3. A KVANTUMMECHANIKA MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI ALAPJAI

Az előző fejezetben már láttuk, hogy Schrödinger hullámegyenlete képes a mikrofizikai objektumok energiaállapotaiban jelentkező kvantumos (diszkrét) jelenségeket is magyarázni. Röviden megemlítettük azt is, hogy a stacionárius Schrödinger egyenlet a matematikában már régóta ismert ún. sajátérték egyenletnek felel meg.

A fizikai mennyiségek értékének kvantumos, diszkrét változása ismeretlen volt a klasszikus fizikában, ezért ott a fizikai mennyiségeket folytonos, differenciálható függvényekkel írtuk le. A kisméretű mikroobjektumok vizsgálata megmutatta azonban, hogy a természetben a fizikai mennyiségek egyrészt folytonos, másrészt diszkrét értékkészlettel rendelkeznek, ezért a nekik megfelelő matematikai konstrukcióknak tükrözni kell e fontos tényt.

3.1. OPERÁTOROK ÉS REGULÁRIS FÜGGVÉNYEK

Dirac volt az, aki elsőként ismerte fel teljes általánosságban, hogy a **fizikai mennyiségek** matematikai reprezentánsai nem a klasszikus fizika szokásos függvényei, hanem bizonyos **operátorok**, amelyek a **fizikai állapotot** reprezentáló **reguláris függvények** terén, vagy más néven, a **Hilbert-téren** hatnak. Az a tér, amelyen az $\hat{O}$ operátor hat, az illető operátor $\mathcal{D}_O$ *értelmezési tartománya.*

Egy f *függvény* számhoz (x) számot (y) rendel: $y = f(x)$. Példa: $0 = \sin \pi$.

Egy $\hat{O}$ *operátor* függvényhez (f) függvényt (g) rendel: $g(x) = \hat{O}f(x)$. Példák: $g(x) = \frac{d}{dx}f(x)$, $g(x) = \sqrt{f(x)}$, stb.

Az operátorok a függvényekhez képest az absztrakció magasabb fokát képviselik, ezért nyilván sokkal gazdagabb lehetőséget kínálnak az elméleti leírás számára.

A fizikai mennyiségeket leíró (reprezentáló) **operátorok** nem lehetnek tetszőlegesek.

Az anyagi részecskékhez rendelt valószínűségi hullámok interferenciára való képessége (ld. például Davison-Germer kísérlet) vezetett el a szuperpozíció elv felállításához, amely kimondja, hogy két különböző állapot összege, szuperpozícója is egy lehetséges állapot (azaz a Schrödinger egyenletnek megoldása). Ahhoz, hogy a *szuperpozíció elve* teljesülhessen, szükséges az, hogy a fizikai mennyiségeket reprezentáló operátorok *lineárisak* legyenek. Egy $\hat{O}$ operátor lineáris, ha a következő tulajdonságokkal rendelkezik ($\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{D}_O$):

$$\hat{O}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{O}\psi_1 + \hat{O}\psi_2,$$

és

$$\hat{O}(k\psi_1) = k(\hat{O}\psi_1),$$

ahol k egy tetszőleges (komplex) számot jelent.

Láthatjuk tehát, hogy pl. a négyzetgyök vonás ($\sqrt{\ }$), vagy az abszolútérték képzés ($|\ \ |$) nem jöhet szóba, mint fizikai mennyiséget reprezentáló operátor.

Lineáris operátorok *összegét* a következő összefüggés értelmezi ($\psi \in \mathcal{D}_{O_1}, \mathcal{D}_{O_2}$):

$$(\hat{O}_1 + \hat{O}_2)\psi = \hat{O}_1\psi + \hat{O}_2\psi.$$

Lineáris operátorok *szorzata* pedig az operátorok egymás után való alkalmazását jelenti ($\psi \in \mathcal{D}_{O_2}$, $O_2\psi \in \mathcal{D}_{O_1}$):

$$\hat{O}_1\hat{O}_2\psi = \hat{O}_1(\hat{O}_2\psi) \equiv \hat{O}_1 g, \qquad \text{ahol} \quad g = \hat{O}_2\psi.$$

(Így könnyen előfordulhat, hogy $\hat{O}_1\hat{O}_2\psi$ létezik, de $\hat{O}_2\hat{O}_1\psi$ már nem!)

Operátor négyzet az $\hat{O}^2 = \hat{O}\hat{O}$ összefüggést jelenti.

Különösen fontosak az olyan lineáris operátorok, amelyek egy függvényt állandószorosába viszik át:

$$\hat{O}\psi = k\psi, \qquad k = \text{konstans}.$$

Az ilyen egyenletet az operátor *sajátérték egyenlet*ének nevezzük, $\psi-$t az operátor *sajátfüggvényének*, $k-$t pedig a operátor *sajátértéké*nek. Az $\hat{O}$ operátor összes sajátértékét *spektrum*nak nevezzük.

