

УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ
ФАКУЛТЕТ

Институт за физику

Момир Арсенијевић

МОДЕЛ УНУТРАШЊЕГ
ОКРУЖЕЊА
У ШТЕРН-ГЕРЛАХОВОМ
ЕКСПЕРИМЕНТУ

Магистарска теза

Крагујевац, 2010. године

На овом месту желим, пре свега, да захвалим руководиоцу овог рада, мом ментору, проф. др Миролубу Дугићу, на уложеној подршци и труду – захваљући чему је овај рад приведен крају. Речи захвалности иду и члановима комисије, професорима Таску Грозданову, Ивану Живићу и Драгославу Никезићу. Њихове примедбе и сугестије су свакако побољшале квалитет текста Рада. Захвалио бих се, такође, осталим колегама са Института за физику у Крагујевцу, који су ми излазили у сусрет и као морална и као стручна подршка током истраживања и писања рада. На крају, захваљујем Министарству за науку и технолошки развој на континуираној финансијској и материјалној подршци, током учествовања на пројекту 141016, под руководством проф. др М. Дугића.

Предговор

Понекад се у физици дешава да се фундаменталним експериментима прилази на превише поједностављен начин, а што је са Штерн-Герлаховим експериментом сасвим сигурно случај. Значај експеримента је веома познат, од тренутка када су Годсмит и Уленбек дали своје тумачење појави два трага атома сребра на екрану. Ипак, теоријско објашњење и интерпретација експеримента има и другу димензију, где степени слободе спина такође играју важну, али не и једину улогу.

Другачија перспектива експеримента је понајвише проистекла из разматрања везаних за квантну теорију мерења, посебно са радом Дејвида Бома (Bohm 1951) где је указано да су и други степени слободе у атому (прецизније, реч је о степенима слободе центра масе атома), сем спинских, такође од интереса. Такво моделовање води ка објашњењу – сматра се – употребе појма “класичних трајекторија” атома у експерименту, атома који се иначе сматрају за квантне објекте.

Овај рад је посвећен анализи идеје о унутрашњем окружењу у атому са циљем да се дође до одговора да ли узимање у обзир тих степени слободе води ка репродукцији класичних трајекторија атома. Предлог о разматрању унутрашњег окружења¹ (Dugić 2004a) у атому је, чини се, природни наставак Бомовог моделовања, а у духу теорије декохеренције у којој је појам окружења међу основним појмовима. При томе, ваља нагласити да сама идеја о унутрашњем окружењу није нова (Omnès 1994), али у контексту атомских подсистема она то јесте.

Следећа поглавља су организована са циљем разраде идеје о могућем унутрашњем окружењу у атому. Увод, пре свега, даје представу о томе какво је место експеримента, у смислу његовог тумачења, у савременој литератури. Преглед није исцрпан, али показује да јединственог становишта нема. Поред тога, представљени су основни елементи теорије декохеренције, која нуди и мотивацију а у исто време је и радни оквир анализе. У првом поглављу говори се о физичким и теоријским основама експеримента, на начин који следи за стандардни и где се види да има места и за нестандартно размишљање, мотивисано декохеренцијским прилазом атому као сложену систему. Друго поглавље је посвећено атомским подсистемима и динамици у оквиру атома, што се показује као кључни момент у анализи – на атом се може гледати из више углова: у зависности од изабране декомпозиције атома зависиће и физичке предикције а понајвише информације о динамици атома које се могу добити. Затим следи Дискусија добијеног резултата, па онда Закључак Тезе. Додаци на крају рада су у функцији одговарајућих

¹Енгл.: Internal environment.

одељака, а омогућавају и да се главнина текста растерети непотребних детаља.

Свакако, Штерн-Герлахов експеримент је био извор инспирације (и за синтезу и за анализу) и у другим областима физике. Нпр., у области интерферометрије врло је познат Штерн-Герлахов интерферометар (Berman 1997), па оптички аналогон експеримента у квантној оптици (Walls and Milburn 1994), док се у оквири-ма квантног рачунања² говори о Штерн-Герлаховом експерименту као о моделу за квантни хардвер (Nielsen and Chuang 2000), што све указује на актуелност саме физичке ситуације описане експериментом, дуго времена после оригиналне поставке. Стога, и није необично да је овај рад посвећен теоријској анализи експеримента, а са аспекта теорије декохеренције, теорије чији је основни циљ објашњење и опис понашања физичких система на граници између два света – света квантне и класичне физике.

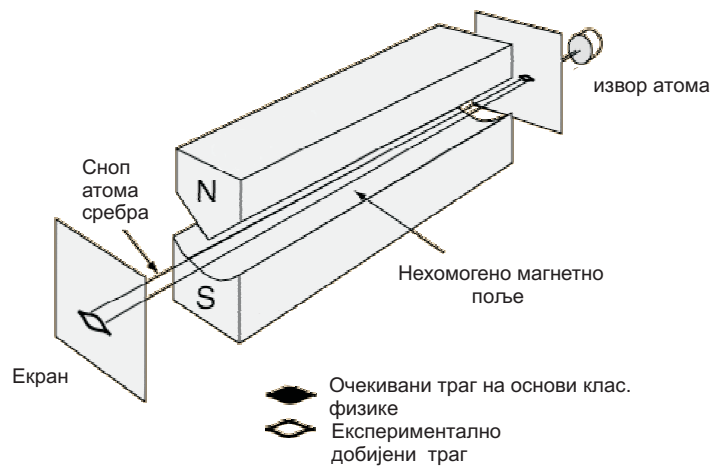
²Енгл.: Quantum computation.

Садржај

1	Увод	1
2	Теорија Штерн-Герлаховог експеримента	10
3	Подсистеми атома и њихова динамика	18
3.1	Атомски центар масе	18
3.2	Језгрени центар масе	20
3.2.1	Елементи адијабатске апроксимације	22
3.2.2	Адијабатски параметри	24
3.2.3	Интеракција	26
4	Дискусија	30
	Закључак	35
A	Атомски и језгрени центар масе	36
B	Прорачун интеракције \hat{H}_{CM+R}	39
Ц	Адициона теорема; квадрат асоцираног Лагеровог полинома	47
Д	Препринт рада прихваћеног за објављивање у Acta Physica Polonica A	50
	Литература	58
	Биографија аутора	61

Увод

Штерн-Герлахов експеримент је познат као парадигма мерења спина, што значи да је уобичајено да се сматра добро објашњеним експериментом. У принципу (поједностављено) експеримент изгледа овако: Колимисани сноп спорих једновалентних атома (нпр. сребра), у лабораторијском вакууму, пролази кроз нехомогено магнетно поље са **израженим** градијентом. Након проласка кроз поље атоми доспевају до екрана, где се јасно уочавају два трага¹.



Слика 1.1: Штерн-Герлахов експеримент.

У опису Штерн-Герлаховог експеримента раширено је коришћење појма класичних трајекторија: атоми следе једну од двеју могућих путања са неком вероватноћом. Фраза “класична трајекторија” има стандардно значење: то је путања коју физички систем, представљен материјалном тачком, следи у конфигурационом простору, подпростору класичног фазног простора.

¹Мало детаљније о самом експерименту се може наћи у другом поглављу.

Употреба појма класичних трајекторија, када је о Штерн-Герлаховом експерименту реч, сеже још из раних дана квантне механике, поглавито под утицајем Нилса Бора и Волфганга Паулија (Batelaan *et al* 1997). То се, рецимо, види у Мотовом раду (Wheeler and Zurek 1983) у коме је реч о одређивању магнетног момента (спина) слободног електрона. Мот тврди да се у ту сврху не може користити концепт класичне трајекторије, који је примењив кад је реч о мерењу магнетног момента атома.

Али, без обзира на, може се рећи, традиционално прихваћен концепт класичних путања атома у овом експерименту, међу физичарима не постоји усаглашен став о њиховој егзистенцији. Тако, у (Tannoudji *et al* 1977) се каже: “It does not mean, as we shall see, that the particle itself follows a classical trajectory”². У супротности са овим у (Li *et al* 2007) стоји: “In this paper we show that even in the absence of a magnetic field gradient, the center-of-mass of certain atoms and molecules in optical field follow different trajectories corresponding to different inner states”³. Сличан став овом последњем је заступљен и у (Sakurai 1994): “Because the atom as a whole is very heavy, we expect that the classical concept of trajectory can be legitimately applied”⁴. Такође, и у (Omnès 1994) може се наћи: “So, after crossing the magnet, the complete wave function has become a sum of two parts associated with the two different spin state, each one of them being localized in the vicinity of a different trajectories...”⁵ И у новијој литератури се могу наћи исказани везани за Штерн-Герлахов експеримент, а који почивају на постојању класичних путања. Такав пример је (Breuer and Petruccione 2002) где се каже: “Picking up a particular beam from the ensemble...”⁶ што значи да у међупростору између екрана и магнета постоје добро дефинисане путање атома.

Штерн-Герлахов експеримент се често наводи као један од најбољих и најјаснијих примера мерске ситуације у квантној теорији мерења. Свакако, реч је о мерењу опсервабле спина. Композитни систем који се, уобичајено, разматра при квантно-мерним анализама гласи: спин атома+просторни степени слободе атома+Штерн-Герлахов магнет+екран (Bohm 1951). У оваквом једном моделовању магнетно поље је спољашње (класично) поље које дефинише потенцијалну енергију атома, тј. нема улогу динамичког подсистема⁷, а екран само констатује да ли је измерени спин “горе” или “доле”. Дакле, у овој представи о експерименту нема места за макроскопски систем који може играти улогу апарата, како то захтева квантна теорија мерења (von Neumann 1955; d’Espagnat 1971; Peres 1993).

²То не значи, као што ћемо видети, да сама честица следи класичну трајекторију.

³У овом раду ћемо показати да чак и у одсуству градијента магнетног поља, центар масе извесних атома или молекула у оптичком пољу следи различите трајекторије које одговарају различитим унутрашњим стањима.

⁴Зато што је као целина атом врло масиван, за очекивати је да класични концепт трајекторије може бити доследно примењен.

⁵Дакле, после проласка кроз магнет, комплетна таласна функција постаје збир два спинска стања, од којих је сваки посебно локализован у близини различитих трајекторија...

⁶Одабирањем једног снопа из ансамбла...

⁷Узимање магнетног поља за динамички систем повлачи за собом да га је потребно посматрати као квантни објекат и описати у терминима квантне теорије поља, дакле у супротности са њему придруженом класичном природом по стандардном приступу.

Бомов је допринос (Bohm 1951) што је тај “макроскопски” систем потражио у самом атому, узимајући центар масе атома за макроскопски апарат (по свој прилици, чињеница која није ни широко позната а ни призната). Бомово моделовање, дакле уводи следећи композитни систем у разматрање: спин атома+ **центар масе атома**+Штерн-Герлахов магнет+екран. Главни резултат Бомове анализе је израз за сплетено стање којим се описује $S + CM$ систем (за детаље видети 2. главу):

$$|\Psi\rangle_{S+CM} = C_1|-\rangle_{CM}|\uparrow\rangle_z + C_2|+\rangle_{CM}|\downarrow\rangle_z. \quad (1.1)$$

Стање (1.1) представља суперпозицију стања $|-\rangle_{CM}|\uparrow\rangle_z$ и $|+\rangle_{CM}|\downarrow\rangle_z$ – то значи да систем нема путању (d’Espagnat 1971).

Иако је Бом дао математички модел (Bohm 1951) који се често користи и за последицу има израз (1.1) и даље је често у употреби терминологија класичних путања. Стање у којем атом има могућност да буде, или у стању $|-\rangle_{CM}|\uparrow\rangle_z$, или у стању $|+\rangle_{CM}|\downarrow\rangle_z$, се записује као:

$$\hat{\rho}_{S+CM} = |C_1|^2|+\rangle_{CM}\langle +|\otimes|\downarrow\rangle_z\langle\downarrow| + |C_2|^2|-\rangle_{CM}\langle -|\otimes|\uparrow\rangle_z\langle\uparrow|. \quad (1.2)$$

Изрази (1.1) и (1.2) су међусобно искључиви: стање (1.1) носи квантне корелације (сплетеност) S и CM подсистема у атому и не допушта постојање класичне путање атома, док израз (1.2) носи класичне корелације и подразумева да атоми следе класичне путање.

И са гледишта квантне теорије мерења стања (1.1) и (1.2) имају различите аспекте. Ако је стање (1.1) довољно за опис физичке ситуације у експерименту и путање не постоје, то значи да екран има активну улогу у експерименту. Активна улога екрана је у смислу да се редукција одвија на екрану кроз механизам квантних мерења II врсте, што на крају даје информацију о спину. Ако ово није случај, и важи релација (1.2), онда се редукција одвија испред екрана (кроз механизам квантних мерења I врсте), путање објективно постоје а екран ретроспективним мерењем само утврђује њихову егзистенцију. Екран онда има пасивну улогу – не учествује динамички у промени стања из (1.1) у (1.2)⁸.

У раду је представљен приступ са циљем рашчишћавања дилеме о егзистенцији класичних трајекторија као фундаменталног физичког појма – у оквиру теорије декохеренције и ортодоксног приступа квантне механике (метода унитарног оператора). Тиме се, са једне стране, избегавају тумачења експеримента

⁸Квантна теорија мерења разликује два типа мерења: I и II врсте. Под мерењима I врсте подразумевамо таква мерења која омогућавају предикцију (предвиђање) стања физичког система после мерења и поновљивост мерења - пример су предиктивна мерења. Под мерењима II врсте подразумевамо мерења након којих систем није више доступан за поновно мерење - мерење је непоновљиво. Пример су ретроспективна мерења, где се добијене информације о физичком систему тичу времена пре обављеног мерења.

у оквиру других интерпретација квантне механике, а са друге стране се постиже моделска независност.

Ако класичне путање атома заиста постоје, онда би теорија декохеренције требало то и да потврди, тим пре ако се има у виду њен основни циљ – опис прелаза са квантног на класично понашање физичких система (Joos *et al* 2003; Дугић 2004б). Ако путања пак нема, онда је екран, у експерименту, место где се “доноси одлука” – што са своје стране захтева другачије моделовање од представљеног у раду. У том случају, како је већ речено, реч је о мерењима друге врсте: застор има активну улогу и дискутабилно је колико декохеренцијски прилаз може да осветли механизам њиховог одвијања. У сваком случају, овај други сценарио је тежи и за визуализацију – визуализацију физичких збивања између магнета и екрана.

У сврху ближег појашњења горе реченог, биће нам неопходни основни елементи теорије декохеренције. Теорија декохеренције (Joos *et al* 2003; Дугић 2004б) је квантна теорија која проучава квантне системе који су у непрекидном међуделовању са другим физичким системима који се називају окружењем. Такви неизоловани системи се називају **отвореним** системима, што значи да им је динамика одређена међуделовањем са окружењем а које се не може свести на спољашње поље (Дугић 2004б). Динамика отворених система се не покоравашредингерој једначини, тј. неунитарна је, али је општи закон њихове динамике непознат. Експлицитна је претпоставка да “систем+окружење”, тј. “ $S + E$ ” представљају изолован систем⁹, тј. на снази је претпоставка универзалног важења квантне механике.

Као последица тога, испоставило се, да подсистемима, било S , било E , нема смисла придруживати појам стања, уобичајен у квантној механици (d’Espagnat 1971; Herbut 1984; Дугић 2004б). Подсистему S (који је од интереса) се придружује редуковани статистички оператор $\hat{\rho}_S$ који је са формалне стране предмет проучавања теорије, тј. од интереса је његов “закон кретања”. Редуковани статистички оператор¹⁰ се добија на следећи начин:

$$\hat{\rho}_S = \text{tr}_E |\Psi\rangle_{S+E} \langle\Psi|, \quad (1.3)$$

где са десне стране tr_E представља узимање трага по степенима слободе окружења, а $|\Psi\rangle_{S+E}$ је вектор стања који је придружен композитном систему “ $S + E$ ”.

Сама теорија користи три метода у изучавању отвореног квантног система (и придруженог редукованог статистичког оператора $\hat{\rho}_S$): метод интеграције по путањама, формализам мастер једначина и метод унитарног оператора временске

⁹И притом се и S и E сматрају за квантне подсистеме.

¹⁰Математички гледано, овај оператор има исте особине као и статистички оператор који се користи у квантној механици изолованих система. Али, зато што не представља квантно стање, за њега је скован термин “мешавине друге врсте”, да би се разликовао од “мешавина прве врсте” које заиста репрезентују стања у квантној механици и последица су недовољног познавања стања система.

еволуције. Прва два метода су моделски зависна и неће бити даље од интереса за разлику од трећег: под моделском независношћу подразумевамо изостанак не-квантномеханичких параметара, тј. параметара који не могу бити изведени из квантне механике а последица су моделовања физичке ситуације.

Под термином “декохеренција” се у општем случају подразумевају сви могући утицаји окружења на систем, а у овом раду ће посебно бити од интереса дефиниција процеса декохеренције која извире из Зурекове теорије декохеренције (ЗТД) (Zurek 1982; Дугић 2004б), која за метод има метод унитарног оператора. Описивање унитарним оператором подразумева и постојање одговарајућег Хамилтонијана који у случају сложеног система “ $S + E$ ” гласи:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{S+E}, \quad (1.4)$$

где су \hat{H}_S и \hat{H}_E сопствени Хамилтонијани система и окружења, а последњи члан у (1.4) је интеракциони члан двочестичног типа (тј. делује и на простору стања система S и на простору стања система E).

ЗТД је заправо разрада фон Нојманове квантне теорије (von Neumann 1955) мерења¹¹, инспирисана мерењу сличним ситуацијама, али са амбицијом да објасни оно што се данас назива класичним лимитом квантне механике. Или језгровитије речено “прелазак са квантног на класично” (тј., у суштини, питање да ли се класична физика може дедуковати из закона квантне механике, али не у смислу $\hbar \rightarrow 0$ – семикласичне апроксимације (Дугић 2004б)) имплицирајући да је проблем мерења парадигма у том смислу.

Овде треба истаћи формалну сличност композитних система “ $O + A$ ” и “ $S + E$ ”: и у фон Нојмановој теорији је објекат мерења O отворени систем (по правилу микроскопски) као и S у Зурековој (по правилу макроскопски) с тим да се под S код Зурека подразумева сложени квантни систем “ $O + A$ ”, који дакле више није изолован као код фон Нојмана, већ напротив, отворен систем са окружењем E . То за последицу има преуређење израза (1.4) за Хамилтонијан:

$$\hat{H} = \hat{H}_O + \hat{H}_A + \hat{H}_E + \hat{H}_{O+A} + \hat{H}_{A+E}, \quad (1.5)$$

где су прва три члана сопствени Хамилтонијани објекта мерења, апарата и окружења респективно а последња два интеракциони чланови са очигледним значењем. Претпоставља се да је $\hat{H}_{O+E} \equiv 0$, односно да објекат мерења и окружење не интерагују директно¹² и да не постоји интеракција трочестичног типа, \hat{H}_{O+A+E} .

