

## A kvantummechanika alapjai dióhéjban

Az alábbiakban röviden ismertetjük a mikrofizikai részecskék kvantummechanikai leírásának alapjait. Az ismertető rendkívül vázlatos lesz, és matematikai szempontból elnagyolt (olykor külön is jelezzük majd a slamposságokat). Az alábbi néhány oldalnyi szöveg célja csupán annyi, hogy a témával való ismerkedést megkönnyítse.

### Állapotvektor, skaláris szorzat

Ha egy részecskét vagy részecskék egy rendszerét vizsgáljuk, akkor annak adott pillanatbeli állapotát a klasszikus fizikai leírásban megadhatjuk pl. úgy, hogy rögzítjük a részecskék általánosított hely- és impulzuskoordinátáit. Ha a részecskék száma véges, akkor ezen adatok száma is véges. Másképpen kifejezve: a rendszer állapota egy véges dimenziós sokaság (a fázistér) egy pontjának feleltethető meg. A rendszer állapotának időbeli változását a mozgásegyenletekből származtathatjuk, amelyek (sok esetben) előállíthatók a fázistéren értelmezett Hamilton-függvény segítségével („kanonikus mozgásegyenletek”).

Ha a rendszert a kvantummechanika segítségével tárgyaljuk, akkor a rendszer állapotát egy (általában) végtelen dimenziós komplex vektortér egy elemeként adhatjuk meg. Ezt szokás a rendszer **állapotvektorának** nevezni. Az állapotvektorok terén értelmezve van egy skaláris szorzás, azaz egy olyan leképezés, amely egy vektorpárhoz egy komplex számot rendel, és teljesülnek rá bizonyos tulajdonságok. Ez utóbbiakat úgy rögzítették, hogy azok harmonizáljanak a „közönséges” skaláris szorzás tulajdonságaival, ahogyan azokat a megszokott térbeli vektorok (irányított szakaszok) esetén megismertük. A  $\Phi$  és  $\Psi$  vektorok skaláris szorzatára a  $\langle \Phi, \Psi \rangle$  jelölést fogjuk alkalmazni. A skaláris szorzástól megkövetelt tulajdonságok pedig a következők:

Tetszőleges  $\Phi, \Psi_1, \Psi_2$  vektorok és  $\alpha, \beta$  komplex számok esetén (a komplex konjugálást  $*$ -gal jelölve) teljesüljenek az alábbiak:

$$\langle \Phi, \alpha \cdot \Psi_1 + \beta \cdot \Psi_2 \rangle = \alpha \cdot \langle \Phi, \Psi_1 \rangle + \beta \cdot \langle \Phi, \Psi_2 \rangle$$

$$\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2, \Psi_1 \rangle^*$$

A skaláris szorzás tehát a második változójában lineáris (mind az összeadás, mind a számmal szorzás kiemelhető belőle). A szokásos térbeli vektorok valós vektorteret alkotnak, az ő esetükben a skaláris szorzás kommutatív. A kvantummechanikai állapotvektorok tere komplex vektortér. Itt a skaláris szorzásban szereplő két tényező sorrendjét megcserélve a szorzat képzetes része előjelet vált.

A fenti két tulajdonságból következik, hogy az összeadás a szorzat első tényezőjéből is kiemelhető, a számmal szorzás viszont csak úgy, hogy a szorzót komplex konjugáljuk:

$$\begin{aligned} \langle \alpha \cdot \Psi_1 + \beta \cdot \Psi_2, \Phi \rangle &= \langle \Phi, \alpha \cdot \Psi_1 + \beta \cdot \Psi_2 \rangle^* = (\alpha \cdot \langle \Phi, \Psi_1 \rangle + \beta \cdot \langle \Phi, \Psi_2 \rangle)^* = \alpha^* \cdot \langle \Phi, \Psi_1 \rangle^* + \beta^* \cdot \langle \Phi, \Psi_2 \rangle^* \\ &= \alpha^* \cdot \langle \Psi_1, \Phi \rangle + \beta^* \cdot \langle \Psi_2, \Phi \rangle \end{aligned}$$

A  $\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2, \Psi_1 \rangle^*$  kikötésből következik, hogy tetszőleges  $\Phi$  vektor esetén  $\langle \Phi, \Phi \rangle$  valós szám. Ennél azonban szigorúbb feltételt szabunk: Tetszőleges  $\Phi$  esetén teljesülnie kell az alábbi egyenlőtlenségnek:

$$\langle \Phi, \Phi \rangle \geq 0$$

A nullával való egyenlőség pedig csak akkor teljesüljön, ha  $\Phi$  a nullvektor.

Ezeknek a feltételeknek kell megfelelnie a  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  leképezésnek ahhoz, hogy azt skaláris szorzásnak nevezhessük.

Ha valamely  $\Phi$  és  $\Psi$  vektor skaláris szorzata nulla, akkor a két vektort egymásra **ortogonálisnak** („merőlegesnek”) mondják.