A Schrödinger egyenlet is egy speciális operátor egyenlet, az energia fizikai mennyiséghez rendelt $\hat{H}$ operátor sajátérték egyenlete:

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

Alkossuk meg az energia $\hat{H}$ operátorát egydimenziós mozgás esetére! Legyen az x irányú *impulzus* fizikai mennyiséghez tartozó operátor

$$\hat{p}_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\cdot\ , \tag{20a}$$

azaz az $x-$szel való deriválás.

Az x irányú *elmozdulás (koordináta)* fizikai mennyiséghez tartozó operátor pedig legyen az $x-$szel való szorzás

$$\hat{x} \to x\cdot\ , \tag{20b}$$

amiből azonnal következik, hogy a csupán koordinátákat tartalmazó *potenciál* fizikai mennyiséghez szintén a vele való szorzást rendeljük:

$$\hat{V}(x) \to V(x)\cdot\ . \tag{20c}$$

Az *energia* fizikai mennyiséghez rendelt operátort ezek után könnyen felírhatjuk:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}(x) \qquad \to \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{20d}$$

és így a fenti operátoregyenlet

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad \to \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V\psi = E\psi$$

valóban a (14) alatti Schrödinger egyenletet adja egydimenziós mozgás esetén.

A fizikai mennyiségeket leíró (reprezentáló) operátorok természetesen nem tetszőleges függvényekre hatnak, hanem – az előző fejezettel összhangban – csak olyan függvényekre, amelyek fizikai állapotot jelenthetnek s így a következő tulajdonságokkal rendelkeznek:

– *egyértékűek*,

– *folytonosak*, és

– *normálhatók (korlátosak)*.

Ezen tulajdonságokkal rendelkező függvényeket **reguláris függvények**nek nevezzük. A reguláris függvények összessége **Hilbert-ter**et alkot.

A reguláris függvényekkel végzett számítások során gyakran szerepel két függvény szorzatának integrálja. A jelölések egyszerűsítése érdekében bevezetjük a *skalárszorzat* fogalmát a következő definícióval:

$$\langle f_i|f_k\rangle \equiv \int f_i^* f_k\, dv,$$

ahol az integrálás a függvényváltozók teljes értelmezési tartományára vonatkozik. Amint látjuk, a skalárszorzat olyan művelet, amely két függvényhez egy (komplex) számot rendel.

A skalárszorzat tulajdonságai a következők:

$$\langle\psi_1|\psi_2+\psi_3\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle + \langle\psi_1|\psi_3\rangle,$$

$$\langle\psi_1|0\rangle = 0,$$

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*,$$

$$\langle k\psi_1|\psi_2\rangle = k^*\langle\psi_1|\psi_2\rangle,$$

ahol k egy tetszőleges (komplex) számot jelöl. Ezek a műveletek a vektorok skaláris szorzási szabályaira emlékeztetnek, ezért a skalárszorzat két elemét a *bra* ($\langle\ |$) és *ket* ($|\ \rangle$) részt célszerű egy absztrakt duális vektortér elemeinek tekinteni. [A bra és ket elnevezést Dirac vezette be az angol *bracket* (zárójel) szó felbontásával.] Így beszélhetünk két függvény *ortogonalitás*áról, amennyiben $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$.

Visszatérvén az operátorok sajátérték spektrumához, megjegyezzük, hogy van *folytonos* és *diszkrét* spektrum. Folytonos spektruma van pl. a differenciálás operátornak ($\hat{O} \equiv \frac{d}{dx}$), ui. ennek sajátérték egyenlete a következő:

$$\frac{d}{dx}\psi = k\psi,$$

amelynek megoldása

$$\psi = Ae^{kx},$$

amelyből viszont a korlátosság regularitási követelmény miatt $k = \pm i|k|$ következik. A differenciálás operátor sajátértékeit az összes imaginárius szám képezi, sajátfüggvényei pedig $\psi = Ae^{\pm i|k|x}$ alakúak.

Diszkrét spektrummal rendelkezik az energiaoperátoron kívül pl. a tükrözés (paritás) operátora, amelynek definíciója a következő: $\hat{P}f(x) = f(-x)$. Sajátérték egyenlete:

$$\hat{P}f(x) = kf(x) = f(-x).$$

Alkalmazzuk $\hat{P}-$t még egyszer:

$$\hat{P}^2 f(x) = k^2 f(x) = f(x),$$

azaz $k^2 = 1$, amiből viszont $k = \pm 1$ következik. Tehát a paritás operátor sajátértéke a $+1$ vagy -1 lehet. A paritás operátor sajátfüggvényeit az összes páros ill. páratlan függvény képezi.

Bevezetjük az $\hat{O}^+$ *adjungált* operátor fogalmát a következő definícióval:

$$\langle\psi_1|\hat{O}\psi_2\rangle = \langle\hat{O}^+\psi_1|\psi_2\rangle,$$

ahol $\psi_2 \in \mathcal{D}_O$, $\psi_1 \in \mathcal{D}_{O^+}$, és általában $\mathcal{D}_O \neq \mathcal{D}_{O^+}$. Az olyan operátort, amelyre

$$\hat{O} = \hat{O}^+ \quad \textbf{és} \quad \mathcal{D}_O = \mathcal{D}_{O^+},$$

önadjungált operátornak nevezzük.