Окружење кроз интеракцију са апаратом обезбеђује стабилност (у времену) стања апарата која су квантно корелисана са стањима објекта мерења. Или,

¹¹Комплетности ради, треба поменути да та теорија почива на два претпоставкама:

1) Класични, макроскопски апарат A се бар у принципу може сматрати квантним системом и
2) За изоловану целину “ $O + A$ ” важи Шредингерова једначина.

¹²Различитост од нуле може да доведе до ситуације да апарат садржи информацију о стањима у којима је објекат мерења био, а у којима не мора да јесте након корелисања са окружењем.

другачије речено, кроз форму интеракционог Хамилтонијана \hat{H}_{A+E} , окружење дефинише тзв. **робусна стања** апарата, тј. она која су имуна на утицај окружења, што је потребно да корелације између апарата и објекта мерења буду сачуване. Узев у обзир да апарат сматрамо за квантни подсистем има смисла говорити о базису апарата (базис бројача¹³) при чему различивост мерних резултата повлачи за собом ортогоналност базисних елемената.

Треба имати у виду да је робусност стања апарата на трагу класичности отворених система (овде је то “ $O + A$ ” – макроскопски систем) са окружењем као могућим узроком за исказивање неких елемената класичне реалности (овде дакле робусност макроскопских стања насупрот нарушивости стања у квантној механици).

Услов робусности елемената базиса бројача система S се математички изражава као:

$$\hat{U}(t)|\chi_m\rangle_S \otimes |\epsilon\rangle_E = |\chi_m\rangle_S \otimes |\epsilon_m(t)\rangle_E, \quad (1.6)$$

где је $\hat{U}(t)$ унитарни оператор еволуције “ $S + E$ ” система (наравно, ово је еквивалентно са претходно реченим “робусност елемената базиса бројача апарата” јер се може писати $|\chi_m\rangle_S = \sum_p c_{mp}|\varphi_p\rangle_O \otimes |\Phi_p\rangle_A$).

Управо ово уочавање се може сматрати и као мотив за Зурекову дефиницију процеса декохеренције (Zurek 1982; Дугић 2004б): декохеренција је динамички процес (дакле, реалан процес са одређеним временом трајања – временом декохеренције τ_D) који се тиче простора стања отвореног квантног система и којим се као ефекат успостављају окружењем индукована, ефективна суперселекциона правила на простору стања отвореног система.

Такође, не треба изгубити из вида да је у овој поставци сложени систем “ $O+A+E$ ” у стању глобалне суперпозиције, а да се подсистему “ $O+A$ ” придружује редуковани статистички оператор $\hat{\rho}_{O+A}$, а то и јесте садржај суперселекционих правила: забрана суперпозиције стања која припадају различитим супреселекционим просторима. Међутим, редуковани статистички оператор, $\hat{\rho}_{O+A}$, не представља стање система и то је основни, принципијелни приговор који се може дати Зурековом решењу. Али, статистички (ансамбалски) гледано мешавине прве и друге врсте су за локалног обсервера **неразличиве**, што је и разлог зашто се мешавине друге врсте користе за описивање динамике отворених система.

Формално добијање редуковане матице густине, $\hat{\rho}_{O+A}$, подразумева ортогоналност базисних елемената $|\epsilon_i\rangle$ окружења, а то је и потврђено у многим моделима али као приближна, ефективна ортогоналност (Joos *et al* 2003):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \epsilon_i | \epsilon_j \rangle \approx \delta_{ij}, \quad (1.7)$$

где $t \rightarrow \infty$ у ствари значи време доста дуже од времена декохеренције.

¹³Енгл.: “pointer basis”.

На просторно-временским скалама на којима се дешавају практично сви експерименти у физици, одвијање процеса декохеренције се сматра ирверзибилним. Али, ако се има у виду изолованост (која повлачи реверзибилност) система “ $O + A + E$ ” може се очекивати и успостављање вандијагоналних елемената¹⁴ оператора $\hat{\rho}_{O+A}$, тј. повратак кохеренције (тзв. рекуренција) што је и предвиђено ЗТД – али као ретког стохастичког догађаја (Дугић 2004б).

Испоставља се да је одвијање процеса декохеренције условљено обликом интеракционог Хамилтонијана који треба да испуњава следеће услове (Дугић 2004б):

- Сепарабилност (што значи дијагонализабилност \hat{H}_{S+E} у некорелисаном базису укупног простора стања “ $S + E$ ”) и
- Ненарушавајући (non-demolition) карактер, $[\hat{H}_{S+E}(t), \hat{H}_{S+E}(t')] = 0$.

Горе наведени услови су **потребни**, али **не** и **довољни** за евентуално одвијање процеса декохеренције, у смислу да коначни закључак зависи од детаља модела физичког система. Али, ако је интеракциони Хамилтонијан несепарабилног типа – декохеренције нема.

На који физички систем у Штерн-Герлаховом експерименту се може гледати као на потенцијално окружење? Видели смо да је Бом увео центар масе атома као макроскопски апарат, а то искључује магнетно поље и екран као могуће апарате, односно динамичке подсистеме. Предлог о потенцијалном окружењу је дат у (Dugić 2004a). Наиме, ако је дефинисана координата центра масе атома, онда су истовремено дефинисане и координате релативних честица. То је обезбеђено, са формалне стране канонским трансформацијама координата положаја:

$$\vec{R}_{CM} = \sum_{i=1}^N m_i \vec{r}_i / \sum_{i=1}^N m_i \quad (1.8)$$

и

$$\vec{\rho}_{R\alpha} = \vec{r}_1 - \vec{r}_{\alpha+1}, \quad \alpha = 1, \dots, N-1, \quad (1.9)$$

где су m_i , \vec{r}_i масе и вектори положаја конституената атома, респективно. За довољно велико N систем релативне честице се може сматрати окружењем отвореног система центра масе. И управо је то и идеја: потражити окружење у самом атому кроз подсистем релативне честице R , дефинисан релативним координатама положаја. Будући дефинисано унутрашњим степенима слободе атома ово окружење носи назив “**унутрашње окружење**”. Називу унутрашње се додаје назив **мезоскопско**, јер N не прелази ред величине 10^2 .

¹⁴Овде се мисли на матричну репрезентацију редукованог статистичког оператора, $\hat{\rho}_{O+A}$, у базису бројача.

Повезујући ово са општим излагањем о основним појмовима теорије декохеренције, може се рећи да је систем релативне честице R **неопходан** за исказивање елемената класичне реалности система центра масе атома. Тај елемент класичне реалности би заправо биле класичне трајекторије које атомски центар масе следи у Штерн-Герлаховом експерименту.

Дилема о егзистенцији класичних трајекторија у Штерн-Герлаховом експерименту није само од интереса у теорији мерења и теорији декохеренције. И у применама квантне механике, какве су атомска нанофабрикација, атомска интерферометрија, молекулска интерферометрија, квантна информатика и рачунање, препознавање исправне физичке интерпретације Штерн-Герлаховог експеримента (да ли је то (1.1) или (1.2)) јесте од значаја.

Тако, у области атомске нанофабрикације се користе Еренфестове једначине (Meshede and Metcalf 2003) за прорачун динамике атома, што значи да је појам класичне путање имплицитно присутан. На тако малим просторним скалама, какве су нанометарске, битно је знати који ће степени слободе атома бити под утицајем одговарајућег спољашњег поља. Ако се у пракси не располаже прецизним знањем о томе “који се степен слободе гађа”, то може имати за последицу да се добијена наноструктура не поклапа са теоријски предвиђеном (жељеном). Везано за тему Рада, ако је наноконструкт базиран на постојању класичних путања атома, а путање објективно не постоје, то може довести до другачијег нанопозиционирања атома од оног који предвиђа прорачун базиран на Еренфестовим једначинама и класичним путањама.

Постојање класичних трајекторија је у колизији са интерферометријом, било атомском, молекулском или неутронском. За функционисање интерферометрије је, као што је познато, битно манипулисање релативним фазама у таласној функцији система (овде би то био израз (1.1)). Видимо да у запису стања (1.2) фазе нису присутне. Ако је стање (1.2) објективни опис физичке ситуације у Штерн-Герлаховом експерименту, онда се поставља питање како уопште интерферометрија функционише.

Питање егзистенције класичних путања атома (тј. $S + CM$ система) може бити од важности и за квантно рачунање. На стање $|\Psi\rangle_{S+CM}$ се може гледати као на пар кубитова (Oliveira and Caldeira 2006). Знање о томе да ли је Штерн-Герлахов експеримент описив релацијом (1.1) или (1.2) би давало неку смерницу у потрази за што физички реалистичнијим моделом кубита и квантног хардвера.

А будући да смо на терену стандардне квантне механике¹⁵, ово питање има смисла и када се разматра појединачни систем, атом (тј. елемент ансамбла, било квантног, било класичног): Да ли појединачни атом заиста следи класичну трајекторију или не?

Формулација у терминима појединачног система има значаја из разлога што

¹⁵Која подразумева да ако је ансамбал описан неким мешаним стањем онда је тим мешаним стањем описан и сваки елемент ансамбла – исти став важи и у случају чистог ансамбла, исказан кроз Постулат о појединачном систему (Herbut 1984).

се у атомској нанофабрикацији нпр., манипулише појединачним атомима, па разматрање егзистенције класичних путања атома као индивидуалних система може бити од важности за процедуре које се користе у нанотехнологији.

Мотив истраживања је очигледна противуречност: са једне стране Бомов математички модел по свим постулатима квантне механике и непостојање путања у смислу Њутновске физике, а са друге коришћење тог модела а опет изражавање у терминима класичних трајекторија атома.

Циљ истраживања је проучити могуће унутрашње окружење методом унитарног оператора. Колико је такво моделовање физички реално? Ако је унутрашње окружење ефикасно, онда би у духу теорије декохеренције било за очекивати репродукцију израза (1.2) и са формалне стране оправдање класичних трајекторија у Штерн-Герлаховом експерименту.

Да ли има последица, у зависности од исхода декохеренцијског моделовања, по основе квантне механике и њене примене?

2

Теорија Штерн-Герлаховог експеримента

Штерн-Герлахов експеримент је првобитно био замишљен као експеримент који ће показати да је магнетни момент $\vec{\mu}$ (који потиче од кретања електрона око језгра) просторно квантован. Семикласична разматрања дају везу између оператора магнетног момента и момента импулса:

$$\hat{\vec{\mu}} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \hat{L} \quad (2.1)$$

и потенцијалну енергију магнетног момента атома са координатом \vec{r} у спољашњем магнетном пољу \vec{B} :

$$V(\vec{r}) = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}(\vec{r}). \quad (2.2)$$

У изразу (2.1) μ_B је Боров магнетон и дат је релацијом $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$.

Експеримент је показао да је број трагова на екрану паран, а не непаран како се очекивало на основи својствених вредности за \hat{L}_z . Са циљем објашњења резултата експеримента уведена је хипотеза спина (Godsmit i Ulenbek 1925), који се описује као унутрашњи момент импулса квантне честице, са ознаком \hat{S} .

Испоставља се да се релација (2.1) може применити и у случају спина – мало модификована:

$$\hat{\vec{\mu}} = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar} \hat{S}, \quad (2.3)$$

где је g_s жиромагнетски фактор спина, за који се узима да важи $g_s \approx 2$. Узев у обзир везу са Паулијевим спинским оператором $\hat{\vec{\sigma}}$:

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}, \quad (2.4)$$

из (2.3) следи:

$$\hat{\mu} = \mu_B \hat{\sigma}. \quad (2.5)$$

Поред потенцијалне енергије, атом¹ поседује и кинетичку енергију, па Хамилтонијан гласи (Bohm 1951):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \mu_B \vec{B}(\hat{r}) \cdot \hat{\sigma}, \quad (2.6)$$

где су \hat{p} и \hat{r} импулс и координата атома, а m његова маса. Будући да је магнетно поље у експерименту изразито нехомогено, узима се да је облика $(0, 0, B(\hat{z}))$, односно само његова z компонента. Зато се израз (2.6) мења у следећи:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \mu_B B(\hat{z}) \cdot \hat{\sigma}_z, \quad (2.7)$$

при чему је $\hat{\sigma}_z$ z -пројекција опсервабле спина (референтна z -оса је одређена правцем магнетног поља). За $B(\hat{z})$ се обично ставља да је²:

$$B(\hat{z}) = B_0 + B' \hat{z}. \quad (2.8)$$

Формално посматрајући, атом може бити описан орбиталним (\hat{r}, \hat{p}) и спинским, $\hat{\sigma}$, степенима слободе, односно тензорским производом одговарајућих Хилбертових простора $\mathcal{H}_O \otimes \mathcal{H}_S$. Стога, пуна квантно-механичка верзија израза (2.7) гласи:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \otimes \hat{I}_S + \mu_B B(\hat{z}) \otimes \hat{\sigma}_z. \quad (2.9)$$

Овакав запис Хамилтонијана, занимљиво, стоји у позадини опречних интерпретација експеримента које се могу наћи у референцама у Уводу.

У оквиру Бомовог моделовања (Bohm 1951) Штерн-Герлаховог експеримента сматра се да је атомски центар масе довољно макроскопски за улогу апарата (у складу са фон Нојмановом теоријом квантних мерења) – апарата који даје информације о спину. Према томе, од интереса су опсервабле положаја и импулса центра масе атома, па Хамилтонијан (2.9) сада пишемо као:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_{CM}^2}{2m} \otimes \hat{I}_S + \mu_B B(\hat{z}_{CM}) \otimes \hat{\sigma}_z. \quad (2.10)$$

¹Није наодмет истаћи да су атоми у Штерн-Герлаховом експерименту такви да за њих важи $L = 0$ и $S = \frac{1}{2}$, односно сав момент импулса атома потиче од валентног електрона.

²Иако тако дефинисано поље не задовољава Мексвелову једначину $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ – ми овде чинимо једно упрошћење.

Магнетно поље има за функцију да куплује опсерваблу координате центра масе атома и z -пројекцију опсервабле спина, па отуда и сплетеност³ (која је основ за мерење (Дугић 2004б)), при чему је други члан у изразу (2.10) доминантан у области магнета, па се стање мења у складу са Шредингеровом једначином:

$$|\Psi(t)\rangle = \exp(-2\pi i t \mu_B B(\hat{z}_{CM}) \otimes \hat{\sigma}_z / \hbar) |\psi\rangle \otimes (C_1 |\uparrow\rangle_z + C_2 |\downarrow\rangle_z), \quad (2.11)$$

где $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_O$, а $|\psi\rangle \otimes (C_1 |\uparrow\rangle_z + C_2 |\downarrow\rangle_z)$ означава почетно некорелисано стање орбиталних и спинских степени слободе. При томе, t је време које атом проведе у магнетном пољу. Последица ове временске еволуције јесте настајање сплетеног стања (Bohm 1951; Дугић 2004б):

$$|\Psi\rangle_{S+CM} = C_1 |-\rangle_{CM} |\uparrow\rangle_z + C_2 |+\rangle_{CM} |\downarrow\rangle_z, \quad (2.12)$$

где су $|\uparrow\rangle_z, |\downarrow\rangle_z$ својствена стања z -пројекције опсервабле спина $\hat{\sigma}_z$, а $|\pm\rangle_{CM}$ су таласни пакети који описују кретање центра масе атома (тачније, реч је о тзв. “минималним таласним пакетима” који задовољавају $\Delta \hat{z} \cdot \Delta \hat{p}_z = \hbar$) и за које се може показати да важи ${}_{CM}\langle + | - \rangle_{CM} \approx 0$, (Дугић 2004б).

Како је речено у Уводу, најчешће коришћена интерпретација (Бор, Паули, Мот) је да се орбитални степени слободе атома могу третирати класично. У Штерн-Герлаховом експерименту ти степени слободе су представљени таласним пакетом⁴ – таласни пакети следе класичне трајекторије и стање $S + CM$ система се може записати као:

$$\hat{\rho}_{S+CM} = |C_1|^2 |+\rangle_{CM} \langle + | \otimes |\downarrow\rangle_z \langle \downarrow | + |C_2|^2 |-\rangle_{CM} \langle - | \otimes |\uparrow\rangle_z \langle \uparrow |. \quad (2.13)$$

Ово схватање је остало поприлично раширено у литератури, (в. Увод), јер у доброј мери делује плаузабилно. Али, не може се занемарити ни релација (2.12), јер она следи на основу етаблираних постулата квантне механике. Негирати стање (2.12) значи одбацити а ргіогі неки од постулата квантне механике – постулата који су верификовани кроз многобројне експерименте или пак увести нови модел.

Бомово моделовање, (2.10), нити одбацује мешано стање нити га прихвата. Не прихвата у смислу да је стање (2.12) оно које карактерише композитни систем $S + CM$. Заправо, Бом стање (2.12) записује као (Bohm 1951):

$$|\Psi\rangle_{S+CM} = C_1 \exp(i\alpha_-) |-\rangle_{CM} |\uparrow\rangle_z + C_2 \exp(i\alpha_+) |+\rangle_{CM} |\downarrow\rangle_z, \quad (2.14)$$

³Енгл.: entanglement.

⁴Из аналогије једначине кретања за мешано стање $i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$ са Лиувилевом једначином $\frac{df}{dt} = [H, f]_{PB}$, која описује кретање физичког система у фазном простору преко функције расподеле f , постаје јаснија веза мешано стање – класичне трајекторије.

где су α_{\pm} фазе које се тичу својствених вредности опсервабле апарата CM и представљају динамичке величине. По Бому, стање које се добија узимањем трага (интеграљењем по фазама) по стањима апарата:

$$\hat{\rho}_S = |C_1|^2 |\uparrow\rangle_z \langle\uparrow| + |C_2|^2 |\downarrow\rangle_z \langle\downarrow|, \quad (2.15)$$

поседује класичну реалност. Будући да се у (Bohm 1951) анализа ослања на Копенхагенску школу квантне механике, мерни апарат CM је класичне природе, корелације између објекта мерења S и апарата CM (тј. између одговарајућих опсервабли) су такође класичне, па Бом изводи закључак да је познавање (2.15) довољно да кроз те корелације обезбеди и познавање вредности опсервабле положаја CM атома.

Стања (2.12) и (2.13) носе са собом међусобно различита физичка значења.⁵ Чисто стање сложеног система подразумева постојање квантне несепарабилности (квантне корелације) и квантне нелокалности, док је мешано стање одговарајући запис класичног (Гибсовог) ансамбла и подразумева постојање класичних корелација. Несепарабилност значи да док је сложеном систему “ $S + CM$ ” придружено стање (са вероватноћом мањом или једнаком 1), дотле подсистема S и CM немају своја стања а ригорі. Мерењем (на овом месту је неважно како се то мерење може извести) на неком од подсистема се успоставља стање целине, “ $S + CM$ ”, било као $|-\rangle_{CM} |\uparrow\rangle_z$, било $|+\rangle_{CM} |\downarrow\rangle_z$.⁶ Тиме су **истовремено** одређена стања оба подсистема, а то значи да квантна несепарабилност има особину нелокалности – физичко растојање међу подсистемима не игра улогу у успостављању претходно наведених стања.

