajta, ún. Andrejev-qubit csatolását valósíthatja meg.

Az elmúlt években a kvantumszámítógépek kutatása robbanásszerű fejlődésen ment keresztül. Bár a kutatásoknak rengeteg mérnöki aspektusa is van, az újfajta qubitek vizsgálata és megértése a szilárdtestfizika és az anyagtudomány legizgalmasabb kérdéseire kapcsolódik, és a következő évtizedben (vagy évtizedekben?) a fizika meghatározó területét fogják képezni.

## Irodalom

- Koch, J., Yu, T. M., Gambetta, J., Houck, A. A., Schuster, D. I., Majer, J., Blais, A., Devoret, M. H., Girvin, S. M., Schoelkopf, R. J.: Charge-insensitive qubit design derived from the Cooper pair box. *Physical Review A*, 76(4), (2007) 042319. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.76.042319>

2. A. Blais, A. L. Grimsmo, S. M. Girvin, A. Wallraff: Circuit quantum electrodynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 93, (2021) 025005.
3. Charles P. Slichter: Principles of Magnetic Resonance. 3rd Edition, Springer, ISBN: 978-3540501578
4. Andrea Morello: Donor spins in silicon for quantum technologies. *Advanced Quantum Technologies*, <https://doi.org/10.1002/qute.202000005> (2020).
5. R. Versluis, S. Poletto, N. Khammassi, B. Tarasinski, N. Haider, D. J. Michalak, A. Bruno, K. Bertels, L. DiCarlo: Scalable quantum circuit and control for a superconducting surface code. *Physical Review Applied*, <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.8.034021> (2017).
6. András Gyenis, Agustin Di Paolo, Jens Koch, Alexandre Blais, Andrew A. Houck, David I. Schuster: *PRX Quantum*, <https://doi.org/10.1103/PRXQuantum.2.030101> (2021).
7. C. W. J. Beenakker: Colloquium: Majorana fermions in nuclear, particle, and solid-state physics. *Reviews of Modern Physics*, <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.87.1037> (2013).
8. S. Das Sarma, M. Freedman, C. Nayak: Majorana zero modes and topological quantum computation. *NPJ Quantum Information*, <https://doi.org/10.1038/npjqi.2015.1> (2015).
9. A. Tsintzis, R. Seoane Souto, K. Flensberg, J. Danon, M. Leijnse: Majorana qubits and non-abelian physics in quantum dot-based minimal Kitaev chains. *PRX Quantum*, 5, 010323. <https://doi.org/10.1103/PRXQuantum.5.010323> (2024).
10. Zoltán Scherübl, András Pályi, Szabolcs Csonka: Transport signatures of an Andreev molecule in a quantum dot–superconductor–quantum dot setup. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, <https://doi.org/10.3762/bjnano.10.36> (2019).
11. Olivér Kürtösy, Zoltán Scherübl, Gergő Fülöp, István Endre Lukács, Thomas Kanne, Jesper Nygård, Péter Makk, Szabolcs Csonka: Andreev molecule in parallel InAs nanowires. *Nano Letters*, 21, (2021) 7929.

## KÖNYVESPOLC

# SEAN CARROLL: „THE BIGGEST IDEAS IN THE UNIVERSE: SPACE, TIME, AND MOTION” – DUTTON, USA, 2022

Horváth Dezső

HUN-REN Wigner FK és Babeş-Bolyai Tudományegyetem

E-mail: horvath.dezso@wigner.hu

A kiváló fizikus és világhíres ismeretterjesztő nagy fába vágta fejszéjét ezzel a könyvvel. A *Bevezetés*ben felírja Einstein egyenletét, amely a testek gravitációs mozgását a téridő görbületével értelmezi, azt pedig összekapcsolja a tér energia-impulzus eloszlásával, azaz az energia-impulzus tenzorral. Utána megígéri, hogy a könyv elolvasása után a középiskolás fizikában tájékozott olvasó érteni fogja az egyenletet. Azt is elmondja, hogy az értés egyáltalán nem jelenti azt, hogy az egyenletet meg is fogjuk tudni oldani; ahhoz nagyon mély ismeretek kellenek, de tudni fogjuk, hogy mi mit jelent benne. Ezen a ponton megjegyzi, hogy mély szakadék tátong az általános ismeretterjesztő irodalom és a tankönyvek között: az első feltételezi, hogy az olvasót nem érdeklik a matematikai alapok, az utóbbi meg arra szolgál, hogy az olvasó eljusson az egyenletek megoldásáig. Ezt próbálja itt áthidalni.