A skaláris szorzat segítségével bevezethetünk egy normát a vektortéren. A norma a vektor „nagyságáról” vagy „abszolútértékéről” korábban kialakított fogalmunk általánosítása. A norma egy olyan leképezés (a továbbiakban  $\|\cdot\|$ -vel jelöljük), amely minden vektorhoz egy nemnegatív valós számot rendel, és teljesülnek rá az alábbiak:

Tetszőleges  $\Phi, \Psi$  vektorok és  $\alpha$  komplex szám esetén

$$\|\alpha \cdot \Phi\| = |\alpha| \cdot \|\Phi\|$$

$$\|\Phi + \Psi\| \leq \|\Phi\| + \|\Psi\|$$

A fenti második egyenlőséget háromszög-egyenlőtlenségnek szokták nevezni. A fentiekén kívül még kikötjük azt is, hogy  $\|\Phi\| = 0$  csak akkor teljesüljön, ha  $\Phi$  a nullvektor.

A skaláris szorzat segítségével a következőképpen definiálhatunk normát. Legyen tetszőleges  $\Phi$  vektor esetén

$$\|\Phi\| = \sqrt{\langle \Phi, \Phi \rangle}$$

Könnyű ellenőrizni, hogy ebben az esetben teljesülnek a normával szemben támasztott követelmények. A fenti módon bevezetett normát a skaláris szorzat által indukált normának szokták nevezni.

A kvantummechanikai állapotok skaláris szorzattal ellátott komplex vektorterére még egy kikötést szoktak tenni, nevezetesen azt, hogy az legyen „teljes”. Ennek kritériumát itt mellőzzük. Ha egy skalárszorzatos vektortér teljes, akkor azt **Hilbert-térnek** is nevezik, így a kvantummechanikai állapotok egy Hilbert-tér elemeinek feleltethetők meg.

Még egy utolsó megjegyzés: Valójában az sem precíz kijelentés, miszerint a vizsgált rendszer állapotának a kvantummechanikában a Hilbert-tér egy vektora felel meg. Ugyanahhoz az állapothoz ugyanis több vektor is hozzárendelhető, de ezek a vektorok csak egy (nem nulla) komplex szorzóban térnek el egymástól. Tehát ha egy állapothoz a  $\Phi$  vektort társítjuk, akkor ugyanúgy társíthatjuk hozzá az  $\alpha \cdot \Phi$  vektort is, ahol  $\alpha \neq 0$  egy komplex szám. Általában ki fogjuk kötni, hogy az állapotvektor 1-re normált legyen („1-re normált” helyett sokszor röviden „normált”-at mondanak), azaz teljesüljön, hogy  $\|\Phi\| = \sqrt{\langle \Phi, \Phi \rangle} = 1$ . Ezt a feltételt azonban még mindig végtelen sok különböző állapotvektor teljesíti, amelyek egy komplex fázisfaktorban térnek el egymástól: Ha  $\Phi$  a rendszer állapotvektora, akkor szerepelhet helyette  $e^{i\delta} \cdot \Phi$  is, ahol  $\delta$  valamilyen valós szám.

### Állapotfüggvény

Ebben a szakaszban a vizsgált „rendszerünk” egyetlen részecskét – pl. egy elektront vagy egy atomot – fog jelenteni, amely a térben mozoghat (pl. valamilyen mező által kifejtett erőhatásnak kitéve). Ebben az esetben a Hilbert-tér egyik lehetséges és gyakran használt megvalósítása az, hogy (ismét kissé leegyszerűsítve) az állapotvektorokat a három dimenziós téren értelmezett folytonos, komplex értékű, négyzetesen integrálható függvényekkel azonosítjuk. Azaz a  $\Psi$  állapotvektor egy olyan folytonos függvény, amely a tér minden egyes pontjához egy komplex számot rendel, és a  $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$  függvénynek a teljes térre vett integrálja véges érték:

$$\Psi: \mathbf{r} \mapsto \Psi(\mathbf{r}) \in \mathbb{C}$$

$$\int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = \int \Psi^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) d^3r < \infty$$

Egy ilyen függvény komplex számszorosa illetve két ilyen függvény összege is rendelkezik a megkövetelt tulajdonságokkal, tehát vektorteret alkotnak. Két függvény skaláris szorzatát pedig a következőképpen értelmezhetjük:

$$\langle \Phi, \Psi \rangle = \int \Phi^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) d^3r$$

Eddig semmit nem tudtunk mondani arról, hogy az állapotvektorba hogyan van „belekódolva” a vizsgált rendszer állapota. Most, hogy az absztrakt állapotvektor a térben értelmezett állapotfüggvényként konkrét alakot öltött, már mondhatunk erről valamit.

Ha a téren értelmezett állapotfüggvényünk 1-re normált, akkor a  $|\Psi|^2$  függvényhez egy eléggé közvetlen jelentést társíthatunk: ez nem más, mint a részecskénk térbeli helyének valószínűségi sűrűségfüggvénye. Azaz a kvantummechanika szerint annak a valószínűsége, hogy a részecskét valamely  $V$  tartományban találjuk meg (pl. egy részecske-detektorral):

$$P = \int_V |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r$$

Természetesen nem csak a részecske helye, hanem pl. annak impulzusa, energiája vagy más fizikai jellemzője is érdekelhet minket. Ezek meghatározásával kapcsolatos a következő szakasz.