Али, чисто и мешано стање које се тичу композитног система “ $S + CM$ ” се не могу разликовати када је у питању **опис на подсистему**. То значи да редуковани статистички оператор, који се тиче нпр. подсистема CM ⁷, има исту форму било да је изведен из $\hat{\rho}_{S+CM}$, било из $|\Psi\rangle_{S+CM}$ стања, тј. важи:

$$\hat{\rho}_{CM} = tr_S \hat{\rho}_{S+CM} = tr_S |\Psi\rangle_{S+CM} \langle\Psi| = |C_1|^2 |+\rangle_{CM} \langle+| + |C_2|^2 |-\rangle_{CM} \langle-|, \quad (2.16)$$

с тим да горње $\hat{\rho}_{CM}$ није стање подсистема CM , већ само погодан математички запис. Формално, то се записује као:

$$\hat{\rho}_{S+CM} \neq |\Psi\rangle_{S+CM} \langle\Psi| \neq \hat{\rho}_{CM} \otimes \hat{\rho}_S, \quad (2.17)$$

што значи да и мешани ансамбл $\hat{\rho}_{S+CM}$ и чисти ансамбл $|\Psi\rangle_{S+CM}$ носе квантне корелације подсистема S и CM . Претходно је речено да мешани ансамбл $\hat{\rho}_{S+CM}$ носи

⁵И по аналогији са славним Јанговим експериментом: стање (2.12) има интерференционе чланове, док у (2.13) тога нема.

⁶Реч је заправо о редукацији чистог стања, в. даље текст.

⁷Аналогно важи и за S подсистем.

класичне корелације: то овде значи да појединачни парови подсистема “ $S + CM$ ” имају одређена стања, али са одговарајућим вероватноћама, док појединачни подсистеми и даље немају одређена стања. Подсистемска матрица густине $\hat{\rho}_{CM}$ је управо изабрана да се покаже зашто вреди испитивати концепт класичне трајекторије у овом експерименту. Два стања, $\hat{\rho}_{S+CM}$ и $\hat{\rho}_{CM} \otimes \hat{\rho}_S$, са различитим физичким значењима, у односу на подсистемско мерење дају **исту предикцију** – да CM систем следи једну трајекторију са вероватноћом $|C_1|^2$ а другу са вероватноћом $|C_2|^2$, што одређује и начин на који је спин измерен.

Док су за подсистемска мерења $|\Psi\rangle_{S+CM}$ и $\hat{\rho}_{S+CM}$ неразличиви, постоје мерења која (теоријски бар) могу да разликују стања (2.12) и (2.13). Реч је о тзв. двоструко-некомпатибилним, симултаним, предиктивним (надсистемским) меренјима (Дугић 2004б). Овакво мерење би се могло постићи мерењем композитне опсервабле, нпр. $\hat{p}_{CM} \otimes \hat{S}_x$ на $S + CM$ систему. То значи да је испуњен услов некомутирања са композитном опсерваблом у чијем својственом базису су записана стања (2.12) и (2.13):

$$[\hat{z}_{CM} \otimes \hat{S}_z, \hat{p}_{CM} \otimes \hat{S}_x] \neq 0. \quad (2.18)$$

Међутим, таква мерења су тешко изводива у пракси. Ако би та мерења и могла бити изведена, треба имати у виду да су горњи записи чистог и мешаног стања, (2.12) и (2.13), идеализације реалног стања (какво год оно било) којим је описан ансамбл атома у међупростору између магнета и екрана, јер је временска зависност које фигурише у једнакости (2.11) занемарена надаље – изрази (2.12) и (2.13), дакле, представљају идеализацију. Све ово значи да је тешко експериментално утврдити са којим стањем имамо посла: да ли је (2.12) или (2.13), или је пак у питању некакав њихов “хибрид”.

У досадашњој слици је важно поновити да је атом као целина изолован систем, а да је магнетно поље – класично спољашње поље, па се самим тим очекује да се динамика система све време описује Шредингеровом једначином. Како је (2.12) последица унитарне еволуције коју генерише Хамилтонијан (2.10) а сматра се да се реално збивање у експерименту може протумачити у терминима мешавине (2.13), може се претпостављати да у простору између магнета и екрана наступа редукција у смислу фон Нојмана (von Neumann 1955), односно процес који је одговоран за прелаз стања (2.12) у (2.13). Прелаз о коме је реч се може записати као:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{S+CM} &= C_1 |-\rangle_{CM} |\uparrow\rangle_z + C_2 |+\rangle_{CM} |\downarrow\rangle_z \longrightarrow \\ &\longrightarrow \hat{\rho}_{S+CM} = |C_1|^2 |+\rangle_{CM} \langle +| \otimes |\downarrow\rangle_z \langle \downarrow| + |C_2|^2 |-\rangle_{CM} \langle -| \otimes |\uparrow\rangle_z \langle \uparrow|, \end{aligned} \quad (2.19)$$

чистог у мешано стање, што је синоним процеса мерења у фон Нојмановој теорији. А ово сигурно не спада у унитарну еволуцију (која је еквивалент важења Шредингерове једначине) а овде као последица изолованости физичког система, тј. атома. Где наступа редукција у експерименту је основно питање које се сада

поставља. Ово питање има смисла јер редукција може наступити на два места: или испред екрана или на екрану. Остварење првог сценарија управо значи да класичне трајекторије постоје, и да се прелаз (2.19) одиграва у простору између магнета и застора. Друга могућност, пак, значи да се редукција одвија на екрану, што придружује активну улогу екрану у експерименту. Или речником теорије мерења: у првом случају редукција се тиче квантног мерења прве врсте (предиктивно, поновљиво мерење) док у другом се тиче квантног мерења друге врсте (непоновљиво мерење). Чињеница је да су квантна мерења друге врсте тешко приступачна за теоријску елаборацију, па се испитавање сценарија да ли је стање (2.13) валидно за опис Штерн-Герлаховог експеримента чини лакшим задатком.

Будући да фон Нојманова квантна теорија мерења сама по себи не објашњава процес редукције, већ га уводи *ad hoc*, намеће се питање да ли има простора за реинтерпретацију Штерн-Герлаховог експеримента.

У светлу претходно реченог, теорија декохеренције у начелу нуди могућност за реинтерпретацију, што је квалитативно показано у (Dugić 2004a). Поменути предлог се заснива на опажању да је у Бомовом моделовању (Bohm 1951; Dugić 2004a; Дугић 2004б) прећутно изостављена **опсервабла положаја** релативне честице, тамо као непотребна.

О атомима се уобичајено размишља као о сложеним системима састављеним од електрона, протона и неутрона, иако се експериментално као такви не опажају. Оно чиме се експериментално (или боље рећи ефективно) барата је центар масе атома и релативна честица. И у Штерн-Герлаховом експерименту је, сматра се, то случај: екран бележи место упада атома као целине, односно његовог центра масе.

С друге стране, добро познате линеарне канонске трансформације, где су \hat{r}_i -ови опсервабле положаја атомских конституената, а N њихов укупан број:

$$\hat{R}_{CM} = \sum_{i=1}^N m_i \hat{r}_i / \sum_{i=1}^N m_i \quad (2.20)$$

и

$$\hat{p}_{R\alpha} = \hat{r}_1 - \hat{r}_{\alpha+1} \quad (2.21)$$

дају са математичке тачке гледишта опсервабле положаја центра масе атома (CM) и “релативне честице” (R). То пружа и формално оправдање за предлог релативних честица као окружења за центар масе атома који онда може да има улогу апарата. Иначе, како је добро познато из атомске физике, примена (2.20) и (2.21) је стандардна процедура при решавању проблема водониковог атома. Тако се са декомпозиције атома “електрон+протон” прелази на декомпозицију “центар масе атома+релативна честица”, што на концу омогућава сепарацију варијабли и решавање својственог проблема релативне честице.

Из (2.21) и (2.22) се лако добија **инверзна** трансформација:

$$\hat{r}_i = \hat{R}_{CM} + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \omega_{\alpha i} \hat{\rho}_{R\alpha}, \quad (2.22)$$

при чему су $\omega_{\alpha i}$ константе које зависе од односа маса честица конституената и укупне масе система. Вероватно је очигледно, али није наодмет напоменути, да се ове трансформације тичу **орбиталног дела**, \mathcal{H}_O , простора стања атома: **укупни простор** стања се може представити као $\mathcal{H} = \mathcal{H}_O \otimes \mathcal{H}_S$, тј. као тензорски производ **орбиталног** и **спинског** фактор простора стања, редом.

Уопштено говорећи, Хамилонијан који, у начелу, описује купловање орбиталних (O) и спинских (S) степени слободе у систему гласи:

$$\hat{H} = \hat{H}_O \otimes \hat{I}_S + \hat{I}_O \otimes \hat{H}_S + \hat{H}_{S+O}, \quad (2.23)$$

са очигледним ознакама. У нерелативистичкој квантној механици спину самом по себи се не приписује енергија па је стога уобичајено да се члан \hat{H}_S изоставља. Што се тиче члана \hat{H}_{O+S} он обухвата и спин-спин и спин-орбит интеракције које ћемо ради једноставности моделовања занемарити, узимајући у разматрање само $\hat{H}_{S+O} \equiv \hat{H}_{S+CM} = \mu_B B(\hat{z}_{CM}) \otimes \hat{\sigma}_z$ из стандардног моделовања Штерн-Герлаховог експеримента, (2.10).

Узимањем у обзир систем “релативне честице”, R , може се применити општа схема теорије декохеренције: објекат мерења (O)+апарат(A)+окружење(E) и то у смислу да је објекат мерења спин атома (S), апарат је центар масе атома (CM) а окружење апарата је релативна честица (R). Без присуства система R , систем CM не може бити класични апарат у смислу фон Нојманове теорије. За овај предлог је предвиђена и експериментална провера (Dugić 2004a), базирана на аналогiji са експериментима у вези неутронске интерферометрије а са циљем верификације (не)важења Белове неједнакости – у верзији у којој, дакле, атоми замењују неутроне.

Дакле, у (Dugić 2004a) је реч о **минималном проширењу Бомовог модела**, укључивањем степени слободе релативних честица у динамику атома, што би могло да баца ново светло на горе изнете дилеме ⁸.

Важно је још једном подвући да у стандардној интерпретацији $S + CM$ систем, тј. атом, представља изолован систем, док у декохеренцијском приступу то више није – $S + CM$ је **отворен систем**, са окружењем R . Динамика $S + CM$ система се не покорава Шредингеровој једначини, тј. еволуција није унитарног карактера. Штавише, општи закон који описује динамику отворених система и није познат. То је уједно и специфичност декохеренцијског моделовања: атом као сложени систем је изолован, што значи да процес декохеренције у овом случају **не захтева отвореност система као целине** већ само неких степени слободе – овде су то степени слободе центра масе атома.

⁸ Ако је, рецимо, Бор-Паули-Мот интерпретација тачна, за очекивати је да је теорија декохеренције и потврди.

Хамилтонијан који одговара овом приступу би требало да, квалитативно, гласи:

$$\hat{H} = \hat{H}_{CM} + \hat{H}_R + \hat{H}_{CM+S}, \quad (2.24)$$

где су прва два члана сопствени Хамилтонијани центра масе атома и његовог унутрашњег окружења респективно, а $\hat{H}_{CM+S} \equiv \mu_B B(\hat{z}_{CM}) \otimes \hat{\sigma}_z$ и из чега се види да је атом овде декомпонован на $S + CM + R$ подсистеме. Будући да ни магнет, нити магнетно поље не играју улогу динамичких система (тј. не трпе промене стања током експеримента) јасно је да они не могу да буду “апарат”⁹ који обезбеђује мерење спина. У понуђеној декомпозицији атома **једино R подсистем може да игра такву улогу**. Увођењем интеракције \hat{H}_{CM+R} обезбеђена је “спољашња акција” на апарат CM што уједно ствара услове за исказивање класичне реалности опсервабли центра масе (овде би то биле класичне трајекторије) атома у експерименту.

Тако укупни Хамилтонијан добија следећу форму:

$$\hat{H} = \hat{H}_{CM} + \hat{H}_R + \hat{H}_{CM+S} + \hat{H}_{CM+R}, \quad (2.25)$$

а члан \hat{H}_{CM+R} представља ефективну интеракцију **потребну** да би процес декохеренције могао да се одигра – степени слободе центра масе су они за које се очекује да декохерирају и носе класичну информацију¹⁰ о путањама атома, а самим тим и о спину атома.

Дакле, по програму теорије декохеренције (Дугић 2004б) потребно је модловати интеракцију \hat{H}_{CM+R} , која је потребна да би декохеренцијско проширење модела омогућило репродукцију израза за мешано стање, $\hat{\rho}_{S+CM}$. Поред овога, због малости окружења R , пожељно би било наћи време декохеренције, односно рекуренције. С друге стране, пошто математичка конзистентност моделовања није унапред гаранција успешности модела, резултате треба упоредити са експерименталним подацима, да би се видело да ли је пак декохеренцијски модел физички реалан.

Међутим, пре изналажења интеракције неопходно је проанализирати унутрашњу динамику атома у оквиру $S + CM + R$ декомпозиције, да би се видело колико је таква једна декомпозиција физички плаузабилна. А то је управо садржај следећег поглавља.

⁹ Апарат је овде стављен под знаке навода јер се не мисли на апарат из фон Нојманове теорије мерења. Тамошњи апарат чини са објектом мерења изоловани систем, док апарат на који се тренутно мисли представља акцију споља у односу на тај изоловани систем.

¹⁰ Термин “класична информација” значи да је стање система $S + CM$ одређено неким стањем из скупа $\{|C_i|^2, |\pm\rangle_{CM} | \uparrow \downarrow \rangle_z\}$ и да стање $|+\rangle_{CM} | \downarrow \rangle_z$ или $|-\rangle_{CM} | \uparrow \rangle_z$ носи максимум информација које се могу имати о композитној опсервабли $\hat{z}_{CM} \otimes \hat{S}_z$. Штавише, претходни скуп носи мањак класичних информација, јер се говори у терминима вероватноће, али то је класична неодређеност, особина свих мешаних стања у квантној механици, па и (2.13).

3

Подсистеми атома и њихова динамика

Сложеним микросистемима (тј. тумачењу њихове унутрашње структуре) као што су атоми, молекули увек се може приступати из више праваца, формално-математички гледано. Као најпростији пример узмимо бипартитни систем $C = A+B$ и претпоставимо да неким линеарним инвертибилним пресликавањем (трансформацијом)¹ f можемо дати систем декомпоновати као $C = D + E$. Декомпоновање се, у принципу, не мора завршавати овде. Декомпозиција може бити, у принципу, безброј, што све зависи од трансформације f и од почетне структуре на коју она “делује”, при чему су све декомпозиције равноправне. Шта ће природа одабрати (и зашто) као актуелну конфигурацију система је питање на самом фронту физике данас, посебно теорије декохеренције (Zurek 1982; Zurek 1993; Dugić and Jeknić 2006; Dugić and Jeknić-Dugić 2008). У наставку ће посебно од интереса бити неке декомпозиције атома.

3.1 Атомски центар масе

Када се говори о унутрашњој структури атома, обично се мисли на декомпоновање атома на електронски омотач и језгро, у коме су смештени протони и неутрони. У том случају Хамилтонијан слободног атома, ван спољашњих поља гласи (узимајући у обзир и Кулонову и нуклеарну интеракцију између атомских партикула; A, Z су масени и атомски број, респективно):

$$\hat{H}' = \sum_{i=1}^Z \hat{T}_{ei} + \sum_{j=1}^Z \hat{T}_{pj} + \sum_{k=1}^{A-Z} \hat{T}_{nk} + \hat{V}_{Coul}^{ee} + \hat{V}_{Coul}^{ep} + \hat{V}_{Coul}^{pp} + \hat{V}_{nucl}, \quad (3.1)$$

где су \hat{T}_{ei} , \hat{T}_{pj} , \hat{T}_{nk} кинетичке енергије електрона, протона и неутрона редом, \hat{V}_{Coul}

¹Које нужно мора бити линеарно и инвертибилно да би било могуће по потреби вратити се на полазни систем.

Кулонова интеракција парова честица (електронско-електронска, електронско-протонска и протонско-протонска) док \hat{V}_{nucl} означава нуклеарну интеракцију између честица у језгру и може се описати рецимо тзв. Јукавиним потенцијалом за пар (n, n') нуклеона:

$$\hat{V}_{nucl}^{nn'} \equiv -\gamma^2 \frac{\exp(-\mu|\hat{r}_n - \hat{r}_{n'}|)}{|\hat{r}_n - \hat{r}_{n'}|}, \quad (3.2)$$

(γ је константа, а $r = \frac{1}{\mu}$ је домет нуклеарних сила). Дакле, све интеракције у атому, без обзира на порекло, **зависе само од растојања између честица**, односно дате су као функције $\mathcal{F}(|\hat{r}_n - \hat{r}_m|)$.

Као резултат примене трансформације (2.22) на (3.1), а узев у обзир (2.23), добија се (Додатак А):

$$\hat{H} = \hat{H}_{CM} + \hat{H}_R + \hat{H}_{S+CM}, \quad (3.3)$$

где је $\hat{H}_{CM} = \frac{\hat{p}_{CM}^2}{2M}$ (кинетичка енергија центра масе атома, M је целокупна маса атома), $\hat{H}_R = \sum_{\alpha=1}^{A+Z-1} \hat{T}_{R\alpha} + \sum_{\eta=1}^{A+Z-1} \sum_{\nu=1}^{A+Z-1} \hat{M}_{\eta\nu}^{(R)} + V(|\hat{p}_{R\alpha}|)$ (сопствени Хамилтонијан система релативне честице) а $\hat{H}_{S+CM} \equiv \mu_B B(\hat{z}_{CM}) \otimes \hat{\sigma}_z$. Дакле, (3.3) је Хамилтонијан који описује атом након увођења **центра масе атома** и релативне честице а сада у рефакторизованом простору стања $\mathcal{H}_O \otimes \mathcal{H}_S = \mathcal{H}_{CM} \otimes \mathcal{H}_R \otimes \mathcal{H}_S$.

Оно што се одмах уочава у (3.3) је непостојање члана \hat{H}_{CM+R} за који је речено да је неопходан да би се процес декохеренције евентуално одвијао. Унитарни оператор временске еволуције, генерисан горњим Хамилтонијаном, гласи:

$$\hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right) \cong \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t(\hat{I}_S \otimes \hat{H}_{CM} \otimes \hat{I}_R + \hat{H}_{S+CM} \otimes \hat{I}_R)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t(\hat{I}_S \otimes \hat{I}_{CM} \otimes \hat{H}_R)\right). \quad (3.4)$$

Претпоставићемо да је почетно стање система $S + CM + R$ некорелисано:

$$|\psi\rangle_{CM}|0\rangle_R(C_1|\uparrow\rangle_{S_z} + C_2|\downarrow\rangle_{S_z}). \quad (3.5)$$

Из претходног излагања сви фактори сепарабилног стања (3.5) су познати, сем стања $|0\rangle_R$ које представља основно стање система релативне честице R . Будући да нема сплитања CM и R система, резултат деловања (3.4) на (3.5) се може записати као:

$$|\Psi\rangle_{S+CM}|\tilde{0}\rangle_R, \quad (3.6)$$

где је $|\Psi\rangle_{S+CM}$ чисто стање (2.12) а $|\tilde{0}\rangle_R = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_R\right)|0\rangle_R$.

