

A kvantummechanika szabályai

A Stern-Gerlach típusú kísérletek atomnyalábokra, a fotonok polarizációjára vonatkozó kísérletekből és számos egyéb kísérleti tapasztalat alapján meg lehet fogalmazni a kvantummechanika olyan matematikai modelljét, amellyel jelenlegi tudásunk szerint minden kvantummos jelenséget le lehet írni.

1. *Egy kvantumfizikai rendszer állapotait egy lineáris vektortér elemeivel jellemezzük.*

Az elemeket – vagyis az állapotokat – szokás vektornak is nevezni: az eredetileg P. Dirac angol fizikus által bevezetett és manapság teljesen elterjedt jelölésük a $|\psi\rangle$ ketnek nevezett szimbólumban szereplő szám vagy betű, pl. $|\psi\rangle$. A lineáris vektortér tulajdonságai alapján, ha van két állapot, akkor általában azok lineáris kombinációja is egy lehetséges állapot:

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle.$$

(Ez lényegesen különbözik a klasszikus mechanika állapotfogalmától, ahol az állapot a részecskéket jellemző (általános) koordináták és a sebességek, vagy az impulzusok együttese jellemzi az állapotot, és ilyen szuperpozíciós törvény nem érvényes) A vektortér lineárisan független elemek száma a *dimenzió*. A kvantummechanikában véges vagy megszámlálhatóan végtelen dimenziós terek fordulnak elő. A tér eleme a zéró vektor is, de az nem jellemez fizikai állapotot, ezért ezt egyszerűen 0 -val jelöljük. Egy adott kvantumfizikai problémához egy alkalmasan választott lineáris tér tartozik.

2. A fizikai állapotok tere egy úgynevezett belső szorzat tér, azaz *értelmezve van tetszőleges két vektor belső vagy skaláris szorzata, amely egy komplex szám*. Ezt két ekvivalens módon is fogjuk írni: $(|\psi\rangle, |\varphi\rangle)$ illetve $\langle\psi|\varphi\rangle$ vagyis

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle) \equiv \langle\psi|\varphi\rangle = c \in \mathbb{C}. \quad \#$$

Ennek a c komplex számnak a neve *valószínűségi amplitúdó, amely* egy sajátosan kvantumfizikai jellegű mennyiség. A fenti c abszolút értékének a négyzete $|\langle\varphi|\psi\rangle|^2 = |c|^2 \geq 0$ adja annak a *valószínűségét*, hogy egy eredetileg $|\psi\rangle$ állapotban lévő rendszer mennyire van ugyanakkor egy másik $|\varphi\rangle$ állapotban. Természetes elvárás, hogy annak a valószínűsége, hogy a $|\psi\rangle$ állapotban lévő rendszer ugyanabban a $|\psi\rangle$ állapotban van legyen 1 , ami a biztos esemény valószínűsége a matematikában. Ezért előírjuk a $|\langle\psi|\psi\rangle|^2 = 1$ tulajdonságot, illetve egy célszerű konvencióval azt, hogy legyen $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Ezt a tulajdonságot, amiről azt mondjuk, hogy $|\psi\rangle$ egyre vagy egységre normált, tehát rendszerint megkívánjuk az elemektől.

A valószínűségi amplitúdó a közönséges belső szorzathoz hasonló tulajdonságokkal rendelkezik, azaz a második tényezőben lineáris:

$$(|\psi\rangle, |\varphi\rangle + |\chi\rangle) = \langle\psi|\varphi\rangle + \langle\psi|\chi\rangle \quad \langle\psi|a\varphi\rangle = a\langle\psi|\varphi\rangle, \quad \#$$

ahol a egy tetszőleges komplex szám, de a tényezők sorrendjének fölcserélésekor az eredmény a komplex konjugált szám:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*, \quad \#$$

ahol $*$ a komplex konjugálást jelenti. Az ilyen típusú komplex értékű belső szorzatot hermitikusnak szokás nevezni C. Hermite francia matematikus nyomán. Ebből következően $\langle\psi|\psi\rangle$ valós, és posztuláljuk, hogy

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \text{ és } \langle\psi|\psi\rangle = 0 \text{ akkor és csak akkor, ha } |\psi\rangle = 0 \quad \#$$

Abból, hogy előírjuk, hogy a belső szorzat legyen lineáris a második tényezőben és a hermitikus tulajdonságból következik, hogy a belső szorzat konjugált lineáris az első tényezőben:

$(a|\psi\rangle, |\varphi\rangle) = a^*(|\psi\rangle, |\varphi\rangle) = a^*\langle\psi|\varphi\rangle$, azaz az első tényezőből az azt szorzó szám komplex konjugáltja emelendő ki.

Meg lehet mutatni, hogy érvényes az ún. Cauchy-Bunyakovszkij-Schwarz egyenlőtlenség:

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle \quad \#$$

A $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ elemekről azt mondjuk, hogy ortogonális és normált (röviden ortonormált) rendszert alkotnak az n dimenziós térben, ha egyikük sem a nulla vektor, és

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i = j \\ 0 & \text{ha } i \neq j \end{cases} \quad \# \text{ (ONB)}$$

Az így megadott vektorrendszer egy úgynevezett bázist alkot, azaz lineáris kombinációjukkal bármely vektor előállítható. Végtelen dimenziós terekben végtelen sok ilyen páronként ortogonális és normált vektor létezik. Végtelen dimenziós teret kell használni, ha pl. egy részecske helyéről akarunk információt megadni a kvantummechanikában, amely rendszerint végtelen sok lehetőséget jelent. Annak ellenére hogy egy részecske térbeli helyének kontinuum sok lehetősége van, érdekes módon azt mégis meg lehet adni megszámlálhatóan végtelen számú valószínűségi amplitúdóval.