## A fizikai mennyiségek operátorai

A különböző fizikai mennyiségekhez, pl. az energiához vagy az impulzusvektor egyes komponenseihez a kvantummechanika egy-egy **operátort** (hosszabb néven: lineáris operátort) társít. Egy  $\hat{A}$  lineáris operátor egy olyan leképezés, amely állapotvektorhoz állapotvektort rendel (a  $\Psi$ -hez rendelt állapotvektorra az  $\hat{A}\Psi$  jelölést fogjuk használni), és tetszőleges  $\Phi, \Psi$  állapotvektor valamint  $\alpha$  komplex szám esetén teljesülnek az alábbiak:

$$\hat{A}(\Psi + \Phi) = \hat{A}\Psi + \hat{A}\Phi$$

$$\hat{A}(\alpha \cdot \Psi) = \alpha \cdot \hat{A}\Psi$$

Az állapotok vektorterén bevezetett skaláris szorzás segítségével definiálhatjuk egy **operátor adjungáltját**. Az  $\hat{A}$  operátor adjungáltja az  $\hat{A}^\dagger$  operátor, ha tetszőleges  $\Psi$  és  $\Phi$  vektor esetén teljesül az alábbi:

$$\langle \Phi, \hat{A}\Psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \Phi, \Psi \rangle$$

Az  $\hat{A}$  operátort **önadjungált**nak vagy **hermitikusnak** nevezik, ha  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ , tehát tetszőleges  $\Psi$  és  $\Phi$  vektor esetén

$$\langle \Phi, \hat{A}\Psi \rangle = \langle \hat{A}\Phi, \Psi \rangle$$

A hermitikus operátorok jelentőségét az adja, hogy a „mégmérhető” fizikai mennyiségekhez (pl. helykoordináta, impulzuskomponens, energia) a kvantummechanika hermitikus operátorokat társít. Ennek okát lentebb majd igyekszünk megvilágítani.

## Sajátérték, sajátállapot, kevert állapot

Egy adott fizikai mennyiséghez tartozó operátor sajátértékeinek és sajátvektorainak különös jelentőségük van. **A fizikai mennyiség lehetséges értékei ugyanis az adott operátor sajátértékei alkotják.** (Ez megint elnagyolt állítás, amely nem minden esetben igaz. Az állapotter leggyakrabban használt reprezentációjában például az x-koordináta operátorának egyáltalán nincs sajátértéke, de ettől persze a részecskét még megtalálhatjuk valahol. Azonkívül az operátor sajátértéke egy mértékegység nélküli szám, a fizikai mennyiségeknek viszont általában van mértékegységük.) Egy  $\hat{A}$  lineáris operátor sajátvektora a  $\Psi$  vektor  $\lambda$  sajátértékkel, ha az operátor  $\Psi$ -hez annak  $\lambda$ -szorosát rendeli:

$$\hat{A}\Psi = \lambda \cdot \Psi$$

A fenti egyenlet a nullvektorra nyilvánvalóan teljesül  $\lambda$  tetszőleges értéke esetén. Ezt a triviális esetet kizárjuk azzal, hogy kikötjük:  $\Psi$  nem lehet a nullvektor.

Egy hermitikus operátor sajátértékei csak valós számok lehetnek. Tegyük fel ugyanis, hogy  $\Psi$  az  $\hat{A}$  hermitikus operátor sajátvektora  $\lambda$  sajátértékkel! Ekkor

$$\left. \begin{aligned} \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle &= \langle \Psi, \lambda \cdot \Psi \rangle = \lambda \cdot \langle \Psi, \Psi \rangle \\ \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle &= \langle \hat{A}\Psi, \Psi \rangle = \langle \lambda \cdot \Psi, \Psi \rangle = \lambda^* \cdot \langle \Psi, \Psi \rangle \end{aligned} \right\} \rightarrow \lambda \cdot \langle \Psi, \Psi \rangle = \lambda^* \cdot \langle \Psi, \Psi \rangle \rightarrow \lambda = \lambda^* \rightarrow \lambda \in \mathbb{R}$$

A hermitikus operátoroknak ez a tulajdonsága magyarázatul szolgál arra, hogy miért társítanak éppen ilyen operátorokat a „mégmérhető” mennyiségekhez.

A hermitikus operátorok egy további jellemzője, hogy a különböző sajátértékeikhez tartozó sajátvektorok ortogonálisak egymásra, azaz ha  $\hat{A}\Psi = \lambda \cdot \Psi$ ,  $\hat{A}\Phi = \mu \cdot \Phi$  és  $\lambda \neq \mu$ , akkor  $\langle \Phi, \Psi \rangle = 0$ . Ez az alábbi módon látható be:

$$\left. \begin{aligned} \langle \Phi, \hat{A}\Psi \rangle &= \langle \Phi, \lambda \cdot \Psi \rangle = \lambda \cdot \langle \Phi, \Psi \rangle \\ \langle \Phi, \hat{A}\Psi \rangle &= \langle \hat{A}\Phi, \Psi \rangle = \langle \mu \cdot \Phi, \Psi \rangle = \mu \cdot \langle \Phi, \Psi \rangle \end{aligned} \right\} \rightarrow \lambda \cdot \langle \Phi, \Psi \rangle = \mu \cdot \langle \Phi, \Psi \rangle$$

A kapott egyenlőség  $\lambda \neq \mu$  esetén csak úgy teljesülhet, ha  $\langle \Phi, \Psi \rangle = 0$ .