Узимањем трага по степенима слободe окружења R , сасвим једноставно се добија сплетено стање (2.12):

$$\begin{aligned}
tr|\Psi\rangle_{S+CM}\langle\Psi|\otimes|\tilde{0}\rangle_R\langle\tilde{0}| &= \\
&= {}_R\langle\tilde{0}|\Psi\rangle_{S+CM}\langle\Psi|\tilde{0}\rangle_R\otimes{}_R\langle\tilde{0}|\tilde{0}\rangle_R + \\
&+ {}_R\langle\tilde{1}|\Psi\rangle_{S+CM}\langle\Psi|\tilde{0}\rangle_R\otimes{}_R\langle\tilde{0}|\tilde{1}\rangle_R = \\
&= |\Psi\rangle_{S+CM}\langle\Psi|\otimes{}_R\langle\tilde{0}|\tilde{0}\rangle_R\langle\tilde{0}|\tilde{0}\rangle_R = \\
&= |\Psi\rangle_{S+CM}\langle\Psi|, \tag{3.7}
\end{aligned}$$

где је искоришћена чињеница да је операција трага базис инваријантна, па је за базис узет $\{|\tilde{0}\rangle_R, |\tilde{1}\rangle_R\}$ из простора стања R подсистема.

Егзактна декуплованост CM подсистема од R подсистема нам говори о томе да R није окружење за атомски центар масе – CM је изолован од R те не може бити декохеренције, па према томе ни класичних трајекторија. Систем $S + CM$ све време остаје у стању (2.12), који описује чисти ансамбл између магнета и застора. Ово уједно сугерише да центар масе атома као апарат није погодан избор – бар када се иде трагом Бомовог модела и општих поставки декохеренције, јер не омогућава налажење интеракције између CM и R подсистема, ни у принципу, што искључује предлог у (Dugić 2004a).

3.2 Језгрени центар масе

Декомпозиција атома на атомски центар масе (CM) и релативну честицу (R) није једина могућност када је о декомпоновању атома на подсистеме реч. Добро је познато да је 99,99% масе атома смештено у језгру и да је тешко експериментално разликовати CM језгра од CM комплетног атома. Због тога, може се усвојити други приступ у редефинисању атомског система који се састоји у томе да канонска трансформација (2.22) буде примењена на језгро, а да координате електрона остану нетакнуте. Овакав приступ трансформише израз (3.1), односно (2.23) у следећи Хамилтонијан (Додатак А):

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{CM} + \hat{H}_R + \hat{H}_{CM+S} + \hat{H}_{e+CM+R}, \tag{3.8}$$

који описује атом након увођења **центра масе језгра** и релативне честице језгра, при чему је простор стања сада описан као $\mathcal{H}_E \otimes \mathcal{H}_{CM} \otimes \mathcal{H}_R \otimes \mathcal{H}_S$ (ради краткоће записа подразумевамо $CM_{\mathcal{N}} \equiv CM$ и $R_{\mathcal{N}} \equiv R$, јер ћемо надаље имати у виду само овај случај). У изразу (3.8), $\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{Coul}^{ee}$ (кинетичка енергија електрона+Кулонова интеракција међу електронима), $\hat{H}_{CM} + \hat{H}_R$ је формално исто са члановима у (3.3), док се последњи члан трансформише у:

$$\hat{V}_{Coul}^{ep} \equiv \hat{H}_{e+CM+R} = k \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z \frac{1}{|\hat{r}_{ei} - \hat{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha j} \hat{p}_{R\alpha}|}, \quad (3.9)$$

имајући у виду релацију (2.22).

С обзиром на виртуелну неразличивост атомског од језгреног центра масе, (3.8) се чини као добра алтернатива, под условом да се знађе начин да се трочестична интеракција \hat{H}_{e+CM+R} редукује на двочестичну – \hat{H}_{CM+R} , у складу са захтевом програма теорије декохеренције.

Хамилтонијан (3.8) је по својој структури на “пола пута” између атомске физике и нуклеарне физике и проучавање његове динамике је тим већи изазов. У атомској физици језгро је тачкасто – практично је сведено на свој центар масе и нема структуру. То је у случају када координате релативне честице ишчезавају и (3.8) прелази у:

$$\hat{H}_A = \hat{H}_E + \hat{H}_{CM} + \hat{H}_{e+CM}, \quad (3.10)$$

где је $\hat{H}_{e+CM} = \sum_{i=1}^Z \frac{kZ}{|\hat{r}_{ei} - \hat{R}_{CM}|}$. У нуклеарној физици, пак, по правилу нема електрона у експлицитном облику, занемарује се Кулонова интеракција између протона и електрона и сплетеност која из ње следи. Одговарајући лимес Хамилтонијана (3.8), добијен усредњавањем по стањима електронског подсистема гласи (в. ниже):

$$\hat{H}_N \cong \hat{H}_{CM} + \hat{H}_R + \hat{H}_{CM+R}, \quad (3.11)$$

И поред ове симплификације, динамика нуклеона у језгру је и даље у приличној мери непозната. Будући да аналитички облик нуклеарне интеракције није познат, често је у употреби колективни модел језгра који даје увид у скупно понашање нуклеона (на уштрб информација о појединачним нуклеонима) и где се уводе колективне опсервабле каква је нпр. опсервабла центра масе језгра (Pierls and Yoccoz 1957).

Значај колективног модела језгра за теорију декохеренције је натукнут у (Zeh 2005), али у неразрађеној форми, где аутор истиче да се током теоријске анализе везе између колективних степени слободе и степени слободе појединачних нуклеона јављају примери квантне сплетености, али тамо описаних и тумачених преко класичних корелација. Један пример такве везе између колективних и појединачних степени слободе у језгру би могла да буде управо интеракција \hat{H}_{CM+R} . То даје мотив за тражење могуће сплетености CM и R подсистема, сплетености која је нужна ако желимо да испитамо да ли подсистем релативних честица може бити унутрашње окружење у атому.

3.2.1 Елементи адијабатске апроксимације

Примена канонских трансформација само на језгро како је горе описано, израз (3.8), издваја електронски систем E у односу на CM и R . Ако се још узме у обзир да је E систем много мање масе од масе $CM+R$ система, отвара се питање шта би употреба адијабатске апроксимације у анализи (3.9) и његових последица могла дати. Адијабатска апроксимација је иначе уобичајен начин апроксимативног третирања динамике у сложеним системима као што су молекули (Messiah 1976; Atkins and Friedman 2005).

Адијабатско третирање динамике **молекула** је засновано на семикласичном уочавању да су језгра спора у односу на електроне. За електроне, кретање језгара даје споро променљиво поље, којем се електрони адијабатски (тренутно) прилагођавају. За језгра, електрони су много брзи, па се језгра крећу у усредњеном пољу, које зависи од стања електрона – формално слично са (3.11).

Одговарајући молекуларни Хамилтонијан је заправо (3.1)², с тим да тренутно узимамо у обзир само Кулонову интеракцију међу конституентима молекула:

$$\hat{H}_{mol} = \hat{H}_E + \hat{T}_N + \hat{V}_{NN}^{Coul}, \quad (3.12)$$

где је $\hat{H}_E = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee}^{Coul} + \hat{V}_{eN}^{Coul}$ (збир кинетичких енергија електрона, електронско-електронске Кулонове интеракције и Кулонове интеракције електрона и језгара), \hat{T}_N је збир кинетичких енергија свих језгара а \hat{V}_{NN}^{Coul} представља Кулонову интеракцију између језгара.

Временски независна Шредингерова једначина за укупни систем (молекул) гласи:

$$\hat{H}_{mol}\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R}), \quad (3.13)$$

при чему се \vec{r} и \vec{R} односе на координате електронског (E) и језгреног (J) подсистема, респективно. Једначина (3.13) указује на сплетеност електронског и језгреног подсистема и практично је нерешива аналитички.

Будући да се за електроне језгрени подсистем мења врло споро (практично је “замрзнут”, $\hat{T}_N = \hat{0}$), за електроне се координате језгара појављују као **параметри**, па ће одговарајућа својствена једначина за електронски подсистем гласити:

$$(\hat{T}_e + \hat{V}_{eN}^{Coul} + \hat{V}_{ee}^{Coul})\chi_{e_i}(\vec{r}; \vec{R}) = E_{e_i}\chi_{e_i}(\vec{r}; \vec{R}). \quad (3.14)$$

²Ово стога што су молекули и атоми неразличиви са гледишта Хамилтоновог формализма ако се има у виду декомпозиција на електроне+протоне+неутроне. Разлику уносе: већи број језгара, те гранични услови.

Радна је претпоставка да су решења за својствену једначину (3.14) позната (добијена неком апроксимативном методом). У адијабатској апроксимацији се, даље, претпоставља да је i добар квантни број, и да се својствени вектори молекуларног Хамилтонијана могу добити као линеарне комбинације својствених вектора (3.14) $|i \vec{r}; \vec{R}\rangle$, за одређени квантни број i :

$$\int |i \vec{r}; \vec{R}\rangle \varphi_{i\nu}(\vec{R}) d\vec{R}, \quad (3.15)$$

или у координатној репрезентацији:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) \approx \chi_{e_i}(\vec{r}; \vec{R}) \varphi_{i\nu}(\vec{R}), \quad (3.16)$$

односно да се стање молекула може представити као приближно сепарабилно.

Због (3.14) и (3.16), својствена једначина за цео молекул се може записати као:

$$(\hat{T}_N + \hat{V}_{NN}^{Coul} + E_{e_i}(\vec{R})) \chi_{e_i}(\vec{r}; \vec{R}) \varphi_{i\nu}(\vec{R}) = E \chi_{e_i}(\vec{r}; \vec{R}) \varphi_{i\nu}(\vec{R}). \quad (3.17)$$

Множењем последње једначине са $\chi_{e_j}^*(\vec{r}; \vec{R})$ и коришћењем чињенице да решења једначине (3.14) образују комплетан скуп, после интеграције по електронским координатама следи³:

$$(\hat{T}_N + \hat{V}_{NN}^{Coul} + E_{e_i}(\vec{R})) \varphi_{i\nu}(\vec{R}) = E \varphi_{i\nu}(\vec{R}), \quad (3.18)$$

што је Шредингерова једначина за језгени подсистем.

Горе описаном процедуром је постигнуто да је решавање полазне једначине (3.13) сведено на решавање две, једноставније: (3.14) и (3.18). Грешка која се прави коришћењем приближног стања (3.16) је реда величине $\kappa^{3/4}$ где је

$$\kappa = \frac{m_e}{M_N} \frac{E_N}{E_e}, \quad (3.19)$$

тзв. адијабатски параметар. Да би за дати физички систем адијабатска апроксимација била валидна треба да важи $\kappa \ll 1$ (што је у случају молекула испуњено).

Примена адијабатске анализе у оквиру $E + CM + R$ декомпозиције атома је zgodна (и упутна) из два разлога:

- Динамика E , CM , R подсистема је, како је већ речено, хибридног карактера: носи у себи елементе и атомске и нуклеарне физике. Због сложености проблема потребно је изнаћи начин да се нешто каже о подсистемској динамици, приближно макар.

³При прелазу са (3.17) на (3.18) занемарују се не-адијабатски чланови који настају купловањем електронских стања под дејством оператора T_N .

- Од интереса је стање атома у терминима стања E , CM и R подсистема.

3.2.2 Адијабатски параметри

Валидност адијабатске апроксимације је обезбеђена ако важи (Messiah 1976):

$$\kappa = \frac{m_1 E_2}{m_2 E_1} \ll 1 \quad (3.20)$$

где су m_2 и E_2 маса и енергија споријег подсистема, док m_1 и E_1 стоје за бржи подсистем. За прорачун адијабатских параметара у оквиру декомпозиције $E+CM+R$ од користи су следећи подаци:

- $m_e = 9.10953 \cdot 10^{-31} \text{kg}$ (маса електрона)
- $m_p = 1.67265 \cdot 10^{-27} \text{kg}$ (маса протона)
- $\hbar = 1.054589 \cdot 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}$ (редукована Планкова константа)
- $a_B = 5,291772 \cdot 10^{-11} \text{m}$ (Боров радијус).

Прво рачунамо $\kappa_{e/CM}$, па $\kappa_{e/R}$ а онда $\kappa_{R/CM}$.

1) Адијабатски параметар $\kappa_{e/CM}$ је дат изразом:

$$\kappa_{e/CM} = \frac{m_e}{m_{CM}} \frac{E_{CM}}{E_e}, \quad (3.21)$$

па је потребно проценити E_{CM} и E_e . Прво,

$$E_e = \frac{(\Delta p)^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e(\Delta x)^2} = 2.17991 \cdot 10^{-18} \text{J} \approx 10 \text{eV}. \quad (3.22)$$

Енергија центра масе се може проценити као

$$E_{CM} = \frac{1}{2} m_{CM} v_{CM}^2, \quad (3.23)$$

где је v_{CM} дат изразом:

$$v_{CM} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m_{CM}}}. \quad (3.24)$$

Због (3.23) и (3.24) имамо да је $E_{CM} = k_B \cdot T$ – на собној температури $E_{CM} = 4.04 \cdot 10^{-21} \text{J} \approx 10^{-2} \text{eV}$. Сменом ових вредности у (3.21), налазимо да је:

$$\kappa_{e/CM} = 1.02975 \cdot 10^{-8}. \quad (3.25)$$

2) Адијабатски параметар $\kappa_{e/R}$ је дат изразом:

$$\kappa_{e/R} = \frac{m_e E_R}{m_R E_e}. \quad (3.26)$$

Узимамо да је $m_R \sim m_p$ а да је E_R приближно једнако везивној енергији нуклеона у језгру, што је реда величине 10 Мев. Користећи вредности за E_e , лако се долази до вредности:

$$\kappa_{e/R} = 5.44167 \cdot 10^2. \quad (3.27)$$

3) Адијабатски параметар $\kappa_{R/CM}$ је дат преко израза:

$$\kappa_{R/CM} = \frac{m_R E_{CM}}{m_{CM} E_R}. \quad (3.28)$$

Узимајући вредности за E_{CM} и E_R из 1) и 2), следи:

$$\kappa_{R/CM} = 2.57257 \cdot 10^{-11}. \quad (3.29)$$

Дакле, у $E + CM + R$ декомпозицији важе следеће процене за адијабатске параметре:

$$\kappa_1 \equiv \kappa_{e/CM} = \frac{m_e E_{CM}}{m_{CM} E_e} = 1.02975 \cdot 10^{-8}, \quad (3.30)$$

$$\kappa_2 \equiv \kappa_{R/e} = \frac{m_R E_e}{m_e E_R} = 0.18362 \cdot 10^{-2}, \quad (3.31)$$

$$\kappa_3 \equiv \kappa_{R/CM} = \frac{m_R E_{CM}}{m_{CM} E_R} = 2.57257 \cdot 10^{-11}. \quad (3.32)$$

Из (3.30) и (3.32) видимо да су електронски подсистем и подсистем релативне честице адијабатски одсечени од подсистема центра масе. Међутим, вредност параметра (3.31) указује да E и R подсистеми нису довољно добро адијабатски декупловани једно од другог. Изрази (3.16) и (3.30)-(3.32) заједно сугеришу следећи запис стања атома декомпонованог на $E + CM + R + S$ подсистеме:

$$|\varepsilon\rangle_{e+R} |\Psi\rangle_{CM+S} + |O(\kappa)\rangle_{e+CM+R+S}, \kappa = \max\{\kappa_i, i = 1, 2, 3\}, \quad (3.33)$$

где други члан описује малу, али постојећу, сплетеност свих подсистема. Мали члан, са десне стране израза (3.33), говори о томе да је експериментално уочавање сплетености подсистема E , CM и R мало вероватан догађај.

Адијабатски параметар (3.32) нам говори о томе да су CM и R подсистеми адијабатски декупловани. То не иде у прилог декохеренцијском програму моделовања Штерн-Герлаховог експеримента.

Поред квантитативног резултата (3.32), у прилог одсуства декохеренције за CM и R подсистеме иде и експеримент са водониковим атомом. Наиме, будући да водоников атом има само протон у језгру, јасно је да ту нема места за унутрашње окружење, R . На основу декохеренцијског моделовања је за очекивати онда да водоникови атоми не би требало да дају информације о спину у експерименту. Експериментални подаци, међутим, говоре нешто друго: Фипс и Тејлор (Phipps and Taylor 1927) су показали да је понашање атома водоника аналогно понашању атома сребра у Штерн-Герлаховом експерименту – на екрану се такође виде два трага. Отуда следи закључак: процес декохеренције није неопходан за одвијање Штерн-Герлаховог експеримента, тј. квантно стање система је дато изразом типа (1.1).

3.2.3 Интеракција

Иако је горњи закључак јасан и јединствен, поставља се следеће питање: да ли, ипак, интеракција \hat{H}_{e+CM+R} , може играти неку улогу (декохеренцијског типа) за друге атоме – све **осим** водониковог атома? Наравно, опсервабилност \hat{H}_{e+CM+R} би била занимљив резултат.

Стање $|\varepsilon\rangle_{e+R}$, које показује сплетеност електронског и подсистема релативне честице, (3.33), увек се може записати у облику Шмитове канонске форме⁴ (Herbut 1984; Дугић 2009):

$$|\varepsilon\rangle_{e+R} = \sum_{i=1}^Z C_i |\chi_i\rangle_e |\beta_i\rangle_R. \quad (3.34)$$

Из овог записа следи да је стање електронског подсистема дато као:

$$\hat{\rho}_e = \sum_{i=1}^Z |C_i|^2 |\chi_i\rangle_e \langle \chi_i|. \quad (3.35)$$

Сада, интеракција између CM и R подсистема може бити дефинисана усредњавањем по стањима електронског подсистема, трипартитне интеракције \hat{H}_{e+CM+R} :

$$\hat{H}_{e+CM+R} = k \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z \frac{1}{|\hat{r}_{ei} - \hat{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha j} \hat{\rho}_{R\alpha}|}, \quad (3.36)$$

⁴Такав запис обезбеђује Шмитова теорема која каже да се свако стање облика $|\Psi\rangle_{12} = \sum_{i,j} C_{ij} |\varphi_i\rangle_1 |\chi_j\rangle_2$ може записати као $|\Psi\rangle_{12} = \sum_k \sqrt{r_k} |\varphi_k\rangle_1 |\chi_k\rangle_2$, а r_k -ови су својствене вредности одговарајућих редукованих статистичких оператора $\hat{\rho}_1 = \sum_k r_k |\varphi_k\rangle_1 \langle \varphi_k|$ и $\hat{\rho}_2 = \sum_k r_k |\chi_k\rangle_2 \langle \chi_k|$.