A fizikában különlegesen fontosak az olyan operátorok, amelyekre

$$\langle\psi_1|\hat{O}\psi_2\rangle = \langle\hat{O}\psi_1|\psi_2\rangle$$

érvényes minden ψ_1 és $\psi_2 \in \mathcal{D}_O$ elemre. Ezek a **hermitikus** (v. szimmetrikus, ld. később) operátorok.

Az önadjungált operátorok természetesen hermitikusak is, viszont nem minden hermitikus operátor önadjungált is egyben. Ilyen pl. az impulzus operátor, amely hermitikus, de nem önadjungált a végpontokban eltűnő függvények terén [mivel a p^+ operátor terét választhatjuk bővebbre is (ld. később)].

Tétel: *A hermitikus operátorok alkalmasak fizikai mennyiségek reprezentálására* (leírására, ábrázolására), mivel ezek *valós* sajátértékkel rendelkeznek.

Bizonyítás: Egyrészt

$$\langle\varphi|\hat{O}\varphi\rangle = \langle\varphi|k\varphi\rangle = k\,\langle\varphi|\varphi\rangle,$$

másrészt

$$\langle\varphi|\hat{O}\varphi\rangle = \langle\hat{O}\varphi|\varphi\rangle = \langle k\,\varphi|\varphi\rangle = k^*\,\langle\varphi|\varphi\rangle,$$

amiből $k = k^*$ következik. $Q.E.D.$

Megjegyezzük továbbá, hogy *a szorzat operátor adjungáltja* (a definícióból következően) előállítható a tényező operátorok adjungáltjainak fordított sorrendben történő alkalmazásával:

$$(\hat{O}_1\hat{O}_2)^+ = \hat{O}_2^+\hat{O}_1^+.$$

A továbbiakban a fizikai mennyiségeket kizárólag *lineáris hermitikus operátorok*kal fogjuk jelölni, ezért a "kalap" $\hat{}$ megkülönböztető jelet nem fogjuk alkalmazni.

3.1.1. A HILBERT TÉR.

A $\mathcal{H}$ Hilbert tér olyan $\infty-$dimenziós vektortér, amelyben az összes elemnek van véges hossza (normája). A tér elemei az f vektorok, amelyeken alábbi műveletek vannak értelmezve:

i) Skalárral való szorzás.

ha $f \in \mathcal{H}$, és $\lambda \in \mathcal{C}$, akkor $\lambda f \in \mathcal{H}$.

ii) Összeadás.

ha f_1 és $f_2 \in \mathcal{H}$, akkor $f_1 + f_2 \in \mathcal{H}$.

Az *i)* és *ii)* tulajdonságból következik, hogy két $\mathcal{H}-$beli elem lineárkombinációja is $\mathcal{H}-$beli elem: $f = \sum_i c_i f_i \in \mathcal{H}$.

iii) Értelmezett az elemek közötti "belső szorzat", vagy skalárszorzat:

$$\langle f|g\rangle, \quad \text{ahol} \quad f, g \in \mathcal{H},$$

amely a $\mathcal{H}-$beli elemeket a $\mathcal{C}$ komplex számok halmazába képezi le. A skalárszorzat a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

a) $\langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^*$, ahol * komplex konjugálást jelent;

b) $\langle \lambda_1 f|\lambda_2 g\rangle = \lambda_1^* \lambda_2 \langle f|g\rangle$

c) $\langle f_1 + f_2|g\rangle = \langle f_1|g\rangle + \langle f_2|g\rangle$ és $\langle f|g_1 + g_2\rangle = \langle f|g_1\rangle + \langle f|g_2\rangle$.

d) $|\langle f|g\rangle|^2 \leq \langle f|f\rangle\langle g|g\rangle$, Schwarz egyenlőtlenség.

Az (*iii)* tulajdonság alapján definiálható egy "hossz" (vagy *norma*): $\|f\|^2 = \langle f|f\rangle$, és az *ortogonalitás:* $f \perp g$, ha $\langle f|g\rangle = 0$. Az $\{f_i\}$ szet *ortonormált,* ha $\langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}$.