Amint már leírtuk, a kvantummechanika szerint egy mennyiség lehetséges értékei a mennyiséghez tartozó operátor sajátértékei. A kvantummechanika szerint valamely fizikai mennyiség – például az energia – nem mindig rendelkezik „határozott” értékkel. A vizsgált rendszernek vannak olyan állapotai, amelyben az adott mennyiség értéke „elmosódott”, több lehetséges érték „keveréke”. Ez nem azt jelenti, hogy egy mérés esetén a sajátértékek valamilyen átlagát fogjuk mérni, hanem azt, hogy a mérés többféle eredményre is vezethet. A mért érték az operátor valamelyik

sajátértéke lesz, de hogy melyik, arról a kvantummechanika biztosat nem mond, hanem csak egy-egy valószínűséget rendel a lehetséges értékek mindegyikéhez. Mitől függ, hogy egy adott állapotban valamely mennyiség értéke „határozott” vagy „elmosódott”?

Ha a vizsgált rendszer állapotvektora a kérdéses mennyiség operátorának sajátvektora, akkor ebben az állapotban az adott mennyiségeknek határozott értéke van. Az érték a sajátvektorhoz tartozó sajátértékkel egyenlő. Példa: Az energiához társított operátort a rendszer  $\hat{H}$  Hamilton-operátorának hívják. Ha a rendszer  $\Psi$  állapotvektora a Hamilton-operátor sajátvektora  $E$  sajátértékkel, azaz  $\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$ , akkor az energiának határozott értéke van, nevezetesen  $E$ . Ilyenkor azt is mondják, hogy a rendszer energia-sajátállapotban van.

Ha a rendszer állapotvektora nem sajátvektora a kérdéses mennyiség operátorának, akkor azt mondják, hogy a rendszer az adott mennyiség szempontjából **kevert állapotban** van. Ilyenkor az adott mennyiség értékének mérése különböző eredményekre vezethet. Példa: Legyen  $\Phi_1$  és  $\Phi_2$  a rendszer  $\hat{H}$  Hamilton-operátorának két normált sajátvektora, melyekhez két különböző,  $E_1$  illetve  $E_2$  sajátérték tartozik! Ekkor a fentiek alapján  $\langle \Phi_1, \Phi_2 \rangle = 0$ . Tegyük fel, hogy a rendszer  $\Psi$  normált állapotvektora e két energia-sajátvektor lineáris kombinációja:

$$\Psi = c_1 \cdot \Phi_1 + c_2 \cdot \Phi_2$$

(Itt  $c_1, c_2$  két komplex szám, amelyekről kikötjük, hogy egyikük se legyen nulla.) Ebben az esetben a rendszer energiájának mérése két eredményt adhat:  $E_1$ -et és  $E_2$ -t. Mekkora valószínűséggel kapjuk egyik vagy másik eredményt? Ez a  $c_1$  és  $c_2$  együtthatók értékétől függ. Ezek az együtthatók mutatják meg, hogy „mekkora súllyal van jelen” a  $\Phi_1$  ill.  $\Phi_2$  energia-sajátvektor a rendszer  $\Psi$  állapotvektorában. A két együttható abszolútértékének négyzetösszege 1, ugyanis:

$$\begin{aligned} 1 = \langle \Psi, \Psi \rangle &= \langle c_1 \cdot \Phi_1 + c_2 \cdot \Phi_2, c_1 \cdot \Phi_1 + c_2 \cdot \Phi_2 \rangle \\ &= \langle c_1 \cdot \Phi_1, c_1 \cdot \Phi_1 \rangle + \langle c_1 \cdot \Phi_1, c_2 \cdot \Phi_2 \rangle + \langle c_2 \cdot \Phi_2, c_1 \cdot \Phi_1 \rangle + \langle c_2 \cdot \Phi_2, c_2 \cdot \Phi_2 \rangle \\ &= c_1^* c_1 \langle \Phi_1, \Phi_1 \rangle + c_1^* c_2 \langle \Phi_1, \Phi_2 \rangle + c_2^* c_1 \langle \Phi_2, \Phi_1 \rangle + c_2^* c_2 \langle \Phi_2, \Phi_2 \rangle = c_1^* c_1 + c_2^* c_2 = |c_1|^2 + |c_2|^2 \end{aligned}$$

Az egyes energiák mérési valószínűségét  $|c_1|^2$  és  $|c_2|^2$  adja:

$$P(E_1) = |c_1|^2$$

$$P(E_2) = 1 - |c_1|^2 = |c_2|^2$$

Röviden foglalkozunk még azzal az esettel, amikor egy operátorhoz több különböző sajátvektor is tartozik ugyanazon sajátértékkel. Ilyenkor ezen sajátvektorok valamennyi lineáris kombinációja is sajátvektor ugyanazzal a sajátértékkel. Ha pl. a  $\Phi, \Psi$  állapotvektorokra  $\hat{A}\Phi = \lambda \cdot \Phi$  és  $\hat{A}\Psi = \lambda \cdot \Psi$  teljesül, akkor tetszőleges  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  esetén

$$\hat{A}(\alpha \cdot \Phi + \beta \cdot \Psi) = \alpha \cdot \hat{A}\Phi + \beta \cdot \hat{A}\Psi = \alpha \cdot \lambda \cdot \Phi + \beta \cdot \lambda \cdot \Psi = \lambda \cdot (\alpha \cdot \Phi + \beta \cdot \Psi)$$

Az azonos sajátértékhez tartozó sajátvektorok (alkalmilag a nullvektort is közéjük számítva) tehát egy alteret alkotnak az állapotvektorok terében. Ha ennek az alternek a dimenziója véges  $N > 1$  érték, akkor a sajátállapot  $N$ -szeres **elfajulásáról** beszélnek.