тј.

$$\hat{H}_{CM+R} = \text{tr} \hat{H}_{e+CM+R} \hat{\rho}_e. \quad (3.37)$$

Израз (3.37) се своди на:

$$\hat{H}_{CM+R} = kZ \sum_{i=1}^Z e \langle \chi | \frac{1}{|\vec{r}_{ei} - \vec{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha} \hat{\rho}_{R\alpha}|} | \chi \rangle_e, \forall j. \quad (3.38)$$

где узимамо да је $|\chi\rangle_e$ Z -електронска Слејтерова детерминанта. Због ортогоналности стања која чине детерминанту имамо:

$$\hat{H}_{CM+R} = kZ \sum_{p=1}^Z e \langle \phi_p | \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha} \hat{\rho}_{R\alpha}|} | \phi_p \rangle_e, \quad (3.39)$$

при чему индекс p пребројава једноелектронска стања у Слејтеровој детерминанти.

Решавање својствене једначине (3.14) тиче се апроксимације тачкастог језгра, где су варијабле језгра параметри, $\vec{R} = \vec{R}_{CM}$. Тако, једноставности ради, позајмљујемо решења за водонику-сличан атом. Решења су облика:

$$\phi_p(\vec{r}_e - \vec{r}_{CM}), \quad (3.40)$$

где је $\vec{r}_{CM} = \vec{R}_{CM} \hat{I}_e$. Тиме је дефинисан класични референтни систем, у центру масе атома, за електроне.

У координатној репрезентацији, с обзиром на (3.40), израз (3.39) гласи:

$$\hat{H}_{CM+R} = kZ \sum_{p=1}^Z \int \frac{|\phi_p(\vec{\xi})|^2}{|\vec{\xi} - \hat{\Omega}_{CM+R}|} d^3 \vec{\xi}, \quad (3.41)$$

где је $\hat{\Omega}_{CM+R} \equiv -\vec{R}_{CM} \hat{I}_e + \vec{R}_{CM} + \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha} \hat{\rho}_{R\alpha}$ и $\vec{r}_e - \vec{r}_{CM} = \vec{\xi}$. Резултат за атоме са “затвореним љускама” гласи:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{CM+R} = & kZ \sum_n \sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{g=0}^{n-\ell-1} \sum_{t=0}^{2g} \frac{(2\ell+1)}{2n2^{2(n-\ell-1)}} \binom{2(n-\ell-1)-2g}{n-\ell-1-g} \times \\
& \times \frac{(2g)!}{g!(2\ell+1+g)!} \binom{2g+2(2\ell+1)}{2g-t} \frac{(-2)^t}{t!} \\
& \left\{ (2\ell+t+2)! \left(1 - \exp\left(-\frac{2Z\hat{\Omega}}{na_\mu}\right) \sum_{f=0}^{2\ell+t+2} \frac{\left(\frac{2Z\hat{\Omega}}{na_\mu}\right)^f}{f!} \right) \hat{\Omega}^{-1} \right. \\
& \left. + \frac{2Z}{na_\mu} (2\ell+t+1)! \exp\left(-\frac{2Z\hat{\Omega}}{na_\mu}\right) \sum_{f=0}^{2\ell+t+1} \frac{\left(\frac{2Z\hat{\Omega}}{na_\mu}\right)^f}{f!} \right\}, \quad (3.42)
\end{aligned}$$

а прегледности ради стављено је $\hat{\Omega} = |\hat{\Omega}_{CM+R}|$. Да би се добила што прецизнија процена, обављен је строг прорачун онолико колико сложеност физичке ситуације у атому то допушта. Детаљније о аналитичком облику интеракције се може наћи у Додатку Б.

Али, о интензитету се може закључивати индиректно и много лакше преко \hat{H}_{e+CM+R} . Наиме, како је показано (такође у Додатку Б), семикласична процена за трочестичну интеракцију даје:

$$kZ^2 \sum_{i,\alpha=1}^Z |\hat{r}_{e_i} - \hat{R}_{CM}|^{-3} |\hat{\rho}_{R\alpha}|^2. \quad (3.43)$$

Ова процена је транспарентнија од строгог резултата (3.42); поређењем се види да је зависност од наелектрисања атома Z (или од величине атома) истог типа, па се захваљујући постојању прецизног резултата (3.42) можемо ослонити на (3.43) када је реч о поређењу енергија унутар атома.

Последњи израз, (3.43), је реда величине $Z^2 10^{-9} eV \leq 10^{-5} eV$, док је сопствена енергија која одговара степену слободе центра масе реда величине $10^{-2} eV$. Дакле, интеракција \hat{H}_{CM+R} не доминира динамиком атома ($e+CM+R+S$), напротив – динамика целокупног система је доминантно вођена сопственим Хамилтонијаном \hat{H}_{CM} . Овакво стање ствари је, ефективно, еквивалентно важењу израза (3.3), за који је показано да води стању:

$$|\Psi\rangle_{S+CM} = C_1 |-\rangle_{CM} |\uparrow\rangle_{S_z} + C_2 |+\rangle_{CM} |\downarrow\rangle_{S_z}, \quad (3.44)$$

те се дакле систем све време еволуције може довољно добро описати чистим (квантним) ансамблом, тј. стањем $|\Psi\rangle_{S+CM}$, израз (1.1).

Закључак: Подсистем R не води опсервабилним последицама ни за “веће” атоме. Тиме је добијен јединствен закључак (истакнут већ горе): не може се наћи реалан физички модел окружења атомског (језгреног) CM -а који би могао

обезбедити физичку реалност (објективност) тзв. класичним трајекторијама у експериментима типа Штерн-Герлаховог експеримента. Реално физичко стање $S + CM$ система је сплетено стање, дато изразом (1.1).

Дискусија

Минимално проширење стандардног модела Штерн-Герлаховог експеримента, као што је и показано у претходним одељцима, јасно истиче нужност постојања унутрашњег окружења (R), да би центар масе декохерирао а што је предуслов постојања класичне информације о путањама, а самим тим и постојања информације о пројекцији спина. У претходном Поглављу и у Додатку Б је показано да желјена интеракција скалира као функција од Z^2 и да јој је интензитет знатно мањи од интензитета сопственог Хамилтонијана, \hat{H}_{CM} , атома. Према томе, ова интеракција, иако постојећа, не може играти значајну улогу у декохеренцији-сличној динамици атома.

Дакле, Фипс-Тејлоров експеримент и семикласично процењена јачина интеракције \hat{H}_{CM+R} (поткрепљена прецизним резултатом (3.42)) говоре о томе да, иако присутно у језгру, окружење R не игра физички битну улогу на просторно-временској скали Штерн-Герлаховог експеримента: предлог изложен у (Dugić 2004a) није физички реалан.

Овакав исход има за последицу нови поглед на Штерн-Герлахов експеримент – ансамбл атома може бити описан стањем $|\Psi\rangle_{S+CM}$ све време, до пада снопа на екран. Информације о спину постају доступне тек након интеракције сваког појединачног атома са екраном, кроз механизам квантних мерења II врсте.

Када је реч о квантним мерењима II врсте, познати су пионирски радови на том пољу (Nepp 1972; Nepp and Lieb 1974) као модели фотодетекције (детекција фотона помоћу осетљиве фотоплоче). Међутим, таква моделовања се не могу користити у свакој ситуацији када је о детекцијама реч – моделовања у (Nepp 1972; Nepp and Lieb 1974; Nakazato *et al* 1994) се тичу фотона и имају ограничен опсег применљивости. Општа теорија мерења II врсте тренутно не постоји, па се зато не може са сигурношћу рећи шта се дешава на екрану у Штерн-Герлаховом експерименту.

Ипак, у питању је резултат занимљив сам по себи ако се има у виду да теорија декохеренције изоштрава проблематику али и одређује “где” би редукција могла да се одигра. Наравно, овде више није реч о фон Нојмановој редукцији,

редукцији која је путем Пројекционог постулата уграђена у дефиницију предиктивних (поновљивих) мерења. Тиме појам детекције добија на значају – процес квантног мерења бива комплетиран детекцијом (тј. квантним мерењем II врсте) квантних честица.

Поред концептуалног значаја закључка да је у Штерн-Герлаховом експерименту ансамбл атома (и сваки појединачни атом) описан чистим стањем (1.1), поставља се питање да ли је појам унутрашњег окружења (R) (не)релевантан и за још неке физичке ситуације, сем мерних.

Један аргумент се може дати из области атомске интерферометрије. Почетком осамдесетих година прошлог века (Scully and Drühl 1982), предложен је мисаони експеримент у вези са питањем да ли се информација може брисати. Прецизније, реч је о информацији којом путањом се честица креће. Као што је познато у теорији декохеренције и теорији мерења, таква информација води губљењу интерференционих прстенова – нпр. у експерименту са електронима који падају на два прореза (аналогон Јанговог експеримента из оптике). Није важно да ли се мерење којим се путем креће електрон заиста и обави. Важно је да је експериментална поставка таква да су те информације доступне – ако нису онда електрони исказују таласно понашање а на застору се јавља интерференција.

Испоставља се да је то делимично изводиво, а посебан тип мерења који то омогућава носи назив квантно брисање¹ – мерењу које је засновано на постојању квантних корелација. Овај концепт је експериментално демонстриран у неутронској, оптичкој и атомској интерферометрији (Dügg and Rempe 2000). Последња поменути експериментална верификација је од посебне важности овде.

Претпоставимо да је детектор D који бележи информације о честици описан стањима $|a\rangle, |b\rangle$ која формирају базис. Нека су $|+\rangle$ и $|-\rangle$ стања доступна систему (честици) чија се таласно-честична својства испитују. Систем+детектор је после интеракције описан стањем (које изражава горе поменути квантне корелације):

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |a\rangle + |-\rangle \otimes |b\rangle). \quad (4.1)$$

Мерењем неке опсервабле \hat{A} , чија су својствена стања $|a\rangle$ и $|b\rangle$ а својствене вредности a и b , може се квантитативно изразити информација о путањи честице коју садржи одговарајући детектор. Налажењем трага по стањима детектора, што ефективно одговара мерењу опсервабле \hat{A} , следи:

$$tr_D(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|). \quad (4.2)$$

Одсуство чланова $|+\rangle\langle-|$ и $|-\rangle\langle+|$ из горњег израза указује на то да нема интерференције на застору; систем је описан мешаним стањем:

$$\hat{\rho}_s = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|). \quad (4.3)$$

¹Енгл.: quantum eraser.

Међутим, могуће је поново (делимично) добити интерференцију – селектовањем одговарајућег **подансамбла**. Да би добили тај подансамбл, претпоставимо да меримо другу опсерваблу, \hat{C} , на детектору са својственим вредностима c и d и својственим стањима $|c\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle + |b\rangle)$ и $|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle - |b\rangle)$, тј. опсерваблу која је некомпатибилна опсервабли \hat{A} . Измерена вредност, нпр. c , има за последицу да вектор стања укупног система сада гласи:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)|c\rangle, \quad (4.4)$$

што значи да је систем описан мешаним стањем:

$$\hat{\rho}'_s = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| + |+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|), \quad (4.5)$$

а интерференција делимично “враћена”. Интересантно је да након мерења опсервабле \hat{C} , даља мерења произвољних опсервабли не утичу на интерференциону слику (Dürr and Rempe 2000).

Еквивалент горе описаном примеру у оквиру стандардног третмана Штерн-Герлаховог експеримента би гласило, нпр.:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_s |-\rangle_{CM} + |\downarrow\rangle_s |+\rangle_{CM}) = \\ & = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\rightarrow\rangle_s \frac{(|-\rangle_{CM} + |+\rangle_{CM})}{\sqrt{2}} + |\leftarrow\rangle_s \frac{(|-\rangle_{CM} - |+\rangle_{CM})}{\sqrt{2}}), \end{aligned} \quad (4.6)$$

где су $|\rightarrow\rangle_s$ и $|\leftarrow\rangle_s$ својствена стања опсервабле \hat{S}_x . Мерењем \hat{S}_x може се добити вредност, рецимо, $+1$, а коначно стање би онда гласило:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle_s (|-\rangle_{CM} + |+\rangle_{CM}), \quad (4.7)$$

а то је еквивалент релацији (4.4). Са друге стране, увођење окружења (R), као подсистема у оквиру атома, у принципу онемогућује “quantum erasure” тип мерења. На пример, ако је у питању опсервабла \hat{S}_x и мерна вредност $+1$, стање ће бити:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle_s (|-\rangle_{CM} |1\rangle_R + |+\rangle_{CM} |2\rangle_R), \quad (4.8)$$

тј. постоје квантне корелације у $CM + R$ систему. Ефективно, CM подсистем је у мешаном стању:

$$\frac{1}{2}(|-\rangle_{CM} \langle-| + |+\rangle_{CM} \langle+|), \quad (4.9)$$

у супротности са релацијом (4.7). Али, аргументи из “quantum erasure”-а не морају бити априорни. Овде су разматрана временски независна стања која су идеализација реалних стања – реална стања увек садрже временску зависност. С обзиром да је реч о атомима, може се очекивати рекуренција, и осциловање између екстрема – чистог и мешаног стања, (1.1) и (1.2).

У вези разликовања стања (1.1) и (1.2), често се може наћи аргументовање које се заснива на интерферометрији Штерн-Герлаховог типа: стања (1.1) и (1.2) се могу разликовати коришћењем два магнета који заклапају “прав угао” међусобно – што би одговарало паровима опсервабли ($\hat{z}_{CM}, \hat{\sigma}_{sz}$) и ($\hat{x}_{CM}, \hat{\sigma}_{sx}$). То је делимично тачно, али само под условом да опсервабла од интереса (нпр. једночестична опсервабла $\hat{z}_{CM} \otimes \hat{I}_S$) временски еволуира у неку опсерваблу $\hat{Z}(t)$ која је двочестичног типа. То се онда своди на већ поменута мерења двоструко-некомпатибилних опсервабли на $S + CM$ систему.

На атомске подсистеме CM и R (разматране као декупловане у Одељку 3.1) се може утицати неким спољашњим пољем које их куплује, што може да остави простор за индуковану интеракцију \hat{H}_{CM+R} и семикласично понашање CM -а. То је рецимо случај у атомској нанофабрикацији, где се ефективно користе Еренфестове једначине за прорачун путања атома (Meschede and Metcalf 2003; Meschede 2007).

Све горе речено стоји све док је реч о проширеном стандардном моделу тј., док је степенима слободе релативне честице придружена функција мезоскопског окружења. Свакако, могу се разматрати алтернативе проширеног стандардног модела :

1. Магнетно поље игра улогу окружења (што значи да је поље сад динамички систем – за разлику од досадашњег третмана где је играло улогу спољашњег поља које куплује две опсервабле, \hat{z}_{CM} и $\hat{\sigma}_z$) што би се са формалне стране огледало у промени $B(\hat{z}_{CM}) \rightarrow \hat{B}(\hat{z}_{CM})$ у Хамилтонијану (2.9) а атомски центар масе је подесан као квантни апарат²,
2. Постоји неко непознато спољашње окружење или
3. Постоји неко непознато унутрашње окружење. Поред претходно реченог, може се размишљати о томе да екран “опажа” неку другу колективну опсерваблу уместо опсервабли везаних за центар масе (било атома, било језгра) или пак процес декохеренције није релевантан (ефективан) без обзира на “прерасподеле” степени слободе ван и унутар атома.

Све ове алтернативе, дакле, воде ван опште прихваћеног модела; у оквиру опште прихваћеног модела, пак, док год магнетно поље не игра улогу динамичког

²Треба имати у виду да је нпр. неутронска интерферометрија теоријски заснована на третирању магнетног поља као спољашњег поља – поставка да је магнетно поље динамички систем би водила нефункционисању неутронске интерферометрије, што у пракси, наравно, није случај. Ова чињеница оставља мало простора за разматрање магнетног поља као динамичког система у оквиру Штерн-Герлаховог експеримента.

система, придруживање центру масе (било да је језгра, било атома) улоге апарата повлачи за собом (због егзистенције канонских трансформација) постојање степени слободе релативне честице који сада чине окружење за степене слободе центра масе.

Закључак

Декохеренцијско моделовање спроведено на тему Штерн-Герлаховог експеримента је моделовање на основу првих принципа (“ab initio”). Мањкавост таквог приступа јесте у томе што не даје детаље динамике атомских подсистема, док предност лежи у томе што обезбеђује општост резултата који су добијени без неких специјалних претпоставки и почетних услова. Закључци изведени из модела, како смо видели, индицирају егзистенцију квантног ансамбла (који је описан стањем $|\Psi\rangle_{S+CM}$ испред екрана), док информација о спину постаје доступна тек након “интеракције” са екраном. Овакав закључак није тривијалан. Напротив, у литератури, и уопште међу физичарима, не постоји усаглашен став по питању егзистенције или неегзистенције квантног ансамбла у оваквој једној ситуацији.

Све док је реч о минималном проширењу Бомовог модела, закључак се може сматрати дефинитивним, јер је изведен на основи стандардног математичког апарата и стандардних премиса квантне механике. Ово пак искључује алтернативе, за које је речено да воде ван стандардног поимања Штерн-Герлаховог експеримента. Другим речима: чини се да би се објективност “класичних трајекторија” у Штерн-Герлаховом експерименту могла успоставити **само** у (нама непознатом) алтернативном моделу овог славног експеримента.

Додатак А

Атомски и језгрени центар масе

Овде су дата детаљнија разматрања за два редефинисања атомског система поменути у главнини текста.

Атомски центар масе

Линеарне канонске трансформације које се тичу N честица међусобно различитих маса а уводе координате центра центра масе и релативне честице су дате изразима:

$$\vec{R}_{CM} = \sum_{i=1}^N m_i \vec{r}_i / \sum_{i=1}^N m_i \quad (\text{A.1})$$

и

$$\vec{\rho}_{R\alpha} = \vec{r}_1 - \vec{r}_{\alpha+1}. \quad (\text{A.2})$$

Решавањем горњег система једначина добија се:

$$\vec{r}_i = \vec{R}_{CM} + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \omega_{\alpha i} \vec{\rho}_{R\alpha}, \quad (\text{A.3})$$

за инверзну трансформацију (прецизније говорећи, овде наведене трансформације спадају у тзв. тачкасте трансформације¹, јер се тичу само промене координата, као подкласа канонских трансформација које обухватају и промену импулса. Али, и за једне и за друге важи захтев за очувањем Хамилтонових једначина).

¹Енгл.: Point transformation.