A Hilbert-tér eddigi tulajdonságai hasonlítanak az $\mathcal{E}_n$ véges dimenziós Euklidészi vektortér tulajdonságaihoz. Az eltérés a következő tulajdonságban van:

iv) Egy $\{f_i\}$ vektorsorozat **teljes**, ha bármely $f \in \mathcal{H}$ lineárkombinációként írható fel vele, azaz

$$f = \sum_{i=1}^{\infty} c_i f_i, \quad f_i \in \mathcal{H}, \quad c_i \in \mathcal{C}.$$

A *Riesz-Fischer tétel* az, amely bizonyítja, hogy a fenti összegzés konvergens, azaz a $\mathcal{H}-$tér teljes. A teljesség megfogalmazásának egy másik módja a következő. Tekintsünk egy vektor sorozatot (Cauchy-sorozat): f_1, f_2, .. Tegyük fel, hogy minden $\epsilon > 0-$ra találhatunk egy $l-$et úgy, hogy bármely véges $m-$re $\|f_{l+m} - f_l\| < \epsilon$. E sorozat konvergenciáját bizonyítja a Riesz-Fischer tétel, amelyet illetően a matematikai szakirodalomra utalunk (pl. Szőkefalvi-Nagy: Funkcionálanalízis). Népszerűen megfogalmazva: a tétel a végtelen dimenziós Hilbert-tér teljességét bizonyítja, azaz azt, hogy a végtelen dimenziós térben kiválasztható egy végtelen elemből álló sorozat (*bázis*), amely szerint a tér bármely eleme kifejthető.

Az absztrakt Hilbert-tér egy speciális realizációja (modellje) az $\mathcal{L}_2-$tér, azaz a *négyzetesen integrálható, komplex értékű függvények tere*, ahol a norma véges:

$$\|f\|^2 = \langle f|f\rangle = \int f^*(x)f(x)\,dx < \infty.$$

Itt x bárhány változót jelölhet és az integrálás az f függvény teljes értelmezési tartományára kiterjesztendő.

Arról, hogy az $\mathcal{L}_2-$tér Hilbert tér, úgy győződhetünk meg, hogy belátjuk sorban az *i)–iv)* tulajdonságok érvényességét a négyzetesen integrálható függvények körében is.

3.1.2. OPERÁTOROK.

Definíció: Az operátor leképezési műveletet jelent: egy 'A' operátor a Hilbert-tér bizonyos elemeit Hilbert-térbeli elemekre képezi le. Azon elemek összessége, amelyekre az A operátor, tehát a leképezési művelet, értelmezve van, alkotja az A operátor $\mathcal{D}_A$ *értelmezési tartományát.* Ez általában $\mathcal{H}-$nak egy résztartománya csupán: $\mathcal{D}_A \subset \mathcal{H}$. Azon elemek összessége, amelyek a leképezés során keletkeznek, alkotja az A operátor $\mathcal{R}_A$ *értékkészletét.* Az operátor értékkészlete is általában csak részhalmaza a teljes Hilbert térnek: $\mathcal{R}_A \subset \mathcal{H}$. Röviden tehát: ha $f \in \mathcal{D}_A \subset \mathcal{H}$, akkor $g = Af \in \mathcal{R}_A \subset \mathcal{H}$.

Lényeges körülmény az, hogy általában $\mathcal{R}_A \neq \mathcal{D}_A$!

Példa. Legyen $A \equiv x^2\cdot$, és $\mathcal{H} = \mathcal{L}_2$. A négyzetesen integráható fügvények közül kiválasztjuk az $f(x;\mu) = (x^2+a^2)^{-\mu}$ alakú függvények részhalmazát. Ekkor az A operátor értelmezési tartománya $\mathcal{D}_A = \{f(x;\mu),\, \mu > 1/4\} \subset \mathcal{H}$. Az A operátor értékkészlete viszont kisebb ennél: $\mathcal{R}_A = \{f(x;\mu),\, \mu > 9/4\} \subset \mathcal{D}_A$, amint azt integrálással könnyen ellenőrízhetjük.

Csak *lineáris* operátorok érdekelnek bennünket a *szuperpozíció* elvének érvényesülése miatt. Lineáris egy A operátor akkor, ha $f_1, f_2 \in \mathcal{D}_A$ és $\lambda_1,\, \lambda_2 \in \mathcal{C}$ esetén

$$A(\lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2) = \lambda_1 A f_1 + \lambda_2 A f_2$$

teljesül.

Az operátorokra értelmezve vannak bizonyos műveletek.

1) Számmal való szorzás. Ha A egy $\mathcal{H}-$n ható operátor $\mathcal{D}_A$ értelmezési tartománnyal, akkor λA is egy $\mathcal{H}-$n a következőképpen ható operátor $\mathcal{D}_A$ értelmezési tartománnyal:

$$(\lambda A)f = \lambda(Af).$$

2) Operátor összege. Ha A egy operátor $\mathcal{D}_A$ értelmezési tartománnyal, és B egy operátor $\mathcal{D}_B$ értelmezési tartománnyal, akkor $(A+B)$ is egy operátor $\mathcal{D}_A \cap \mathcal{D}_B$ értelmezési tartománnyal, és a következő definícióval:

$$(A+B)f = Af + Bf, \quad f \in \mathcal{D}_{A+B} = \mathcal{D}_A \cap \mathcal{D}_B.$$

3) Egy A operátor $\mathcal{R}_A$ értékkészletét mindazon $\mathcal{H}-$beli elemek alkotják, amelyeket $A-$nak $\mathcal{D}_A-$n való operálásával kapunk. Formálisan:

$$\mathcal{R}_A = A\mathcal{D}_A.$$

4) Operátorok szorzata:

$$(BA)f = B(Af), \quad \text{ha} \quad \mathcal{R}_A \subset \mathcal{D}_B,$$

ui. ekkor $Af \in \mathcal{D}_B$, valamint

$$(AB)f = A(Bf), \quad \text{ha} \quad \mathcal{R}_B \subset \mathcal{D}_A.$$

Így lehet, hogy AB létezik, de BA nem, ill. fordítva.