Az azonos sajátértékhez tartozó, egymástól lineárisan független  $\Phi, \Psi$  sajátvektorok nem feltétlenül ortogonálisak egymásra. De  $\Phi$ -t és  $\Psi$ -t lineárisan kombinálva  $\Phi$  helyett bevezethetünk egy másik,  $\Phi'$ -vel jelölt sajátvektort, amely már ortogonális lesz  $\Psi$ -re:

$$\Phi' = \Phi - \frac{\langle \Psi, \Phi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \cdot \Psi$$

$$\langle \Phi', \Psi \rangle = \langle \Phi - \frac{\langle \Psi, \Phi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \cdot \Psi, \Psi \rangle = \langle \Phi, \Psi \rangle - \frac{\langle \Psi, \Phi \rangle^*}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \cdot \langle \Psi, \Psi \rangle = \langle \Phi, \Psi \rangle - \langle \Phi, \Psi \rangle = 0$$

(A  $\Phi'$  vektor képzése analóg azzal, ahogyan egy térbeli vektornak egy másik vektorra merőleges összetevőjét szokás képezni: a vektorból levonjuk annak a másik vektorra eső vetületét.)

Egy általánosabb kijelentés is érvényes: Ha az azonos sajátértékhez tartozó sajátvektorok altere véges vagy megszámlálhatóan végtelen dimenziós, akkor ebben az alterben mindig kijelölhetünk egy olyan bázist, amelynek

bármely két tagja ortogonális egymásra. Így akkor is dolgozhatunk egymásra merőleges sajátvektorokkal (ami sok esetben előnyös), ha elfajult állapotok is előfordulnak.

### Teljes ortonormált rendszer

Egy Hilbert-tér valamely vektoraiból álló  $X$  halmazt ortonormált halmaznak nevezik, ha a halmaz összes vektora normált, és ortogonális a halmaz összes többi vektorára. Azaz bármely  $\Phi, \Psi \in X$  esetén fennáll az alábbi:

$$\langle \Phi, \Psi \rangle = \begin{cases} 1 & \text{ha } \Phi = \Psi \\ 0 & \text{ha } \Phi \neq \Psi \end{cases}$$

Az  $X$  ortonormált halmazt **teljes ortonormált rendszernek** nevezik, ha a Hilbert-térnek nincs olyan vektora, amely  $X$  összes elemére ortogonális lenne.

Fentebb láttuk, hogy egy hermitikus operátor különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorai ortogonálisak. Az azonos sajátértékhez tartozó sajátvektorok alterében (ha az legfeljebb megszámlálhatóan végtelen dimenziójú) ortogonális bázis vehető fel. Gyakran előfordul, hogy egy fizikai mennyiséghez társított hermitikus operátor normált sajátvektoraiból teljes ortonormált rendszer alkotható. Most ezzel az esettel foglalkozunk.

Tegyük fel, hogy a kérdéses mennyiséghez tartozó  $\hat{A}$  operátor sajátvektoraiból olyan teljes ortonormált rendszert tudunk képezni, mely megszámlálhatóan végtelen sok elemet tartalmaz. (Utóbbi azt jelenti, hogy a végtelen sok elem pozitív egész számokkal „sorszámozható”). Jelölje  $e$  rendszer elemeit  $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  stb. A vizsgált rendszer tetszőleges állapota egyértelműen „előállítható” a teljes ortonormált rendszer segítségével a következő értelemben: Ha a vizsgált rendszer állapotvektora  $\Psi$ , és  $c_i$  jelöli a  $\langle \Phi_i, \Psi \rangle$  skaláris szorzat értékét (tetszőleges pozitív  $i$  esetén), akkor fennáll az alábbi egyenlőség:

$$\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \cdot \Phi_i$$

Ez az egyenlet úgy értendő, hogy a  $\sum_{i=1}^n c_i \cdot \Phi_i$  összeg a skaláris szorzat által indukált normában konvergál  $\Psi$ -hez, azaz:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\| \Psi - \sum_{i=1}^n c_i \cdot \Phi_i \right\| = 0$$