Запишимо Хамилтонијан (3.1) у концизнијем облику као

$$\hat{H} = \hat{T}(\hat{\vec{p}}_i) + V(|\hat{\vec{r}}_i - \hat{\vec{r}}_j|) \quad (\text{A.4})$$

где \hat{T} обухвата све кинетичке енергије честица у атому а \hat{V} све интеракционе чланове. Коришћењем (А.3) ($N = A + Z$), \hat{T} из (А.4) се трансформише у (McWeeny 1978):

$$\hat{T}_{CM} + \sum_{\alpha=1}^{A+Z-1} \hat{T}_{R\alpha} + \sum_{\eta=1}^{A+Z-1} \sum_{\nu=1}^{A+Z-1} \hat{M}_{\eta\nu}^{(R)} \quad (\text{A.5})$$

а чланови, респективно, гласе:

$$\hat{T}_{CM} = \frac{\hat{\vec{P}}_{CM}^2}{2M}, \quad \hat{T}_{R\alpha} = \frac{\hat{\vec{P}}_{R\alpha}^2}{2\mu_\alpha} \quad \text{и} \quad \hat{M}_{\eta\nu}^{(R)} = \frac{m_{\eta+1}m_{\nu+1}\hat{\vec{\rho}}_\eta \cdot \hat{\vec{\rho}}_\nu}{M}, \quad (\text{A.6})$$

Последњи израз у (А.6) је познат у литератури као “mass polarization” члан (McWeeny 1978). Релативне (“редуковане”) масе су дате следећим изразом:

$$\mu_\alpha = \frac{m_{\alpha+1}(M - m_{\alpha+1})}{M}. \quad (\text{A.7})$$

Због (А.2), интеракције (и кулоновске и нуклеарне) $V(|\hat{\vec{r}}_i - \hat{\vec{r}}_j|)$ у (А.4) постају спољашњи потенцијали за R , тј. $V(|\hat{\vec{\rho}}_{R\alpha}|)$. Нпр., Кулонова интеракција за електрон и протон постаје:

$$\hat{V}_{Coul}^{(R)} = k \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z \frac{1}{|\hat{\vec{\rho}}_R^{ij}|}, \quad (\text{A.8})$$

где је $\hat{\vec{\rho}}_R^{ij} = \hat{\vec{r}}_{ei} - \hat{\vec{r}}_{pj}$, $|k| = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$, док за нуклеарну интеракцију (3.2) важи:

$$\hat{V}_{nucl}^{nn'} = -\gamma^2 \frac{\exp(-\mu|\hat{\vec{\rho}}_R^{nn'}|)}{|\hat{\vec{\rho}}_R^{nn'}|}. \quad (\text{A.9})$$

Збирно, за (А.4) имамо:

$$\hat{H} = \hat{T}_{CM} + \sum_{\alpha=1}^{A+Z-1} \hat{T}_{R\alpha} + \sum_{\eta=1}^{A+Z-1} \sum_{\nu=1}^{A+Z-1} \hat{M}_{\eta\nu}^{(R)} + V(|\hat{\vec{\rho}}_{R\alpha}|), \quad (\text{A.10})$$

или стављајући

$$\hat{H}_{CM} \equiv \hat{T}_{CM} \quad \text{и} \quad \hat{H}_R \equiv \sum_{\alpha=1}^{A+Z-1} \hat{T}_{R\alpha} + \sum_{\eta=1}^{A+Z-1} \sum_{\nu=1}^{A+Z-1} \hat{M}_{\eta\nu}^{(R)} + V(|\hat{\vec{\rho}}_{R\alpha}|), \quad (\text{A.11})$$

слиди израз:

$$\hat{H} = \hat{H}_{CM} + \hat{H}_R \quad (\text{A.12})$$

који показује потпуну сепарацију варијабли – нема купловања координата центра масе и релативне честице.

Језгрени центар масе

У овом случају канонске трансформације се примењују на језгро, док варијабле (координате) електрона остају нетакнуте. Запишимо (3.1) у складу са тим:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{V}_{Coul}^{ee} + \hat{T}_p + \hat{T}_n + \hat{V}_{Coul}^{(pp)} + \hat{V}_{nucl} + \hat{V}_{Coul}^{(ep)}. \quad (\text{A.13})$$

Прва два члана у (A.13) се дакле не мењају, следећа четири дају као у претходном случају $\hat{H} = \hat{H}_{CM} + \hat{H}_R$, док последњи члан:

$$\hat{V}_{Coul}^{ep} = k \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z \frac{1}{|\hat{r}_{ei} - \hat{r}_{pj}|}, \quad (\text{A.14})$$

због (A.3) даје

$$\hat{V}_{Coul}^{ep} \equiv \hat{H}_{e+CM+R} = k \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z \frac{1}{|\hat{r}_{ei} - \hat{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha j} \hat{p}_{R\alpha}|}, \quad (\text{A.15})$$

као трипартитну интеракцију између E , CM и R подсистема. Укупно, стављајући $\hat{H}_E = \hat{T}_e + \hat{V}_{Coul}^{ee}$, (A.13) прелази у

$$\hat{H} = \hat{H}_E + \hat{H}_{CM} + \hat{H}_R + \hat{H}_{e+CM+R}, \quad (\text{A.16})$$

што и јесте израз (3.8), односно његов орбитални део.

Додатак Б

Прорачун интеракције \hat{H}_{e+CM+R}

Сврха додатка је да покаже како аналитички изгледа \hat{H}_{CM+R} интеракција и да да ред величине те интеракције. Трипартитна интеракција \hat{H}_{e+CM+R} води порекло од Кулонове електронско-протонске интеракције у језгру, \hat{V}_{Coul}^{ep} (в. (А.15)), па зато следи:

$$\hat{H}_{e+CM+R} = -k \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z \frac{1}{|\vec{r}_{ei} - \vec{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha j} \vec{\rho}_{R\alpha}|}. \quad (\text{Б.1})$$

Да би дошли до \hat{H}_{CM+R} , треба израчунати израз:

$$\text{tr} \hat{H}_{e+CM+R} \hat{\rho}_e, \quad (\text{Б.2})$$

где је $\hat{\rho}_e$ редуковани статистички оператор којим описујемо стање електронског подсистема и облика је:

$$\hat{\rho}_e = \sum_{\alpha} |C_{\alpha}|^2 |\chi_{\alpha}\rangle_e \langle \chi_{\alpha}|. \quad (\text{Б.3})$$

Даље,

$$\hat{H}_{CM+R} = \sum_{\alpha} |C_{\alpha}|^2 \langle \chi_{\alpha} | \hat{H}_{e+CM+R} | \chi_{\alpha} \rangle_e, \quad (\text{Б.4})$$

а индекс α , у изразима (Б.3) и (Б.4), пребројава базис састављен од Слејтерових детерминанти, којих има бесконачно-пребројиво много. Једноставности ради узимамо једну детерминанту из базиса, детерминанту која се односи на основно стање атома – стављамо $|\chi_{\alpha}\rangle_e \equiv |\chi\rangle_e$, а за $|\chi\rangle_e$ узимамо Слејтерову детерминанту састављену од решења за водонику сличне атоме:

$$|\chi\rangle_e = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \begin{vmatrix} |\phi_1\rangle_1 & |\phi_1\rangle_2 & |\phi_1\rangle_3 & \dots & |\phi_1\rangle_Z \\ |\phi_2\rangle_1 & |\phi_2\rangle_2 & |\phi_2\rangle_3 & \dots & |\phi_2\rangle_Z \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\phi_Z\rangle_1 & |\phi_Z\rangle_2 & |\phi_Z\rangle_3 & \dots & |\phi_Z\rangle_Z \end{vmatrix}.$$

Формално, израз (Б.1) даје идентичне чланове за све протоне, па пишемо:

$$\hat{H}_{e+CM+R} = Z\hat{H}'_{e+CM+R}, \quad (\text{Б.5})$$

односно

$$\hat{H}_{CM+R} = Z\hat{H}'_{CM+R}, \quad (\text{Б.6})$$

где је

$$\hat{H}'_{CM+R} = k \sum_{i=1}^Z e \langle \chi | \frac{1}{|\hat{r}_{ei} - \hat{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha} \hat{\rho}_{R\alpha}|} | \chi \rangle_e, \forall j. \quad (\text{Б.7})$$

Због егзактне ортогоналности једноелектронских стања која се појављују у Слејтеровој детерминанти релативно лако се проверава да важи (Mcweeny 1978):

$$\hat{H}'_{CM+R} = k \sum_{p=1}^Z e \langle \phi_p | \frac{1}{|\hat{r}_e - \hat{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha} \hat{\rho}_{R\alpha}|} | \phi_p \rangle_e, \quad (\text{Б.8})$$

где индекс p сада пребројава једноелектронска стања у Слејтеровој детерминанти $|\chi\rangle_e$. Сходно томе, израз за \hat{H}_{CM+R} добија облик:

$$\hat{H}_{CM+R} = kZ \sum_{p=1}^Z e \langle \phi_p | \frac{1}{|\hat{r}_e - \hat{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha} \hat{\rho}_{R\alpha}|} | \phi_p \rangle_e, \quad (\text{Б.9})$$

Имајући у виду адијабатско декупловање подсистема E од CM , са гледишта електронског подсистема координате језгра су параметри – $\hat{\rho}_{R\alpha} = \vec{\rho}_{R\alpha} \hat{I}_e$, $\hat{R}_{CM} = \vec{r}_{CM} \hat{I}_e$. Једноставности ради, а како је то уобичајено у атомској физици, узимамо да се координате електрона мере од тачкастог језгра $\hat{\rho}_{R\alpha} = 0$, $\hat{R}_{CM} = \vec{r}_{CM} \hat{I}_e$ а што и јесте случај код водониковог атома. Онда, једноелектронске функције стања у координатној репрезентацији гласе:

$$\phi_p(\vec{r}_e - \vec{r}_{CM}). \quad (\text{Б.10})$$

Коришћењем разлагања $\hat{I} = \int d^3\vec{r}_e |\vec{r}_e - \vec{r}_{CM}\rangle \langle \vec{r}_e - \vec{r}_{CM}|$, а у духу претходно реченог, \hat{H}_{CM+R} у координатној репрезентацији добија следећу форму:

$$\hat{H}_{CM+R} = kZ \sum_{p=1}^Z \int \frac{|\phi_p(\vec{r}_e - \vec{r}_{CM})|^2}{|\vec{r}_e - \hat{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_\alpha \hat{\rho}_{R\alpha}|} d^3 \vec{r}_e. \quad (\text{B.11})$$

Стављањем смене $\vec{r}_e - \vec{r}_{CM} = \vec{\xi}$, последњи израз се може записати у компактнијем облику:

$$\hat{H}_{CM+R} = kZ \sum_{p=1}^Z \int \frac{|\phi_p(\vec{\xi})|^2}{|\vec{\xi} - \hat{\Omega}_{CM+R}|} d^3 \vec{\xi} \quad (\text{B.12})$$

где је $\hat{\Omega}_{CM+R} \equiv -\vec{r}_{CM} \hat{I}_e + \hat{R}_{CM} + \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_\alpha \hat{\rho}_{R\alpha}$.

Прорачун израза (B.12) може бити изведен на основи Адicione теореме за сферне хармонике (Nikiforov, Uvarov 1988):

$$\frac{1}{|\vec{\xi} - \vec{\tau}|} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{|\rho_{<}|^s}{|\rho_{>}|^{s+1}} \left[\frac{4\pi}{2s+1} \sum_{m_s=-s}^s Y_s^{m_s*}(\vartheta_\tau, \varphi_\tau) Y_s^{m_s}(\vartheta_\xi, \varphi_\xi) \right] \quad (\text{B.13})$$

где је $\vec{\tau} = (\tau, \vartheta_\tau, \varphi_\tau)$ и $\vec{\xi} = (\xi, \vartheta_\xi, \varphi_\xi)$ и при том важи $\rho_{<} = \xi$, $\rho_{>} = \tau$ ако $\xi < \tau$ и $\rho_{<} = \tau$, $\rho_{>} = \xi$ ако $\tau < \xi$. За једноелектронска стања узимамо стационарна стања водонику сличног атома

$$\phi_p(\vec{\xi}) \equiv \phi_{nlm}(\vec{\xi}) = R_{nl}(\xi) Y_\ell^{m_\ell}(\vartheta_\xi, \varphi_\xi), \quad (\text{B.14})$$

и водећи рачуна да је за наше потребе $\vec{\tau} \equiv \hat{\Omega}$, (B.12)) се трансформише у следећи израз:

$$\begin{aligned} & kZ \sum_n \sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2s+1} \sum_{m_s=-s}^s Y_s^{m_s*}(\vartheta_\tau, \varphi_\tau) \times \\ & \times \int \frac{|\rho_{<}|^s}{|\rho_{>}|^{s+1}} R_{nl}^2(\xi) \xi^2 d\xi \times \\ & \times \int Y_\ell^{m_\ell}(\vartheta_\xi, \varphi_\xi) Y_\ell^{m_\ell*}(\vartheta_\xi, \varphi_\xi) Y_s^{m_s}(\vartheta_\xi, \varphi_\xi) \sin \vartheta_\xi d\varphi_\xi d\vartheta_\xi. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Прво рачунамо суму:

$$\sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} I_{\vartheta\varphi}^{(m_\ell)},$$

где је $I_{\vartheta\varphi}$ интеграл по променљивим ϑ_ξ , φ_ξ . За тај задатак су корисни следећи

резултати (Weisbluth 1978), који се односе на произвољне сферне хармонике:

$$\sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} |Y_\ell^{m_\ell}(\vartheta, \varphi)|^2 = \frac{2\ell+1}{4\pi} \quad (\text{Б.16})$$

и

$$\int Y_\ell^{m_\ell}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \sqrt{4\pi} \delta_{\ell 0} \delta_{m_0}. \quad (\text{Б.17})$$

Применом (Б.16) и (Б.17) добијамо да је за атоме са “затвореним љускама”

$$\sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} I_{\vartheta\varphi}^{(m_\ell)} = \frac{2\ell+1}{\sqrt{4\pi}} \delta_{s_0} \delta_{m_s, 0}, \quad (\text{Б.18})$$

што има за последицу укидање сума по s и m_s у (Б.15). Користећи чињеницу да је $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ и да се интеграл по ξ може записати као (Nikiforov, Uvarov 1988):

$$I_R = \int_0^\tau \frac{\xi^s}{\tau^{s+1}} R_{n\ell}^2(\xi) \xi^2 d\xi + \int_\tau^\infty \frac{\tau^s}{\xi^{s+1}} R_{n\ell}^2(\xi) \xi^2 d\xi, \quad (\text{Б.19})$$

следи израз

$$kZ \sum_n \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) \left\{ \tau^{-1} \int_0^\tau R_{n\ell}^2(\xi) \xi^2 d\xi + \int_\tau^\infty R_{n\ell}^2(\xi) \xi d\xi \right\}. \quad (\text{Б.20})$$

Радијални део функције стања је дат изразом (Messiah Vol. I 1976):

$$R_{n\ell}(\xi) = \sqrt{\left(\left(\frac{2Z}{na_\mu} \right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3} \right)} \exp\left(-\frac{Z\xi}{na_\mu}\right) \left(\frac{2Z\xi}{na_\mu} \right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2Z\xi}{na_\mu} \right), \quad (\text{Б.21})$$

одакле следи и њен квадрат,

$$R_{n\ell}^2(\xi) = \left(\frac{2Z}{na_\mu} \right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3} \exp\left(-\frac{2Z\xi}{na_\mu}\right) \left(\frac{2Z\xi}{na_\mu} \right)^{2\ell} \left\{ L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2Z\xi}{na_\mu} \right) \right\}^2, \quad (\text{Б.22})$$

где су ознаке стандардне: n и ℓ су квантни бројеви, Z је наелектрисање атома а L је ознака за асоциране Лагерове полиноме. У изразу (Б.22) фигурише квадрат асоцираног Лагеровог полинома $\left\{ L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2Z\xi}{na_\mu} \right) \right\}^2$ који се може изразити као полином по променљивој ξ^1 :

$$\left\{ L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2Z\xi}{na_\mu} \right) \right\}^2 = \sum_{g=0}^{n-\ell-1} \sum_{t=0}^{2g} C_{gt}^{n\ell} \left(\frac{2Z\xi}{na_\mu} \right)^t. \quad (\text{Б.23})$$

¹За детаље у вези израза (Б.21) и за облик коефицијената $C_{gt}^{n\ell}$ видети Додатак II.

Сада, (Б.22) и (Б.23) дају

$$R_{n\ell}^2(\xi) = \left(\frac{2Z}{na_\mu}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3} \exp\left(-\frac{2Z\xi}{na_\mu}\right) \sum_{g=0}^{n-\ell-1} \sum_{t=0}^{2g} C_{gt}^{n\ell} \left(\frac{2Z\xi}{na_\mu}\right)^{2\ell+t}, \quad (\text{Б.24})$$

па израз (Б.21) добија следећу форму:

$$\begin{aligned} & kZ \sum_n \sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{g=0}^{n-\ell-1} \sum_{t=0}^{2g} (2\ell+1) \left(\frac{2Z}{na_\mu}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3} C_{gt}^{n\ell} \times \\ & \times \left\{ \tau^{-1} \int_0^\tau \exp\left(-\frac{2Z\xi}{na_\mu}\right) \left(\frac{2Z\xi}{na_\mu}\right)^{2\ell+t} \xi^2 d\xi + \right. \\ & \left. + \int_\tau^\infty \exp\left(-\frac{2Z\xi}{na_\mu}\right) \left(\frac{2Z\xi}{na_\mu}\right)^{2\ell+t} \xi d\xi \right\}. \end{aligned} \quad (\text{Б.25})$$

Уводећи смену променљиве $\frac{2Z\xi}{na_\mu} = \mathcal{X}$ у (Б.25), очигледно следи:

$$\begin{aligned} & kZ \sum_n \sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{g=0}^{n-\ell-1} \sum_{t=0}^{2g} (2\ell+1) \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3} C_{gt}^{n\ell} \times \\ & \times \left\{ \tau^{-1} \int_0^{\frac{2Z\tau}{na_\mu}} e^{-\mathcal{X}} \mathcal{X}^{2\ell+t+2} d\mathcal{X} + \frac{2Z}{na_\mu} \int_{\frac{2Z\tau}{na_\mu}}^\infty e^{-\mathcal{X}} \mathcal{X}^{2\ell+t+1} d\mathcal{X} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{Б.26})$$

Интеграли у заградама по променљивој \mathcal{X} су заправо тзв. некомплетне гама-функције чија општа решења гласе (Gradshteyn, Ryzhik 2007):

$$\gamma(1+n, z) \equiv \int_0^z e^{-t} t^n dt = n! \left[1 - e^{-z} \left(\sum_{m=0}^n \frac{z^m}{m!} \right) \right] \quad (\text{Б.27})$$

и

$$\Gamma(1+n, z) \equiv \int_z^\infty e^{-t} t^n dt = n! e^{-z} \sum_{m=0}^n \frac{z^m}{m!}. \quad (\text{Б.28})$$

Користећи (Б.27) и (Б.28) и израз за $C_{gt}^{n\ell}$ из Додатка Ц (притом враћамо $\hat{\Omega}$ уместо τ), (Б.27) добија коначни облик:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{CM+R} = & kZ \sum_n \sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{g=0}^{n-\ell-1} \sum_{t=0}^{2g} \frac{(2\ell+1)}{2n2^{2(n-\ell-1)}} \binom{2(n-\ell-1)-2g}{n-\ell-1-g} \times \\
 & \times \frac{(2g)!}{g!(2\ell+1+g)!} \binom{2g+2(2\ell+1)}{2g-t} \frac{(-2)^t}{t!} \\
 & \left\{ (2\ell+t+2)! \left(1 - \exp\left(-\frac{2Z\hat{\Omega}}{na_\mu}\right) \sum_{f=0}^{2\ell+t+2} \frac{\left(\frac{2Z\hat{\Omega}}{na_\mu}\right)^f}{f!} \right) \hat{\Omega}^{-1} \right. \\
 & \left. + \frac{2Z}{na_\mu} (2\ell+t+1)! \exp\left(-\frac{2Z\hat{\Omega}}{na_\mu}\right) \sum_{f=0}^{2\ell+t+1} \frac{\left(\frac{2Z\hat{\Omega}}{na_\mu}\right)^f}{f!} \right\}. \quad (\text{B.29})
 \end{aligned}$$

а прегледности ради стављено је $\hat{\Omega} = |\hat{\Omega}_{CM+R}|$.