3.1.3. HERMITICITÁS ÉS ÖNADJUNGÁLTSÁG.

Legyen A egy $\mathcal{H}-$n értelmezett operátor és $f \in \mathcal{D}_A$. Tekintsük a $\langle g|Af\rangle$ kifejezést. Ha valamely *fix* $g \in \mathcal{H}-$ra azt találjuk, hogy

$$\langle g|Af\rangle = \langle h|f\rangle \qquad (*)$$

az összes $f \in \mathcal{D}_A$ elemre, akkor definiáljuk az A operátor *adjungált* operátorát, A^+-t, a következő egyenlettel:

$$h = A^+ g, \qquad (**)$$

és olyan $\mathcal{D}_{A^+}$ értelmezési tartománnyal, amely mindazon $\{g\}$ elemekből áll, amelyekre (*) és (**) érvényes. Ebben az esetben írhatjuk:

$$\langle g|Af\rangle = \langle A^+ g|f\rangle, \quad f \in \mathcal{D}_A,\, g \in \mathcal{D}_{A^+}.$$

Ahhoz, hogy $h = A^+ g$ *egyértelműen* definiált legyen g által, kell, hogy $\mathcal{D}_A$ *sűrű* legyen $\mathcal{H}-$n belül (a gyakorlatban ez azt jelenti, hogy elég sok elemet tartalmaz). $\mathcal{D}_A$ *sűrű*, ha bármely $g \in \mathcal{H}-$ra létezik olyan $f \in \mathcal{D}_A$, hogy megadva $\epsilon > 0-$t, $\|f - g\| < \epsilon$.

Az A operátor **hermitikus**, ha minden $f, g \in \mathcal{D}_A-$ra

$$\langle g|Af\rangle = \langle Ag|f\rangle \equiv \langle A^+ g|f\rangle.$$

Egy operátor *szimmetrikus*, ha hermitikus és értelmezési tartománya sűrű $\mathcal{H}-$ban.

Szimmetrikus operátorokra $\mathcal{D}_{A^+} \supset \mathcal{D}_A$, mert definíció szerint $\mathcal{D}_{A^+}-$ba $\mathcal{D}_A$ összes eleme beletartozik, de ennél még több elemet is tartalmazhat.

Amennyiben $\mathcal{D}_{A^+} = \mathcal{D}_A$, és A hermitikus ($A^+ = A$ skalárszorzatban), akkor A **önadjungált** is, nemcsak hermitikus (szimmetrikus).

Példa: az impulzus operátor koordináta reprezentációban,

$$p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}, \quad \mathcal{D}_p = \{f \in L^2(a,b);\, f(a) = f(b) = 0\,\text{és}\,\mathrm{f}'\,\text{korlátos}\,(\mathrm{a,b}) - \mathrm{n.}\}$$

Hermiticitás: legyen $f, g \in \mathcal{D}_p$. Ekkor

$$\langle f|pg\rangle = \int_a^b f^* \frac{\hbar}{i}\frac{dg}{dx}dx = \frac{\hbar}{i} f^* g\Big]_a^b + \int_a^b \left(\frac{\hbar}{i}\frac{df}{dx}\right)^* g\, dx = \langle pf|g\rangle.$$

Tehát p hermitikus ($p = p^+$ egy skalárszorzatban), de nem önadjungált, mivel $\mathcal{D}_{p^+} \supset \mathcal{D}_p$.

Válasszuk ugyanis a g elemeket p értelmezési tartományából: $g \in \mathcal{D}_p$, az f elemeket viszont tetszőleges térből, mindössze annyi korlátozással, hogy df/dx véges legyen $(a, b)-$n és $f(b) = e^{i\Theta} f(a)$, ahol Θ =const. Ekkor $\langle f|pg\rangle = \langle pf|g\rangle$ ugyancsak fennáll, másrészt az adjungált definícióból $\langle f|pg\rangle \equiv \langle p^+ f|g\rangle$. Tehát $p^+ = p \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$, azonban $\mathcal{D}_{p^+} \supset \mathcal{D}_p$.

Látjuk tehát, hogy ha a $\mathcal{D}_{p^+}$ értelmezési tartományt $\mathcal{D}_{p^+} = \{f \in L^2(a, b),\ f(b) = e^{i\Theta} f(a)$ és f' korlátos $(a, b) - n\}-$nek definiáljuk, akkor p^+ szimmetrikus (hermitikus). Azt mondjuk ilyenkor, hogy p^+ szimmetrikus kiterjesztése $p-$nek. Viszont p^+ önadjungált is, mert $\mathcal{D}_{p^+} = \mathcal{D}_{p^{++}}$.