Ha a  $\Psi$  állapotvektor normált, akkor fennáll, hogy

$$\sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 = 1$$

Ha elfajulás nem lép fel (azaz egyik sajátértékhez sem tartozik több, egymástól lineárisan független sajátvektor), akkor a  $|c_i|^2$  mennyiségek ezúttal is megadják, hogy a fizikai mennyiség mérése során mekkora valószínűséggel kapjuk eredményként az egyes  $\Phi_i$  sajátvektorokhoz tartozó  $\lambda_i$  sajátértékeket:

$$P(\lambda_i) = |c_i|^2$$

Ha fellép elfajulás, akkor a fenti kifejezés kissé módosul. Tegyük fel például, hogy valamely  $\lambda_i$  sajátértékhez  $N$  számú elem tartozik a sajátvektorokból képzett teljes ortonormált rendszerben ( $N$ -szeres elfajulás)! Jelölje ezeket az elemeket  $\Phi_k, \Phi_{k+1}, \dots, \Phi_{k+N-1}$ , a hozzájuk tartozó együttthatók jele tehát  $c_k, c_{k+1}, \dots, c_{k+N-1}$ . Annak valószínűsége, hogy az  $\lambda_i$  értéket kapjuk mérési eredményként:

$$P(\lambda_i) = \sum_{i=0}^{N-1} |c_{k+i}|^2 = |c_k|^2 + |c_{k+1}|^2 + \dots + |c_{k+N-1}|^2$$

### A fizikai mennyiségek várható értéke

Ha a rendszerünk valamely fizikai mennyiség szempontjából egy „kevert” állapotban van, akkor feltehetjük azt a kérdést, hogy mekkora a mennyiség várható értéke ebben az állapotban. Vagyis milyen értéket kapnánk akkor, ha a

rendszer sok példányban állna rendelkezésünkre, minden példány azonos állapotban volna, és mindegyik példányon lemérnénk a kérdéses mennyiség nagyságát, majd a sok mérés eredményét kiátlagolnánk.

A várható érték biztosan létezik, ha a mennyiséghez tartozó  $\hat{A}$  operátor korlátos. Ezt az alábbiakban feltételezni fogjuk. Az operátor korlátossága annyit tesz, hogy létezik olyan  $K$  nemnegatív valós szám, hogy tetszőleges  $\Psi$  állapotvektor esetén

$$\frac{\|\hat{A}\Psi\|}{\|\Psi\|} \leq K$$

A kérdéses mennyiség  $\bar{A}$  várható értéke a normált  $\Psi$  állapotban:

$$\bar{A} = \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle$$

Tegyük fel, hogy a rendszer  $\Psi$  állapotvektorát elő tudjuk állítani  $\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \cdot \Phi_i$  alakban, ahol a  $\Phi_i$  vektorok a kérdéses mennyiség sajátvektorai! A  $\Phi_i$ -hez tartozó sajátértéket  $\lambda_i$ -vel fogjuk jelölni. Erre az esetre fentebb megadtuk a mennyiség lehetséges értékeinek valószínűségét. Egy valószínűségi változó várható értéke a lehetséges értékeknek azok valószínűségével súlyozott összege, azaz a várható értékre az alábbiaknak kell teljesülnie:

$$\bar{A} = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \cdot P(\lambda_i) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \cdot |c_i|^2$$

Ez összhangban van a várható értékre fentebb adott formulánkkal, ugyanis korlátos operátorra felírhatók a következők:

$$\begin{aligned} \bar{A} = \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle &= \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} c_i \cdot \Phi_i, \hat{A} \left( \sum_{j=1}^{\infty} c_j \cdot \Phi_j \right) \right\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} c_i \cdot \Phi_i, \sum_{j=1}^{\infty} c_j \cdot \hat{A}\Phi_j \right\rangle \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} c_i \cdot \Phi_i, \sum_{j=1}^{\infty} c_j \cdot \lambda_j \cdot \Phi_j \right\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} c_i^* \cdot c_j \cdot \lambda_j \cdot \langle \Phi_i, \Phi_j \rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} c_i^* \cdot c_j \cdot \lambda_j \cdot \delta_{ij} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i^* \cdot c_i \cdot \lambda_i = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 \cdot \lambda_i \end{aligned}$$

### Operátorok kommutátora

Ha  $\hat{A}$  és  $\hat{B}$  két operátor, akkor bevezethetjük a két operátor  $\hat{A}\hat{B}$  szorzatát (kompozícióját) oly módon, hogy ez is egy leképezés legyen, amely állapotvektorhoz állapotvektort rendel. Ha  $\Psi$  egy állapotvektor, akkor

$$\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi)$$

Könnyen belátható, hogy az  $\hat{A}\hat{B}$  leképezés is lineáris, tehát ez is egy operátor.

Az  $\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi)$  és a  $\hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{B}(\hat{A}\Psi)$  vektorok általában nem azonosak, tehát az  $\hat{A}\hat{B}$  operátor általában nem azonos a  $\hat{B}\hat{A}$  operátorral.