Видимо да се у изразу (Б.29) појављује продукт експоненцијалних функција од Z и полиномних функција од Z . За $Z \sim 10$ можемо занемарити све такве производе, добијајући следећу зависност \hat{H}_{CM+R} :

$$\|\hat{H}_{CM+R}\| \cong \beta Z \|\hat{\Omega}^{-1}\| \quad (\text{B.30})$$

где је

$$\begin{aligned}
 \beta \equiv & k \sum_n \sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{g=0}^{n-\ell-1} \sum_{t=0}^{2g} \frac{(2\ell+1)}{2n2^{2(n-\ell-1)}} \binom{2(n-\ell-1)-2g}{n-\ell-1-g} \times \\
 & \times \frac{(2g)!}{g!(2\ell+1+g)!} \binom{2g+2(2\ell+1)}{2g-t} \frac{(-2)^t}{t!} [(2\ell+t+2)!]. \quad (\text{B.31})
 \end{aligned}$$

Квантни бројеви n, ℓ и m у (Б.31) указују на Z зависност параметра β . Имајући у виду да се (Б.29) односи на атоме са затвореним љускама, може се проценити Z зависност параметра β , за неке посебне вредности $Z=10, 28, 60, 110, 180$, тј. $n=2, 3, 4, 5, 6$. Графички приказ зависности $\beta(Z)$, Слика Б.1, говори да за већину вредности Z интеракција \hat{H}_{CM+R} може описати као:

$$\|\hat{H}_{CM+R}\| \sim Z^2 \|\hat{\Omega}^{-1}\|. \quad (\text{B.32})$$

Израз за \hat{H}_{CM+R} , дакле, иако аналитички тачан, поприлично је нетраспарентан, па је интензитет интеракције лакше проценити семикласичним разматрањем. Полазно место је израз (Б.1)

$$\hat{H}_{e+CM+R} = -k \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z \frac{1}{|\hat{r}_{ei} - \hat{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha j} \hat{\rho}_{R\alpha}|}. \quad (\text{B.33})$$

Као и пре, координате електрона меримо од тачкастог језгра $\hat{R}_{CM} = \vec{r}_{CM} \hat{I}_e$, тј. $\hat{\rho}_{e_i} = \vec{r}_{e_i} - \hat{R}_{CM}$ па имамо:

$$\hat{H}_{e+R} = -k \sum_{i,j=1}^Z \frac{1}{|\hat{\rho}_{e_i} - \hat{\rho}_{R_j}|} \quad (\text{Б.34})$$

где је ради кракоће записа стављено $\hat{\rho}_{R_j} = \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha j} \hat{\rho}_{R\alpha}$. На основи косинусне теореме следи:

$$\hat{H}_{e+R} = -k \sum_{i,j=1}^Z \frac{1}{\sqrt{|\hat{\rho}_{e_i}|^2 + |\hat{\rho}_{R_j}|^2 - 2|\hat{\rho}_{e_i}||\hat{\rho}_{R_j}| \cos \phi}} \quad (\text{Б.35})$$

тј.

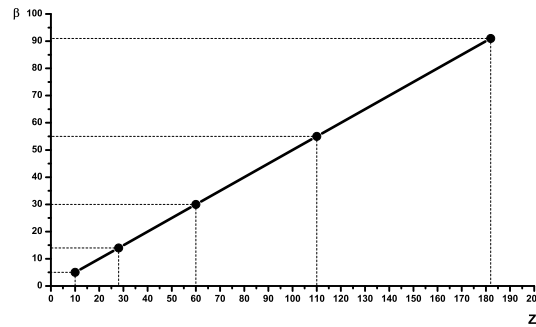
$$\hat{H}_{e+R} = -k \sum_{i,j=1}^Z \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{|\hat{\rho}_{R_j}|^2}{|\hat{\rho}_{e_i}|^2} - 2 \frac{|\hat{\rho}_{R_j}|}{|\hat{\rho}_{e_i}|} \cos \phi}}, \quad (\text{Б.36})$$

односно

$$\hat{H}_{e+R} = \sum_{i,j=1}^Z \frac{-k}{|\hat{\rho}_{e_i}|} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{|\hat{\rho}_{R_j}|^2}{|\hat{\rho}_{e_i}|^2} + \frac{|\hat{\rho}_{R_j}|}{|\hat{\rho}_{e_i}|} \cos \phi \right). \quad (\text{Б.37})$$

Усредњавањем по углу, добија се:

$$\hat{H}_{e+R} = \sum_{i,j=1}^Z \frac{-k}{|\hat{\rho}_{e_i}|} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{|\hat{\rho}_{R_j}|^2}{|\hat{\rho}_{e_i}|^2} \right), \quad (\text{Б.38})$$



Слика Б.1: Z зависност параметра β за атоме са затвореним љускама.

то јест:

$$\hat{H}_{e+R} = \frac{-kZ^2}{|\hat{\rho}_e|} + \frac{kZ^2}{2} \frac{|\hat{\rho}_R|^2}{|\hat{\rho}_e|^3} \cdot \forall i, j \quad (\text{Б.39})$$

При преласку на последњи израз узели смо као апроксимацију да је $|\hat{\rho}_{Rj}| \sim |\hat{\rho}_R|$ (промер језгра) и $|\hat{\rho}_{ei}| \sim |\hat{\rho}_e|$ (промер атома), $\forall i, j$.

Први члан у (Б.39) даје потенцијалну енергију електрона у односу на тачкасто језгро, док је други члан корекција и из њега се може проценити интензитет интеракције. Узимајући стандардне вредности $|\hat{\rho}_R| \sim 10^{-15}m$ и $|\hat{\rho}_e| \sim 10^{-10}m$ и водећи рачуна да $\frac{k}{|\hat{\rho}_e|}$ представља (просечну) енергију везе електрона у атому (око $10eV$), имамо:

$$\frac{Z^2}{2} \frac{k}{|\hat{\rho}_e|} \frac{|\hat{\rho}_R|^2}{|\hat{\rho}_e|^2} = \frac{Z^2}{2} \frac{k}{|\hat{r}_e - \hat{R}_{CM}|} \frac{|\hat{\rho}_R|^2}{|\hat{r}_e - \hat{R}_{CM}|^2} \sim Z^2 \cdot 10eV \cdot 10^{-10}. \quad (\text{Б.40})$$

Из главнине текста позната је сопствена енергија центра масе, $|\hat{H}_{CM}| \sim 10^{-2}eV$. Јасно је да важи $|\hat{H}_{CM}| \gg |\hat{H}_{e+CM+R}|$.

Додатак Ц

Адициона теорема; квадрат асоцираног Лагеровог полинома

Адициона теорема

Из стандардног курса математичке физике позната је функција генератриса за Лежандрове полиноме:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tz+t^2}} = \sum_{s=0}^{\infty} P_s(z)t^s. \quad (\text{Ц.1})$$

Израз (Ц.1) се користи и у следећем облику (Weissbluth 1978):

$$\frac{1}{|\vec{\xi} - \vec{\tau}|} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{|\rho_{<}|^s}{|\rho_{>}|^{s+1}} P_s(\cos \gamma), \quad (\text{Ц.2})$$

где је $\rho_{<} = \min(\xi, \tau)$, $\rho_{>} = \max(\xi, \tau)$ а γ је угао између вектора $\vec{\xi}$ и $\vec{\tau}$. Израз (Ц.2) је заснован на следећем уочавању:

$$|\vec{\xi} - \vec{\tau}| = \sqrt{\xi^2 + \tau^2 - 2\xi\tau \cos \gamma} = \begin{cases} \xi \sqrt{1 + \left(\frac{\tau}{\xi}\right)^2 - 2\frac{\tau}{\xi} \cos \gamma} & \tau < \xi \\ \tau \sqrt{1 + \left(\frac{\xi}{\tau}\right)^2 - 2\frac{\xi}{\tau} \cos \gamma} & \xi < \tau \end{cases} \quad (\text{Ц.3})$$

или компактно:

$$|\vec{\xi} - \vec{\tau}| = |\rho_{>}| \sqrt{1 + \left(\frac{\rho_{<}}{\rho_{>}}\right)^2 - 2\frac{\rho_{<}}{\rho_{>}} \cos \gamma}. \quad (\text{Ц.4})$$

Имајући у виду (Ц.2) и (Ц.4), јасно је да важи:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|\vec{\xi} - \vec{\tau}|} &= \frac{1}{|\rho_{>}| \sqrt{1 + \left(\frac{\rho_{\leq}}{\rho_{>}}\right)^2 - 2\frac{\rho_{\leq}}{\rho_{>}} \cos \gamma}} = \\
&= \frac{1}{\rho_{>}} \sum_{s=0}^{\infty} \left(\frac{\rho_{\leq}}{\rho_{>}}\right)^s P_s(\cos \gamma) \\
&= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{\rho_{\leq}^s}{\rho_{>}^{s+1}} P_s(\cos \gamma)
\end{aligned} \tag{II.5}$$

што и јесте (II.2). Лежандров полином, који фигурише у (II.5), може бити изражен као:

$$P_s(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2s+1} \sum_{m_s=-s}^s Y_s^{m_s*}(\vartheta_{\tau}, \varphi_{\tau}) Y_s^{m_s}(\vartheta_{\xi}, \varphi_{\xi}), \tag{II.6}$$

што је математички исказ адиционе теореме. Изрази (II.5) и (II.6) заједно дају релацију (B.13).

Квадрат асоцираног Лагеровог полинома

У референци (Gradshteyn, Ryzhik 2007) се може наћи израз који даје везу квадрата асоцираног Лагеровог полинома и асоцираног Лагеровог полинома:

$$[L_p^{k*}(x)]^2 = \frac{(p+k)!}{2^{2p} p!} \sum_{g=0}^p \binom{2p-2g}{p-g} \frac{(2g)!}{g!(k+g)!} L_{2g}^{2k*}(2x) \tag{II.7}$$

Горњи израз подразумева следећу дефиницију асоцираних Лагерових полинома

$$L_p^{k*}(x) = \sum_{g=0}^p \binom{p+k}{p-g} \frac{(-x)^g}{g!} \tag{II.8}$$

која је карактеристична за математичку литературу. У квантној механици је од шире употребе дефиниција која се може наћи нпр. у (Messiah Vol.I 1976):

$$L_p^k(x) = \sum_{g=0}^p (p+k)! \binom{p+k}{p-g} \frac{(-x)^g}{g!}. \tag{II.9}$$

Веза између (II.8) и (II.9) гласи:

$$L_p^{k*}(x) = \frac{L_p^k(x)}{(p+k)!}, \tag{II.10}$$

уз помоћ које лако следи “квантно-механичка” верзија израза (II.7):

$$[L_p^k(x)]^2 = \frac{[(p+k)!]^3}{2^{2p}p!} \sum_{g=0}^p \binom{2p-2g}{p-g} \frac{(2g)!}{g!(k+g)!} \frac{L_{2g}^{2k}(2x)}{(2k+2g)!}; \quad (\text{II.11})$$

односно, даље, због (II.9)

$$[L_p^k(x)]^2 = \frac{[(p+k)!]^3}{2^{2p}p!} \sum_{g=0}^p \binom{2p-2g}{p-g} \frac{(2g)!}{g!(k+g)!} \sum_{t=0}^{2g} \binom{2g+2k}{2g-t} (-2)^t \frac{x^t}{t!}. \quad (\text{II.12})$$

За потребе претходног Додатка узимамо да је $p = n - \ell - 1$, $k = 2\ell + 1$ и $x = \frac{2Z\xi}{na_\mu}$, па следи

$$[L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2Z\xi}{na_\mu}\right)]^2 = \sum_{g=0}^{n-\ell-1} \sum_{t=0}^{2g} C_{gt}^{n\ell} \xi^t, \quad (\text{II.13})$$

где је коефицијент $C_{gt}^{n\ell}$ дат следећим изразом:

$$C_{gt}^{n\ell} = \frac{[(n+\ell)!]^3}{2^{2(n-\ell-1)}(n-\ell-1)!} \binom{2(n-\ell-1)-2g}{n-\ell-1-g} \times \\ \times \frac{(2g)!}{g!(2\ell+1+g)!} \binom{2g+2(2\ell+1)}{2g-t} \frac{(-2)^t}{t!}. \quad (\text{II.14})$$

Додатак Д

Препринт рада прихваћеног за објављивање у Acta Physica Polonica A

Nonexistence of the “Classical Trajectories” in the Stern-Gerlach Experiment

M. Arsenijević^{*1}, M. Dugić^{*}

**Department of Physics, Faculty of Science, Kragujevac, Serbia*

Keywords: Spin Measurement, Quantum Decoherence, Atomic Nanofabrication

PACS. 03.65.Ta-Foundations of quantum mechanics; measurement theory

PACS. 03.65.Yz-Decoherence; open systems; quantum statistical methods

PACS. 81.16.Ta-Atom manipulation

Abstract: The Stern-Gerlach experiment is a paradigm of the quantum measurement of spin. Its physical interpretation is in intimate relation with the physical basis of the current research in the atomic (molecular) nanofabrication procedures. Nevertheless, interpretation of the experiment is an open issue yet. Here, we give the arguments for the physical nonexistence of the so-called “classical trajectories” of the atoms (molecules) in front of the screen. Some nanotech-related consequences are distinguished.

1. Introduction

The Stern-Gerlach experiment is a paradigm of quantum measurement of a particle’s spin. However, the deeper physical description of the Stern-Gerlach (SG) effect is an open issue.

Historically the first, and often used, interpretation (due probably to Bohr, Mott and Pauli [1]) of the experiment reads: the atoms behind the Stern-Gerlach magnet possess the

¹Department of physics, Faculty of Science, Kragujevac, Serbia, Email: momirarsenijevic@kg.ac.rs

definite, physically objective (“classical”) trajectories. This picture (interpretation) supports the semiclassical description in the terms of the “external force” for the atom in the external magnetic field. The screen capturing the incident atoms is assumed simply to record the objectively existing trajectories very much like a camera records the life scenes. As the “quantum apparatus”, the screen plays the passive role in quantum measurement of spin. This interpretation may suggest the universal existence of the atomic trajectories, thus setting a specific basis for the manipulation with the atomic beams. Formally, the state of an ensemble of atoms can be described by a mixed state of the following (simplified) form:

$$\hat{\rho}_{CM+S} = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle_S \langle\uparrow| \otimes |-\rangle_{CM} \langle-| + \frac{1}{2} |\downarrow\rangle_S \langle\downarrow| \otimes |+\rangle_{CM} \langle+| \quad (\text{D.1})$$

where $|+\rangle_{CM}$ and $|-\rangle_{CM}$ are the states of the “center-of-mass” system (up and down trajectories, respectively) and $|\downarrow\rangle_S$ and $|\uparrow\rangle_S$ are the eigenstates of the spin-1/2 projection along the axis of the external field. The mixed state eq. (D.1) is virtually the most general mixed state that provides the (required) *correlations* between the pure states $|\pm\rangle_{CM}$ and $|\updownarrow\rangle_S$, while admitting the interpretation in the terms of the definite atomic trajectories. Certainly, the manipulation with the atomic trajectories is *classical* for the system in the state eq. (D.1).

However, the standard, and generally used *model* of the Stern-Gerlach experiment [2] does not support this interpretation, neither positively rejects it. The physical situation is described by the following Hamiltonian [2]:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_{CM}^2}{2m} \otimes \hat{I}_S + \mu B(\hat{z}_{CM}) \otimes \hat{\sigma}_{S_z}. \quad (\text{D.2})$$

where \hat{p}_{CM} and \hat{z}_{CM} refer to the atomic center-of-mass momentum and position observables, respectively, $B(\hat{z}_{CM})$ stands for the *classical* magnetic field, while $\hat{\sigma}_{S_z}$ denotes the z-component of the spin operator, i.e. its projection along the z-axis (μ and m have the standard meaning of the Bohr’s magneton and of the mass of the atom, respectively). The Hamiltonian eq. (D.2) gives rise to the entangled “pure” state for the composite system [2] of the (simplified) form (cf. e.g. [3] for some details):

$$|\Psi\rangle_{CM+S} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_S |-\rangle_{CM} + |\downarrow\rangle_S |+\rangle_{CM}). \quad (\text{D.3})$$

Needless to say, the entangled state eq. (D.3) suggests the substantially different physical picture and the system-manipulation than the state eq. (D.1). The state eq. (D.3) bears quantum nonseparability and nonlocality, the prominent quantum information resources [4]; formally, the state eq. (D.3) is a pair-of-qubits’ state [3]. The presence of nonlocality/nonseparability in the state eq. (D.3) opens the (classically nonexistent [4]) possibilities for manipulating the atomic *CM* system. E.g., by manipulating the atomic spin-system *S*, one can manipulate the atomic *CM* system [4]. In this model, the screen plays an active role as the “quantum apparatus”—it *induces* the transition of the *CM+S* state from eq. (D.3) to eq. (D.1), thus providing the classical information about the atomic trajectory.

It is worth noting: the states eq. (D.1) and eq. (D.3) represent the idealizations of the realistic quantum states. Actually, the realistic physical situations are described by the time

dependent states that, in turn, makes the task of designing an experimental situation for distinguishing the pure and mixed states for $CM + S$ system a subtle task, indeed. Bearing this in mind, a theoretical analysis might be useful for providing the conclusion about the physical existence of the “classical trajectories”.

In this paper, we perform an *ab initio*, the *decoherence*-theory-based [5] analysis of the Stern-Gerlach experiment. *Without resorting to any interpretation* whatsoever, we are able to draw the “definite” conclusion on the nonexistence of the “classical trajectories”. This conclusion provides some physical rewards of interest for the foundations of quantum mechanics (e.g. for the quantum measurement theory) as well in principle as for the advent of the atomic (molecular) nanofabrication (cf., e.g. [6, 7]) by setting the general recipes for manipulation with the atomic (molecular) trajectories.