Definíció: Egy U operátor akkor és csak akkor **uniter**, ha $\mathcal{D}_U = \mathcal{R}_U = \mathcal{H}$, és

$$\langle Uf|Uf\rangle = \langle f|f\rangle.$$

Ebből következik: $U^+U = 1$ és $UU^+ = 1$.

Cayley-transzformáció: Ha A önadjungált operátor, akkor az

$$U = (A - i1)(A + i1)^{-1}$$

operátor uniter. Fordítottja is igaz: ha U uniter, akkor az

$$A = i(1 - U)^{-1}(1 + U) = i(1 + U)(1 - U)^{-1}$$

operátor önadjungált.

A fent előforduló A^{-1} operátort az A operátor **inverz**ének hívjuk: $A^{-1}A = 1$. Az A operátor inverze akkor létezik, ha $Af \neq 0$ (nincs zérus sajátértéke).

3.2. OPERÁTOROKKAL ÉS REGULÁRIS FÜGGVÉNYEKKEL KAPCSOLATOS TÉTELEK

a) KÜLÖNBÖZŐ SAJÁTÉRTÉKHEZ TARTOZÓ SAJÁTFÜGGVÉNYEK ORTOGONÁLISAK EGYMÁSRA

A tételt a Schrödinger egyenlet felhasználásával egyszer már bizonyítottuk, most a fizikailag szóba jöhető operátorok hermitikusságának és linearitásának kihasználásával sokkal hamarabb célhoz érünk.

Bizonyítás: Legyen

$$O\varphi_m = k_m\varphi_m,$$

$$O\varphi_n = k_n\varphi_n,$$

és $k_m \neq k_n \neq 0$. Ezért

$$\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \frac{1}{k_n}\langle\varphi_m|O\varphi_n\rangle = \frac{1}{k_n}\langle O\varphi_m|\varphi_n\rangle = \frac{k_m}{k_n}\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle,$$

amiből következik, hogy

$$\left(1 - \frac{k_m}{k_n}\right)\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = 0,$$

s mivel az első tényező nem zérus, a második kell az legyen, $Q.E.D.$

b) n-SZERES DEGENERÁLTSÁG ESETÉN LÉTEZIK n SZÁMÚ ORTOGONÁLIS SAJÁTFÜGGVÉNY

Bizonyítás: Tegyük fel, hogy f_1 és f_2 ugyanazon k sajátértékhez tartozó két különböző sajátfüggvény, azaz

$$Of_1 = kf_1, \quad Of_2 = kf_2 \quad \text{és} \quad \langle f_1|f_2\rangle \neq 0.$$

Alkosson $\varphi_1 \equiv f_1$ és $\varphi_2 \equiv a_1f_1 + a_2f_2$ két, egymásra már ortogonális sajátfüggvényt (az eredeti k sajátértékkel természetesen, mivel $O\varphi_1 = k\varphi_1$ és $O\varphi_2 = k\varphi_2$). Az ismeretlen $a_1, \quad a_2$ együtthatók egyértelműen meghatározhatók a $\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle = 0$ ortogonalitási és a $\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle = 1$ normáltsági feltételekből, $Q.E.D.$

Kettőnél magasabb degenerációs fok esetén a páronkénti ortogonalitás és a normáltsági feltételek mindig elegendő számú egyenletet szolgáltatnak az ismeretlen lineárkombinációs együtthatók meghatározására.

c) HERMITIKUS OPERÁTOROK SAJÁTFÜGGVÉNYEI TELJES FÜGGVÉNYRENDSZERT ALKOTNAK

E tétel bizonyítását illetően utalunk a matematikai szakirodalomra (Riesz-Fischer tétel), ill. a korábbi analízis tanulmányokra. A tétel alapvető jelentőségű a kvantummechanikában, ui. egy függvényrendszer teljessége azt jelenti, hogy szerinte bármely reguláris függvény sorba fejthető. Azaz egy tetszőleges $\psi(x)$ állapfüggvényt elő lehet állítani, mint a $\varphi_n(x)$ sajátfüggvények szuperpozíciója:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x), \qquad \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}.$$

A kifejtési együtthatókat meghatározó

$$c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x') \psi(x') \, dx'$$

képletet visszahelyettesítve a kifejtésbe, majd az integrálást és az összegezést felcserélve kapjuk a következő kifejezést

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \Big[\sum_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(x') \Big] \psi(x') \, dx',$$

amelyből leolvasható *a teljességet kifejező összefüggés*

$$\sum_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(x') = \delta(x - x'), \tag{21}$$

ahol $\delta(x)$ a Dirac-féle $\delta-$függvényt jelöli (tulajdonságait ld. később a 4. fejezetben).

A $\psi(x)$ állapot normáltságából a

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \sum_r |c_r|^2 = 1 \tag{22}$$

ún. *normáltsági feltétel* következik a kifejtési együtthatókra vonatkozóan.