Az  $\hat{A}\hat{B}$  és a  $\hat{B}\hat{A}$  operátorok  $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$  különbsége az a leképezés, amely a  $\Psi$  állapotvektorhoz az  $(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi = \hat{A}\hat{B}\Psi - \hat{B}\hat{A}\Psi$  állapotvektort rendel. Ez is lineáris leképezés, tehát operátor. Ezt az operátort az  $\hat{A}$  és  $\hat{B}$  operátorok **kommutátorának** hívják, és az  $[\hat{A}, \hat{B}]$  jelölést alkalmazzák rá:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Vannak olyan operátorok, amelyek egymással felcserélhetőek, azaz kommutátoruk a nulloperátor. Tegyük fel, hogy  $\hat{A}$  és  $\hat{B}$  ilyenek, azaz  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ! Tegyük fel ezen kívül, hogy az  $\hat{A}$  operátornak van olyan  $\lambda$  sajátértéke, amelynél nem lép fel elfajulás, azaz  $\lambda$ -hoz nem tartozik több, egymástól lineárisan független sajátvektor! Ha  $\Phi$  az  $\hat{A}$  operátor  $\lambda$ -hoz tartozó sajátvektora, akkor  $\Phi$  sajátvektora a  $\hat{B}$  operátornak is. Ez a következő módon látható be:

$$\hat{A}(\hat{B}\Phi) = \hat{A}\hat{B}\Phi = \hat{B}\hat{A}\Phi = \hat{B}(\lambda \cdot \Phi) = \lambda \cdot \hat{B}\Phi$$

Ha  $\hat{B}\Phi = 0$ , akkor  $\Phi$  sajátvektora  $\hat{B}$ -nek nulla sajátértékkal. Ha  $\hat{B}\Phi \neq 0$ , akkor  $\hat{B}\Phi$  sajátvektora  $\hat{A}$ -nak  $\lambda$  sajátértékkal. De mivel az  $\lambda$  sajátértéknél nem lép fel elfajulás, így a  $\hat{B}\Phi$  vektor a  $\Phi$  vektorral lineárisan összefüggő, azaz létezik olyan  $\mu$  szám, hogy

$$\hat{B}\Phi = \mu \cdot \Phi$$

Ez viszont azt jelenti, hogy  $\Phi$  a  $\hat{B}$  operátornak is sajátvektora  $\mu$  sajátértékkal.

Ez azt jelenti, hogy ha a vizsgált rendszer a  $\Phi$  vektorral jellemezhető állapotban van, akkor az  $\hat{A}$  és  $\hat{B}$  operátoroknak megfelelő két fizikai mennyiség mindegyikének határozott értéke van.

### A fizikai mennyiségek operátorainak megadása, felcserélési relációk

A különféle fizikai mennyiségekhez rendelt operátoroktól eddig csupán azt követeltük meg, hogy azok legyenek hermitikusak. Ahhoz, hogy valamely konkrét fizikai rendszer kvantummechanikai leírását megadhassuk, az egyes operátorok hozzárendelési szabályára is szükségünk lesz. Ennek meghatározásával foglalkozunk a továbbiakban.

Valamely rendszer kvantummechanikai állapotait több különböző Hilbert-tér vektorainak is megfeleltethetjük (többféleképpen is „reprezentálhatjuk”). Ugyanazon fizikai mennyiség operátora különböző reprezentációk esetén más és más lesz. Minden esetben teljesülni kell azonban a **felcserélési relációknak**. Ezek az egyes helykoordináták és impulzuskoordináták operátorára a következőket írják elő:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{x}, \hat{p}_z] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_z] = [\hat{z}, \hat{p}_x] = [\hat{z}, \hat{p}_y] = 0$$

Röviden: minden hely- és impulzuskoordináta operátora kommutál egymással, kivéve az „összetartozó” hely- és impulzuskoordinátákat, melyek kommutátora az egységoperátor  $i\hbar$ -szorosa (magát az egységoperátort fent ki sem írtuk). A  $\hbar$  jel itt a racionalizált Planck-állandót jelöli, amelynek értékét úgy kapjuk, hogy a „közönséges” Planck-állandót  $2\pi$ -vel osztjuk:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Legyen a vizsgált rendszerünk egyetlen részecske! Ha ennek állapotát a korábban bevezetett  $\Psi(\mathbf{r})$  állapotfüggvénnyel jellemezzük, akkor a hely- és impulzuskoordináták operátorának választhatjuk az alábbi leképezéseket:

$$\hat{x}: \Psi(\mathbf{r}) \mapsto x \cdot \Psi(\mathbf{r})$$

$$\hat{y}: \Psi(\mathbf{r}) \mapsto y \cdot \Psi(\mathbf{r})$$

$$\hat{z}: \Psi(\mathbf{r}) \mapsto z \cdot \Psi(\mathbf{r})$$

$$\hat{p}_x: \Psi(\mathbf{r}) \mapsto -i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial x}$$

$$\hat{p}_y: \Psi(\mathbf{r}) \mapsto -i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial y}$$

$$\hat{p}_z: \Psi(\mathbf{r}) \mapsto -i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial z}$$

Ezen operátorok hozzárendelési szabályának ismeretében meg tudjuk konstruálni más, szintén fizikai mennyiségekhez társítható operátorok hozzárendelési szabályát is.