Az állapotokat megadó lineáris bázis teret Hilbert térnek nevezzük D. Hilbert német matematikusról. (Végtelen dimenziós esetben a Hilbert tér definícióját még kissé finomítani kell.) A Hilbert tér matematikai elméletének a kvantummechanikában játszott alapvető szerepét Neumann János ismerte föl és dolgozta ki "A kvantummechanika matematikai alapjai" c. könyvében.

3. A kvantumos részecskék állapotait rendszerint egy berendezéssel vizsgáljuk, ez a bejövő állapotot egy másik állapotba transzformálja. Ezért egy mérőberendezést a kvantummechanikában egy A lineáris transzformációval más néven operátorral írunk le, amely valamely állapothoz egy másik állapotot rendel:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle = A|\psi\rangle$$

Bizonyos bemenő állapotok nem változnak, a kimenet biztosan megjósolható, s lényegében megegyezik a bemenő állapottal. Ezeket a berendezés sajátállapotainak nevezzük. A lehetséges kimenetek pedig a bemenő részecske állapotától függetlenül mindig a berendezés sajátállapotainak valamelyike. Ezek ortogonálisak, $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = 0$ ha $i \neq j$ illetve az előző konvenció szerint $\langle\varphi_i|\varphi_i\rangle = 1$, azaz a kimenetek ortonormált bázist alkotnak a ref: ONB előírásnak megfelelően.

A kimenetekhez azon kívül, hogy azok újabb állapotok, bizonyos valós számokat rendelünk, ezek a mérési eredmények. Pl. a spin értéke bizonyos irányban, lehet $\hbar/2$ vagy $-\hbar/2$, vagy a mért koordináta értéke lehet valamilyen vonatkoztatási ponttól orgó, valamilyen irányban pl. x tengely mentén mért előjeles távolság, azaz x koordináta.

Ennek matematikai megfelelője a következő: sajátállapotok, (sajátvektorok) azok, amelyekre

$$A|\varphi\rangle = \alpha|\varphi\rangle$$

α egy sajátérték, $|\varphi\rangle$ pedig a hozzá tartozó sajátvektor. *A fizikai mennyiségek mért eredményei az azokat reprezentáló operátorok sajátértékei, a mérés után kimenetként jelentkező állapotok pedig a megfelelő sajátvektorok.*

A kvantummechanikában a mérőberendezésekhez rendelt fizikai mennyiségeket úgynevezett *önadjungált* operátorok írják le, amelyeknek a következő tulajdonsága van:

$$(|\psi\rangle, A|\varphi\rangle) = (A|\psi\rangle, |\varphi\rangle) = \langle\psi|A|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$

Feladat: Mutassuk meg, hogy önadjungált operátorok sajátértékei valósak

Mutassuk meg, hogy különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorok ortogonálisak.

Alapvető fontosságú a kvantummechanikában az ún. spektráltétel (lásd lineáris operátorok elmélete): Egy A önadjungált operátor sajátvektoraival egy teljes ortonormált bázis adható meg a Hilbert téren, azaz A sajátvektorai segítségével bármely vektor kifejezhető. Másképpen, véges, n dimenziós térben létezik olyan n db páronként ortogonális és normált $|u_k\rangle$ $k = 1, 2 \dots n$ vektor (állapot), amelyekre $A|u_k\rangle = \alpha_k|u_k\rangle$ és érvényes az $\langle u_i|u_k\rangle = \delta_{ik}$ ortogonalitási és normáltság. A tétel a fogalmak megfelelő finomításával végtelen dimenziós térben is érvényes.

Azt, hogy hogyan kell egy konkrét fizikai mennyiséghez tartozó operátort konkrétan megadni, később vizsgáljuk.

4. Ha nem végzünk mérést, az állapotok akkor is változnak időben. Vagyis mialatt az idő múlik, az állapot változik: a változást a valós t paraméterhez hozzárendelt $t \rightarrow |\Psi(t)\rangle$ függvény adja, ahol a függvény lehetséges értékei az állapottér vektorai. Az időbeli változást egy differenciálegyenlet, a *Schrödinger egyenlet*, másnéven dinamikai egyenlet írja le, melynek alakja:

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H|\Psi(t)\rangle,$$

ahol H egy kitüntetett szerepet játszó speciális operátor. H éppen az energia mérésének megfelelő berendezéshez tartozó operátor, melynek neve történeti okok miatt Hamilton-operátor. A kvantummechanikában a Newton egyenlet helyére a Schrödinger egyenlet lép. A Schrödinger egyenlet fontos tulajdonsága, hogy lineáris, azaz két lehetséges megoldás lineáris kombinációja is megoldás. Miért van több lehetséges megoldás? Azért, mert az egyenlet, mint minden differenciálegyenlet általános megoldása ún. integrációs állandókat tartalmaz, annyit ahány dimenziós a $|\Psi(t)\rangle$ -t tartalmazó Hilbert tér. Ezeket az integrációs állandókat a kezdeti föltételek határozzák meg, azaz a $|\Psi(t=0)\rangle$ vektor, illetve ennek komponensei valamely bázisban. Két különböző megoldás tehát különböző kezdeti föltételeket jelent, s ezek lineáris kombinációja ismét más kezdeti föltételhez tartozik.