Folytonos spektrum esetén a fenti egyenletekben összegzés helyett integrálás értendő.

d) Könnyen beláthatjuk még, hogy a normálhatósági regularitási követelmény az energiaoperátor hermitikusságából levezethető:

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle H\Psi | \Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | H\Psi \rangle = 0,$$

azaz $\langle \Psi | \Psi \rangle$ =állandó.

3.3. A FIZIKAI MÉRÉS ALAPTÖRVÉNYE

Tiszta állapotról beszélünk, ha $\psi = \varphi_n$, azaz ψ éppen az egyik (az $n-$edik) *sajátállapota* az O operátorhoz tartozó fizikai mennyiségnek. Ha ekkor mérés sorozatot hajtunk végre a mindig ψ állapotban levő rendszeren, akkor biztosak lehetünk benne, hogy a mérések a k_n sajátértéket fogják szolgáltatni. Ilyenkor $c_n \neq 0$ és $c_m = 0, \quad (m \neq n)$ és $|c_n|^2 = 1$.

*Szuperponált állapot*ról akkor beszélünk, ha nem az előbbi eset valósul meg, azaz ha $\psi = \sum_n c_n \varphi_n$. Ekkor azt mondhatjuk csak, hogy az a φ_n sajátfüggvény van erősebben képviselve a ψ állapotban, amelyikhez tartozó $|c_n|^2$ kifejezés nagyobb. Fel kell tehát tételeznünk (s aztán a tapasztalattal összevetni), hogy a mérés sorozat az ilyen φ_n-hez tartozó k_n sajátértéket nagyobb *valószínűséggel* szolgáltatja eredményül, mint a kisebb $|c_m|^2-$tel képviselt állapotokhoz tartozó k_m sajátértékeket.

Ezek után a **fizikai mérés alaptörvénye** a következőképpen fogalmazható meg:

annak W valószínűsége, hogy a ψ állapotban lévő rendszeren elvégzett mérés a φ_n sajátfüggvényhez tartozó sajátértéket, k_n-et adja eredményül, éppen

$$W(k_n) = |c_n|^2 = |\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2, \tag{23}$$

és a mérés után a rendszer a φ_n sajátállapotban található ($\psi \to \varphi_n$).

Feltehetjük a kérdést: vajon mennyi a kérdéses mennyiség *középértéke*?

Amennyiben N mérésből N_n-szer mérünk k_n sajátértéket a kezdetben mindig ugyanabban a ψ állapotban levő rendszeren (sokaságon), akkor a középérték definíció szerint:

$$\bar{O} = \lim_{N\to\infty} \sum_n k_n \frac{N_n}{N}.$$

Felhasználva a mérési alaptörvényt, valamint további átalakításokat végezve nyerjük:

$$\bar{O} = \sum_n k_n \lim_{N\to\infty} \frac{N_n}{N} = \sum_n k_n W_n(k_n) = \sum_n k_n |c_n|^2 =$$

$$= \sum_{m,n} k_n c_m^* c_n \langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \langle\sum_m c_m\varphi_m|O\sum_n c_n\varphi_n\rangle = \langle\psi|O\,\psi\rangle \equiv \langle O\rangle$$

Tehát a mérések középértéke megegyezik a fizikai mennyiség sűrűség szerinti átlagértékével, amit *várható érték*nek is nevezünk. (vö. az Ehrenfest tételnél használt jelöléssel.) Ebből is látszik a ψ állapotfüggvény centrális szerepe: az állapotfüggvény ismeretében a mérések várható (átlag)értéke előre meghatározható. A problémát általában az jelenti, hogy valós fizikai rendszer esetén a ψ állapotfüggvény nem ismeretes.

Szemléltető példaként számítsuk ki az L hosszúságú egydimenziós potenciáldobozban levő m tömegű részecske x koordinátájának a középértékét (=várható értékét). Az $n-$edik gerjesztett állapotban levő részecske állapotfüggvénye az előző fejezetből ismert módon $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin k_n x$, ahol $k_n = n\frac{\pi}{L}$. A középérték tehát

$$\bar{x} = \langle\psi_n|x\,\psi_n\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L x\sin^2\frac{n\pi}{L}x\,dx = \frac{2}{L}\int_0^L x\frac{1}{2}(1-\cos 2\frac{n\pi}{L}x)\,dx = \frac{2}{L}\cdot\frac{L^2}{4} = \frac{L}{2}$$

Azt nyertük, hogy sok mérés végrehajtása esetén a részecske koordinátájára átlagban $L/2$, azaz a doboz közepének helykoordinátája adódna mérési eredményül.

Számítsuk most ki az impulzus átlagát. Könnyen beláthatjuk, hogy

$$\bar{p}_x = \langle\psi_n|\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,\psi_n\rangle = 0,$$

azaz az impulzus középértéke zérus. Eredményeink megnyugtatóak; klasszikus fizikai szemléletünk alapján éppen ezen átlagértékekre számíthattunk.