A szimmetriákkal és megmaradási törvényekkel kezdi, majd a második, *Változás* fejezetben nekilát felépíteni az alapvető matematikai apparátust. Vektorok, függvények, differenciálás és integrálás, differenciálegyenletek. A *Dinamika* fejezet következik, a mozgást kiváltó erők leírása, Newton törvényei és a mechanika energiaalapú leírása mindezt a harmonikus oszcillátorral szemlélítve. Bevezeti a fázisteret és a konfigurációs teret, a legkisebb hatás elvét és a Lagrange-függvényt. A *Tér* fejezet felépíti a Hamilton-féle mechanikát és kimondja a lokalitás elvét, miközben bevezeti a parciális deriválást. Az *Idő* fejezet a fejlődést tárgyalja a téridő-tükrözési (CPT) invarianciával és az entrópiával. Itt logikusan a *Téridő* következik: az elektromágnesség Maxwell-leírása és a relativitás elve az ikerparadoxonnal (amely valójában

nem ellentmondás). Előkerül a horizont és a fénykúp, a Lorentz-transzformáció és a négyesvektorok. Eddig tehát lényegében az egyetemi fizika-alapképzés elméleti tananyagát sűríti egy fél könyvbe a szerző.

Nagy ugrás következik a *Geometria* fejezettel. Elsőként természetesen az euklideszi síkgeometriát tárgyalja. Innen megy át a görbültekre, Bolyait is megemlítve, majd az Einstein által is használt Riemann-geometriára. A metrika következik, miközben bevezeti a mátrixokat (nem a „Mátrix” film világát, persze) és a tenzorokat, valamint a skaláris, vektor- és tenzormezőket és műveleteiket. Itt tér vissza a legkisebb hatás elvéhez, amellyel görbült térben a geodéziai pályák mentén közlekedünk. Ezután már tényleg a *Gravitáció* fejezet jön. Itt az ekvivalencia elve van soron, az elemi úthossz a Minkowski-metrikában és a táguló világegyetem, majd az energia-impulzus tenzor és végül maga az Einstein-egyenlet a Ricci-tenzorral. Az utolsó fejezetet teljes egészében a fekete lyukaknak szenteli, még a gravitációs hullámokat is tárgyalja.

A szerző tehát beváltja ígéretét: valóban eljut középiskolai alapokról az Einstein-egyenletig. Sőt sokkal tovább. Nekem, a fizikusnak az eleje kissé unalmas volt, de közben remek eszmefuttatásokat olvastam. Kérdés azonban, lesz-e egy középiskolás fizikán nevelkedett, egyetemi fizikát nem tanult érdeklődőnek elegendő kitartása az egészhez. Ilyenkor a Hawking-szám jut eszembe, amely azt mutatja, hányan olvasnak végig egy könyvet azok közül, akik belekezdtek. Stephen Hawking leghíresebb könyve, „Az idő rövid története” állítólag 6%-ot kapott. Carroll műve ezzel együtt is nagyon értékes, bárki számára olvasásra érdemes.

# A kvantumok világa, előadás-sorozat 2025. szeptemberben az MTA XI. Fizikai Tudományok Osztálya szervezésében

2025-ben ünnepli az emberiség a kvantumelmélet századik születésnapját (<https://quantum2025.org/>). Ez az egykor ezoterikusnak, a mindennapoktól távolinak tűnő tudományág az elmúlt évszázadban átalakította a világ arculatát. Nemcsak a természettudományon, ezen belül a fizikán belül okozott személeti forradalmat és nyitott meg számos gyökeresen új kutatási irányt, hanem a rá épülő modern technológia behatolt a mindennapi életbe is – elég az informatika széles körű társadalmi hatásaira utalni.

A kétszáz éves Magyar Tudományos Akadémia Fizikai Osztálya tehát nem köszönheti méltóbb módon a ket-tős évfordulót, mint azzal, hogy a tudomány iránt ér-deklődőknek a kvantumelmélet alapfogalmai, furcsa és a köznapai szemlélet számára nehezen elfogadható gon-

dolatvilága mellett bemutatja a kvantumfizikára épülő új tudományágakat is a kvantumkémia-tól a részecskefizi-káig, valamint a kvantumelmélet eredményeit gyakorlati alkalmazásokra váltó modern technológiát a lézerfizikától a sugárbiológián át a kvantuminformatikáig.

**A jubileumi előadás-sorozat az MTA Nagytermében lesz, 2025. szeptember 3. és 29. között.** A 12 előadást az egyes területek kiváló szakemberei tartják, a tudományos hitelesség mellett a közérthetőség szempontjait is figye-lembe véve. A sorozat előadásainak nézői és az előadások-ról készült videókat megtekintők átfogó képet kaphatnak a huszadik század egyik legnagyobb tudományos áttöré-séről, valamint az immár termőre fordult kvantumelmélet 21. századi gyümölcsseiről és várható eredményeiről is.