The decoherence-based model of the SG experiment

The universally valid quantum mechanics states: the existence of the classical trajectories (as described by eq. (D.1)) requires some *external action* exerted on the system of interest $CM + S$ [5, 8]. Such systems are referred to as *open* quantum systems, as distinct from the closed (isolated) systems that are subject to the Schrödinger law. The open systems can not be described by the Schrödinger equation, while “robustness” (dynamical stability) of certain states of the system (such as the supposed atomic trajectories) is induced by the system’s *environment*. Without the environment, the system (here, the composite system $CM+S$) is both described by the Schrödinger equation and can be found in superposition of states (such as the entangled state eq. (D.3)). Therefore, our starting point in the search for the classical trajectories, eq. (D.1), is the openness of the system $CM+S$ (more precisely: of the system CM) that appears as a hypothesis of our approach. To this end, we employ the so-called *environment-induced-decoherence* theory that provides existence of the “robust” open-system’s states on the fundamental quantum mechanical level [5, 8]. The “robust state” are robust relative to the influence of the environment and thus give rise to the approximately classical behavior of the open system.

A decoherence-based model has recently been proposed [9]. The model describes a free atom exposed in the vacuum to the external classical magnetic field. The model minimally extends the standard model of the SG experiment [2] by stipulating existence of the atomic CM -system environment R possibly capable of inducing decoherence for certain states of the atomic CM system. Physically, the system R is supposed to represent the set of the relative positions (the *internal* degrees of freedom of an atom) for the particles constituting the atom. A proposal for the experimental test of the model has also been given [9]. However, the model is purely qualitative—the existence of the environment R is stipulated—and the more elaborate analysis is needed. Particularly, the model raises the following question: whether or not one can recognize/construct the *realistic* internal environment R for the atomic CM system?

In order to obtain an *interpretation-free* answer to this question, we perform an *ab initio* analysis of the Stern-Gerlach experiment. We deal with the fundamental (yet nonrelativistic) model of “atom”, and we search for the realistic physical model of the *internal environment* R . We do not employ any additional stipulations and/or interpretations, thus setting a basis

for the “definite” answer to the question of whether or not the “classical trajectories” in the SG experiment can be considered to be physically realistic.

2.1 The atomic center-of-mass

Typically, the internal environment is modeled as a thermal bath or as a collection of the (not necessarily thermalized) harmonic oscillators [10, 11]. However, as we repeatedly emphasize: throughout this paper, we perform an *ab initio* analysis of the system of interest, without resorting to such formal models. In other words: our task is to recognize the *realistic* environment for the atomic center-of-mass system. For this purpose, we start from the fundamental (yet nonrelativistic) definition of an atom as a collection of the electrons, protons and neutrons ($e+p+n$)—for the point-like nucleus (as typical for atomic physics, that we do not deal with), the “protons + neutrons” represents simply the point-like atomic nucleus, N ($p+n=N$). Then the atom (while neglecting the atomic spin) is defined by the following Hamiltonian:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \hat{T}_{Ei} + \sum_{j=1}^Z \hat{T}_{pj} + \sum_{k=1}^{A-Z} \hat{T}_{nk} + \hat{V}_{Coul}^{ee} + \hat{V}_{Coul}^{ep} + \hat{V}_{Coul}^{pp} + \hat{V}_{nucl} \quad (\text{D.4})$$

where \hat{T} stands for the kinetic terms, \hat{V}_{Coul} for the Coulomb interaction for the pairs of particles (ee —the electrons, ep —the electron-proton, pp —the protons pairs), while \hat{V}_{nucl} stands for the nuclear interaction.

The expression eq. (D.1) distinguishes the physical importance of the atomic center of mass (CM) subsystem as the system of interest. Then, as it is well known, the set of the particles $e+p+n$ can be redefined as $CM+R$, where CM and R represent the atomic center-of-mass and the “relative particle” subsystems. Then, the Hamiltonian eqs. (D.4), (D.2) obtains the following form:

$$\hat{H} = \hat{H}_{CM} + \hat{H}_R + \hat{H}_{CM+S}, \quad (\text{D.5})$$

where $\hat{H}_{CM} \equiv \hat{T}_{CM}$ is the kinetic term of the atomic center-of-mass, while the R -system’s Hamiltonian reads $\hat{H}_R = \sum_{\alpha=1}^{Z+A-1} \hat{T}_{R\alpha} + \hat{V}_{nucl}^{(R)} + \hat{V}_{Coul}^{(R)} + \hat{M}_{\rho\sigma}^{(R)}$, and $\hat{M}_{\rho\sigma}^{(R)}$ represents the internal interaction. As absent from the standard model [2] of the Stern-Gerlach experiment, the subsystem R may be expected to play the role of the CM ’s environment [9].

From eq. (D.5), it is rather apparent: the atomic CM and R subsystems appear mutually *exactly decoupled*—thus representing the noninteracting systems. Needless to say, then there is no room for the atomic R system to play the atomic CM system’s environment. Formally, as it can be easily shown, the state of the composite system $CM+S+R$ is of the separable form $|\Psi\rangle_{CM+S}|\phi\rangle_R$, where $|\Psi\rangle_{CM+S}$ is presented by eq. (D.3)—there are not the classical trajectories.

It is worth noting: the proper external actions can induce the coupling between the CM and R subsystems of an atom [6, 7], or even can induce the appearance of the “classical trajectories” for the atom [12]. However, we do not assume any external action exerted on the atom that might produce such consequences. Rather, we deal with the isolated atom

traversing in the vacuum the SG magnet, thus removing the possibility of the appearance of the classical trajectories, except (and only) due to the influence of the internal environment R .

2.2 The nucleus' center-of-mass

While this argument and conclusion are as simple and clear as they are, the following remark is also in order. More than 99% of the atomic mass is placed in the atomic nucleus. Due to the virtual indistinguishability of the atomic and the atomic-nucleus center-of-mass systems, one may wonder if the Stern-Gerlach experiment should be expressed in the terms of the later. For this reason, and for simplicity, we redefine the atomic system as follows: leaving the electrons system intact, we introduce the *nucleus* CM and R subsystems (the use of the same notation as for the atomic CM and R system should not introduce any confusion). Now, we ask if there may be any interaction between the nucleus' CM and R subsystems.

Now, the atom is formally defined as $e+CM+R$; for the point-like nucleus, the atom is simply $e+CM$ (i.e. $CM \equiv N$). Then the Hamiltonian \hat{H} , eq. (D.4), reads:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{CM} + \hat{H}_R + k \sum_{i,j=1}^Z \frac{1}{|\hat{r}_{ei} - \hat{R}_{CM} - \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha j} \hat{\rho}_{R\alpha}|} + \hat{H}_{CM+S}. \quad (D.6)$$

where the indices CM and R refer to the atomic nucleus. Notice the tripartite interaction H_{e+CM+R} in the above expression—this interaction has the origin in the term \hat{V}_{Coul}^{ep} , eq. (D.4), while bearing in mind the relation:

$$\hat{r}_{pj} = \hat{R}_{CM} + \sum_{\alpha=1}^{A-1} \omega_{\alpha j} \hat{\rho}_{R\alpha} \quad (D.7)$$

that relates the position-observable of the j -th proton on the one, and of the position-observables for the nucleus center-of-mass and of the relative particles ($\omega_{\alpha j}$ represents the real coefficient), on the other side.

Effectively, this interaction *couples* the nucleus' CM and R subsystems as desired [5], thus formally fulfilling the necessary condition for R to act as CM 's environment. However, this program breaks in its very beginning.

Actually, the Stern-Gerlach effect has also been observed for the hydrogen atom—as performed first by Phipps and Taylor [13]. The point is that the internal environment R simply *does not exist* for the hydrogen atom (for which the atomic number, $A = 1$, cf. eq. (D.7)), and therefore, as a matter of principle, makes the system R unnecessary for the description of the Stern-Gerlach experiment.

Bearing in mind that we *can not* recognize the internal environment in the realistic models of “atom”, we are forced to conclude that the “classical trajectories” should be considered as *physically unrealistic*.

3. Discussion Our conclusion on physical non-objectivity of “classical trajectories” stems from the *minimal extension* of the standard model [2] of the Stern-Gerlach experiment.

Actually, relative to the standard model, eq. (D.2), we only introduce the internal environment R as a necessary condition for the existence of the “classical trajectories”. Performing the *ab initio* analysis we point out that such a role of R can not be justified, thus *positively emphasizing* eq. (D.3) *as the physical state of the CM + S system*.

The alternative to our conclusion (of non-existence of “classical trajectories”) may follow from the alternative models of the experiment. E.g., one may quantize the magnetic field, in which case it may act as the “quantum apparatus”. However, we do not find such alternative(s) physically reasonable, and we find our conclusion as a “definite” description of the Stern-Gerlach experiment.

The tripartite interaction \hat{H}_{e+CM+R} may seem interesting as possibly raising the following dilemma: whether or not this internal interaction may play some role in the Stern-Gerlach experiment with the atoms—all the kinds of atoms *but* the hydrogen atom? Interestingly enough, as we show below, the interaction is not expected observably to contribute to the Stern-Gerlach effect. So, our conclusion on nonexistence of “classical trajectories” bears the *full generality*—i.e. equally refers to all the kinds of the atomic species.

In order to justify this notion, we give the following analysis of the atomic subsystems. The adiabatic parameter $\kappa = \frac{m_R E_{CM}}{m_{CM} E_R}$ [14] for the nucleus CM and R subsystems gives the order of $A^{-1}10^{-9}$, where A is the atomic mass number, and therefore there is a very good adiabatic cut between the two systems, CM and R . On the other side, the semiclassical estimation of the interaction \hat{H}_{e+CM+R} , eq. (D.6), that can be written as $kZ^2 \sum_{i,\alpha=1}^Z |\hat{\mathbf{r}}_{e_i} - \hat{\mathbf{R}}_{CM}|^{-3} |\hat{\rho}_{R\alpha}|^2$, gives the order of $Z^2 10^{-9} \text{eV}$ for \hat{H}_{e+CM+R} . Therefore, this interaction is much weaker than the self-energy E_{CM} of the CM system that is of the order of 10^{-2}eV . So, this interaction does not dominate the system’s dynamics and one may apply the adiabatic approximation [14], i.e. to take the separable state $|\Psi\rangle_{CM+S} |\phi\rangle_R$ as a very good approximation, where $|\Psi\rangle_{CM+S}$ is given by eq. (D.3).

While our conclusion offers some interesting observations and lessons for the foundations of quantum mechanics (quantum measurement, transition from quantum to classical [5], of the issue of the arrow of time [15]—to be presented elsewhere), it is also of interest for the foundations of the atomic nano-fabrication as well.

In the context of the quantum measurement problem, our conclusion points out the *active role* of the screen in the spin measurement. Actually, as the classical information about the atomic trajectories appears only on the screen, the screen appears as a substantial element of the quantum measurement of spin. This observation strengthens the possibility that the quantum measurement may not be complete without an act of the quantum particles detection.

The atomic nanofabrication procedures [6, 7, 16, 17, 18] are typically expressed in the terms of “classical trajectories” for atoms. Needless to say, if *literally understood*, these phrases may leave an impression of the semiclassical character of the atomic center-of-mass degrees of freedom, and, consequently, that the manipulation with the atomic beams can (and may) be safely designed in the classical-physics manner.

However, as our study points out: the atomic spatial degrees of freedom—even for

the different decompositions of the atom into subsystems-bear the full quantum mechanical potential. As the external (classical) magnetic field does not mutually couple CM and R systems, the Stern-Gerlach experiment must be described by the entangled state, eq. (Д.3). The entangled state, eq. (Д.3), provides the classically unknown possibilities for manipulating with the CM system by directly manipulating with the atomic spin system S . Certainly, this observation directly sets a specific recipe for manipulating the atomic beams in the realistic physical situations in the atomic nanofabrication procedures—that is our conclusion.

Acknowledgements The work on this paper is financially supported by Ministry of Science Serbia under contract No 141016.

References

1. W. Pauli, in Handbuck der Physik, Ed. S. Flugge (Springer, Berlin, 1985), p. 165
2. D. Bohm, Quantum Theory, Prentice Hall, New York, 1989
3. T. R. Oliveira, A. O. Caldeira, Coherence and Entanglement in a Stern-Gerlach experiment, eprint arXiv quant-ph/0608192v1 24 Aug 2006
4. M. Nielsen and I. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information, Cambridge, UK, 2000
5. E. Joos, H.D. Zeh, C. Kiefer, D. Giulini, J. Kupsch, I.-O. Stamatescu, Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory, Springer, New York, 2003
6. D. Meschede and H. Metcalf, J. Phys. D: Appl. Phys. 36 (2003) R17-R38
7. D. Meschede, Optics, Light and Lasers: The practical approach to modern photonics and laser physics, Wiley-VCH, Weinheim, 2007
8. H.-P. Breuer, F. Petruccione, The Theory of Open Quantum Systems, Oxford University Press, New York, 2007
9. M. Dugić, Europ. Phys. J, D 29, 173 (2004)
10. R. Omnès, The Interpretation of Quantum Mechanics, Princeton University Press, Princeton, 1994
11. A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Ann. Phys. (NY) 149, 374 (1983)
12. Y. Miroshnychenko *et al*, Optics Express 11, 3498-3502 (2003)
13. T. E. Phipps and J. B. Taylor, Phys. Rev. 29, 309 (1927)
14. A. Messiah, Quantum Mechanics, North-Holand Publishing Company, Amsterdam, 1976
15. H. D. Zeh, The Physical Basis of The Direction of Time, Springer-Verlag, 4th Edition, Berlin, 2001
16. R. Arun *et al.*, Phys. Rev. A 72, 023417 (2005)

17. F. Tantussi *et al.*, Mat. Sci. and Eng. C 27, 1418 (2007)
18. Z. Cui, Nanofabrication—Principles, Capabilities and Limits, Springer, New York, 2008

Литература

- Atkins P., Friedman R., 2005, *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford Univ. Press, Oxford
- Batelaan H., Gay T. J., 1997, Schwendimann J. J., *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4517
- Berman P. R. (Editor), 1997, *Atom Interferometry*, Academic Press
- Bohm D., 1951, *Quantum Theory*, Prentice Hall, Inc., New York
- Breuer H.-P., Petruccione F., 2007, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press, New York
- Cohen-Tannoudji C., Diu B., Laloë F., 1977, *Quantum Mechanics*, J. Wiley and Sons, New York
- d’Espagnat B., 1971, *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics*, Benjamin, Reading, MA
- Dugić M., 2004a, *Eur. Phys. J. D* **29**, 173
- Дугић М., 2004б, *Декохеренција у класичном лимиту квантне механике*, СФИН, XVII(2), Институт за физику, Београд
- Dugić M., Jeknić J., 2006, *What is “system”: some decoherence-theory arguments*, *Int. J. Theor. Phys.* 45, 2215-2225
- Dugić M., Jeknić-Dugić J., 2008, *What is “system”: the information-theoretic arguments*, *Int. J. Theor. Physics* 47, 805
- Дугић М., 2009, *Основе квантне информатике и квантног рачунања*, ПМФ, Крагујевац
- Dürr S., Rempe G., 2000, *Optics Communications* **179**, 323
- Нерп К., 1972, *Helv. Phys. Acta* **45**, 237
- Нерп К. and Lieb H., 1974, *Helv. Phys. Acta* **46**, 573
- Herbut F., 1984, *Kvantna mehanika za istraživače*, PMF, Beograd

-
- Gradshteyn I.S., Ryzhik I. M., 2007, *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press, New York
 - Joos E., Zeh H.D., Kiefer C., Giulini D., Kupsch J., Stamatescu I.-O., 2003, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Springer, New York
 - Li *et al.*, 2007, *Phys.Rev. Lett.* **99**, 130403
 - Mcweeny R., 1978, *Methods of Molecular Quantum Mechanics*, Academic Press, New York
 - Meschede D., 2007, *Optics, Light and Lasers: the Practical Approach to Modern Photonics and Laser Physics*, Wiley-VCH, Weinheim
 - Meschede D. and Metcalf H., 2003, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36** R17-R38
 - Messiah A., 1976, *Quantum Mechanics*, vol. I, North-Holland Publishing Company, Amsterdam
 - Messiah A., 1976, *Quantum Mechanics*, vol. II, North-Holland Publishing Company, Amsterdam
 - Nakazato H., Namiki M. and Pascazio S., 1994, *Physical Review Letters* **73**, 1063
 - Nielsen M. and Chuang I., 2000, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge, UK
 - Nikiforov A. F., Uvarov V. B., 1988, *Special Functions of Mathematical Physics*, Birkhäuser Verlag, Basel
 - Oliveira T. R., Caldeira A. O., 2006, *Coherence and Entanglement in a Stern-Gerlach experiment*, eprint arXiv quant-ph/0608192v1 24 Aug
 - Omnès R., 1994, *The Interpretation of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton
 - Peres A., 1993, *Quantum theory: Concepts and methods*, Kluwer Academic Publishers
 - Phipps T. E. and Taylor J. B., 1927, *Phys. Rev.* **29**, 309
 - Pierls R. E., Yoccoz J., 1957, *The Collective Model of Nuclear Motion Proc. Phys. Soc. Vol. XX*, p. 381
 - Sakurai J. J., 1994, *Modern Quantum Mechanics*, (edited by San Fu Taun) Addison-Wesley, New York
 - Scully M. O., Drühl K., 1982, *Phys. Rev. A* **25** 2208
 - von Neumann J., 1955, *Mathematical foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton

-
- Walls D. F. and Milburn G. J., 1994, *Quantum Optics*, Springer
 - Weissbluth M., 1978, *Atoms and Molecules*, Academic Press, New York
 - Wheeler J. A., Zurek W. H. (eds.), 1983, *Quantum Theory and Measurement*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey
 - Zeh H. D., 2005, *Roots and Fruits of Decoherence*,
Eprint arXiv: quant-ph/0512078 v1 10 Dec
 - Zurek W. H., 1982, Phys. Rev. D 26, 1862
 - Zurek W. H. *et al*, 1993, Phys. Rev. Lett. 70, 1187

Биографија аутора

Момир Арсенијевић је рођен 24. априла 1980. у Кавадарцима, БЈР Македонија. Основну школу завршио је у Зубином Потоку, а Гимназију природно-математичког смера у Косовској Митровици. На Природно-математичком факултету у Крагујевцу, група физика-информатика, дипломирао је 2004. године, са просечном оценом 8.69. Исте године уписао се на последипломске студије, смер “Класична и квантна физика”, такође на Природно-математичком факултету у Крагујевцу. На последипломским студијама је положио испите предвиђене програмом са просечном оценом 9.5. Тренутно је ангажован као истраживач-приправник на Институту за физику у Крагујевцу.