Tegyük fel például, hogy a részecskénk egy konzervatív erőterben mozog! „Klasszikusan” a részecskét  $m$  tömegű pontnak tekintjük, melynek kinetikus energiája  $K = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$ . Legyen a mező olyan, hogy az  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  helyvektorú pontban a részecske potenciális energiája  $V = k \cdot (x^2 + y^2 + z^2)$  (háromdimenziós harmonikus oszcillátor)! A részecske teljes energiája:

$$E = K + V = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + k \cdot (x^2 + y^2 + z^2)$$

A kvantummechanika az energiához a Hamilton-operátort társítja. Ennek hozzárendelési szabályát megkapjuk, ha a fenti kifejezésben a hely- és impulzuskoordináták helyére az ezekhez tartozó operátort írjuk:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + k \cdot (\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2)$$

$$\hat{H}\Psi = \left[ \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + k \cdot (\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2) \right] \Psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + k \cdot (x^2 + y^2 + z^2) \right] \Psi$$

## A Schrödinger-egyenlet

Valamely rendszer kvantummechanikai jellemzésének egyik legfontosabb mozzanata, hogy meghatározzuk a rendszer „energiaszintjeit” (a lehetséges energiákat) és a hozzájuk tartozó „pályákat” (állapotfüggvényeket). Ily módon meghatározhatók pl. a hidrogénatom elektronjának lehetséges energiái (ebből pedig a hidrogénatom sugárzási spektruma) és a hozzájuk tartozó elektronpályák. Ehhez a Hamilton-operátor sajátérték-egyenletét kell megoldanunk, azaz meg kell keresnünk azokat az  $E$  értékeket és  $\Psi$  állapotfüggvényeket, amelyet megoldják az alábbi egyenletet:

$$\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$$

A fenti egyenletet **időfüggetlen Schrödinger-egyenletnek** is szokás nevezni.

Feltehetjük azt a kérdést is, hogy adott kezdeti állapotból induló rendszer állapota hogyan változik a későbbiekben. Vegyük ismét egyetlen részecske példáját, amelynek állapotát adott pillanatban egy olyan állapotfüggvénnyel jellemezhetjük, amelynek változói a három térkoordináta, azaz valamely  $t$  pillanatban a részecske állapotfüggvénye egy  $\mathbf{r} \mapsto \Psi_t(\mathbf{r})$  hozzárendelés!

Ezt sokszor úgy fejezik ki, hogy az „állapotfüggvényt” négyváltozós (három tér- és egy időváltozóval rendelkező) függvénynek tekintik. Ez a függvény tehát leírja a vizsgált részecske teljes „történetét”. A négyváltozós „állapotfüggvény” – amit helyesebb lenne „állapotváltozás-függvénynek” nevezni – fogalma azonban félrevezető. A fizikai mennyiségek operátorai nem e négyváltozós függvények terén vannak értelmezve. A négyváltozós „állapotfüggvény” nem is normálható, mert ha az időváltozó szerint integrálni akarjuk  $-\infty$ -tól  $+\infty$ -ig, az integrál divergálni fog. Szerencsésebb, ha a  $t$  időkoordinátát nem az állapotfüggvény egyik változójának, hanem egy paraméternek tekintjük. A paraméter minden egyes értékéhez (azaz minden időponthoz) tartozik egy háromváltozós állapotfüggvény, amely normálható, és amelyre a különböző operátorok hathatnak.

A jelölésben azonban úgy fogjuk megjeleníteni a  $t$  paramétert, mintha az az állapotfüggvény egyik változója lenne. A paraméterérték szerinti deriváltat pedig úgy fogjuk jelölni, mintha az egy négyváltozós függvény egyik parciális deriváltja lenne. Azaz a következő jelölést alkalmazzuk:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Psi_{t+\Delta t} - \Psi_t}{\Delta t} = \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Ez „technikailag” indokolt, mert a számítások menete éppen olyan lesz, mintha parciális deriváltat képeznénk.

Most már fel tudjuk írni az állapotfüggvény időbeli változását megadó egyenletet (a rendszer kvantummechanikai „mozgásegyenletét”), amelyet **időfüggő Schrödinger-egyenletnek** szoktak nevezni:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása sokkal egyszerűbbé válhat, ha ismerjük az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásait. Zárásképpen ezt az állítást fogjuk illusztrálni.

Tegyük fel, hogy a Hamilton-operátor időtől független, és a vizsgált rendszer a  $t = 0$  pillanatban valamely  $\Phi$  „energia-sajátállapotban” van  $E$  energiával! Tehát  $\hat{H}\Phi = E \cdot \Phi$  és  $\Psi(\mathbf{r}; 0) = \Phi(\mathbf{r})$ . Ebben az esetben a rendszer a



későbbiekben is energia-sajátállapotban marad, csupán a sajátvektor komplex fázisa forog  $\frac{E}{\hbar}$  körfrekvenciával, ami nem jelent állapotváltozást:

$$\Psi(\mathbf{r}; t) = \Phi(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Tegyük fel most, hogy a rendszer kezdetben nincs energia-sajátállapotban, de állapotfüggvényét elő tudjuk állítani a Hamilton-operátor ortonormált sajátfüggvényeinek szuperpozíciójaként:

$$\Psi(\mathbf{r}; 0) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \cdot \Phi_j(\mathbf{r})$$

Az egyes  $c_j$  együtthatókra fennáll:

$$c_j = \langle \Phi_j(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}; 0) \rangle$$

Ebben az esetben az állapotfüggvény időbeli változása úgy fogható fel, hogy a szuperpozícióban szereplő valamennyi összetevőnek csak a komplex fázisa forog a rá jellemző frekvenciával. Azaz az állapotfüggvény valamely  $t$  pillanatban így adható meg:

$$\Psi(\mathbf{r}; t) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \cdot e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t} \cdot \Phi_j(\mathbf{r})$$