## Az előadások részletes programja és a regisztráció:

<https://mta.hu/kvantumok-vilaga-2025>

*Felhívjuk a kísérő tanárok figyelmét a csoportos regisztráció lehetőségére, melynek választásával  
elegendő a kísérő tanár adatait, továbbá az előadásra vele érkező diákok számát megadni.*

**A kvantummechanika itt van velünk** – Cserti József (ELTE), 2025. szeptember 3.

**Mi tartja össze a molekulákat?** – Kürti Jenő (ELTE), 2025. szeptember 3., 18.00

**Milyen a világ, ha kvantum?** – Takács Gábor (BME), 2025. szeptember 8., 17:00

**Schrödinger macskája a laborban** – Domokos Péter (HUN-REN Wigner FK), 2025. szeptem-ber 8., 18:00

**Mit keres a kvantumfizika az orvostudományban?** – Fröhlich Georgina (SE), 2025. szeptember 10., 17.00

**A kvarkoktól a csillagokig** – Csanád Máté (ELTE), 2025. szeptember 10., 18:00

**Kvantumfizika a csillagokban: az elemek keletkezése** – Fülöp Zsolt (HUN-REN ATOMKI), 2025. szept-ember 15., 17.00

**Kvantumok között – Utazás az elemi részecskék különleges világába** – Pásztor Gabriella (ELTE), 2025. szeptember 15., 18.00

**Nanoelektronikától a kvantumelektronika felé** – Csonka Szabolcs (BME), 2025. szeptember 17., 17:00

**A ma és a holnap kvantumszámítógépei** – Asbóth János (BME), 2025. szeptember 17., 18.00

**Neumann Jánostól a kvantumos összefonódásig** – Zaránd Gergely (BME), 2025. szeptember 29., 17.00

**Kvantumkorszakok az Univerzum történetében** – Dávid Gyula (ELTE), 2025. szeptember 29., 18.00

# HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont

**MEGISMERNI A VILÁGOT  
AZ ELEMI RÉSZECSKÉKTŐL  
A CSILLAGOKIG**

Kutatás. Innováció. Hatás.



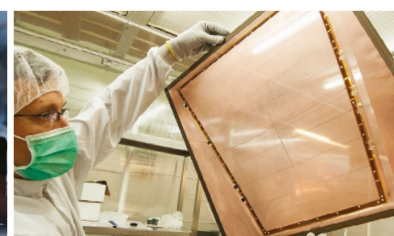
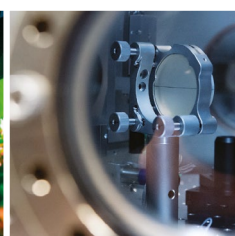
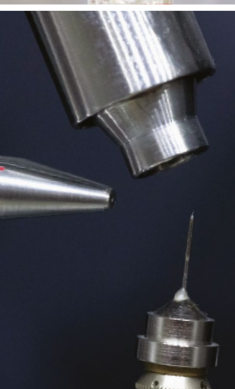
[wigner.hun-ren.hu](http://wigner.hun-ren.hu)

## Részecske- és Magfizikai Intézet

- Kísérleti és elméleti részecskefizika
- Asztro-részecskefizika
- Gravitáció és általános relativitáselmélet
- Plazma- és űrfizika
- Magfizika
- Magfizikai jellegű módszereket alkalmazó anyagtudomány
- Komputációs tudományok és elméleti idegtudomány

## Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet

- Kísérleti és elméleti szilárdtestfizika
- Kvantumoptika és kvantuminformatika
- Lézerspektroszkópia és fotonika, ultragyors folyamatok kutatása
- Folyadékszerkezet, gázkiszülések, elektrolitikus nanoszerkezetek
- Statisztikus fizika
- Anyagtudomány és nanotechnológia



„Ha a tudomány majd oly nagyra nő, hogy az emberi elme nem lesz képes azt egészében felfogni, s az emberi élet túl rövid lesz, semhogy idejében eljuthassunk az első vonalakba, hogy ott a tudomány gyarapításán fáradozzunk, nem képezhetné-e több ember kutatócsoportot, s nem végezhetné-e el együttesen azt, amit egyetlen személy nem képes elvégezni? ...

... Az együttműködésekben folytatott kutatás lehetőségeit az eddigieknél sokkal behatóbban kellene tanulmányozni, mivel mindeddig ezek képezik az egyetlen látható reménységet a tudomány megújulására, amikor az majd már túl nagyra növekedett egyetlen személy számára.”

Wigner Jenő (1902-1995), Nobel-díjas fizikus  
A tudomány határai, 1950