A fizikai mérés alaptörvénye alapján Ehrenfest tétele így is írható:

$$\frac{d\bar{p}_x}{dt} = m\frac{d^2\bar{x}}{dt^2} = -\overline{\frac{\partial V}{\partial x}} = \overline{F_x}(=\langle F_x\rangle).$$

3.4. HEISENBERG-FÉLE FELCSERÉLÉSI RELÁCIÓK

Mint láttuk, a fizikai mennyiségek lineáris hermitikus operátorokkal reprezentálhatók. Ezen operátorok a fizikai rendszer lehetséges állapotait leíró reguláris függvényeken (a Hilbert tér elemein) hatnak. Két operátor egymás utáni hatása egy függvényre átalában különbözik az operátorok fordított sorrendben való alkalmazásának hatásától. Azt mondjuk, hogy az ilyen operátorok nem felcserélhetők: $AB \neq BA$.

Legyen pl. $A = p_x \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ az $x-$irányú impulzus operátora, míg $B = x \equiv x\cdot$ az $x-$ irányú elmozdulás (koordináta) operátora. Ekkor, mivel

$$\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \psi + x\frac{\partial \psi}{\partial x},$$

azaz

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) - x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\psi,$$

kapjuk a következő összefüggést

$$(p_x\, x - x\, p_x)\psi = \frac{\hbar}{i}\psi.$$

Definiáljuk a két operátor felcserélhetőségét mérő *kommutátort*

$$[A, B] \equiv AB - BA.$$

Ha két operátor kommutátora zérus, a két operátor felcserélhető egymással, különben nem.

Fenti eredményünk ψ tetszőleges voltára figyelemmel, kommutátorral is kifejezhető:

$$[p_x, x] = \frac{\hbar}{i}. \tag{24a}$$

Hasonlóképpen

$$[p_y, y] = \frac{\hbar}{i}, \tag{24b}$$

$$[p_z, z] = \frac{\hbar}{i}, \tag{24c}$$

de például

$$[p_x, y] = 0, \tag{24d}$$

és ciklikus felcseréléssel hasonlóan a többi iránypárosításra nézve.

A klasszikus fizikában $[p_x, x] = 0$, azaz a fizikai mennyiségek felcseréhetők egymással. Azt, hogy ez csak közelítő érvénnyel igaz, és bizonyos fizikai mennyiségek (azaz a nekik megfelelő operátorok) nem felcserélhetők egymással, **Heisenberg** ismerte fel elsőként, és ezért a (24a-d) egyenleteket *Heisenberg-féle felcserélési relációk*nak hívjuk. A Heisenberg-relációk a természet alapvető törvényei közé tartoznak.

A (24) összefüggés a (14) Schrödinger egyenlettel egyenértékű operátoregyenlet. Ismeretük birtokában, mint fogjuk látni, a fizikai mennyiségek (mérhető) lehetséges értékei meghatározhatók a (nem mérhető) sajátfüggvényekkel együtt.

Tétel: Felcserélhető operátoroknak vannak közös sajátfüggvényei.

Bizonyítás: Legyen φ $A-$nak nem elfajult sajátfüggvénye: $A\varphi = a\varphi$. Ekkor, mivel $AB = BA$,

$$A(B\varphi) = BA\varphi = Ba\varphi = a(B\varphi),$$

azaz $B\varphi$ sajátfüggvénye $A-$nak ugyanazzal az a sajátértékkel, ezért $B\varphi$ arányos kell legyen $\varphi-$vel: $B\varphi = b\varphi$. Q.E.D.

A tétel fordítottját is bizonyítjuk: Legyen φ közös sajátfüggvénye az A és B operátoroknak, azaz $A\varphi = a\varphi$ és $B\varphi = b\varphi$. Bizonyítjuk, hogy ekkor $[A, B] = 0$ a φ sajátfüggvényre vonatkozóan.

$$AB\varphi = A(b\varphi) = bA\varphi = ba\varphi = B(a\varphi) = BA\varphi$$

Azaz $[A, B] = 0$ (a $\varphi-$ sajátfüggvényre való alkalmazás szempontjából). *Q.E.D.*

Tétel: Amennyiben $[F, H] = 0$, azaz egy F fizikai mennyiség operátora felcserélhető az energiaoperátorral, akkor az F mozgásállandó.

Bizonyítás: Tegyük fel, hogy F operátora explicit módon nem függ az időtől: $\partial F/\partial t = 0$. Ekkor az $\overline{F}$ átlagértéke még függhet az időtől a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ állapotfüggvényen keresztül. Képezve a középérték idő szerinti deriváltját és kihasználva az állapotegyenletet ($\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H\Psi$), kapjuk:

$$\frac{d\overline{F}}{dt} = \frac{d}{dt} \langle \Psi | F\Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | F\Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | F \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle H\Psi | F\Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | FH\Psi \rangle =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [H, F]\Psi \rangle . \quad \Longrightarrow \quad \text{Tehát} \quad \frac{d\overline{F}}{dt} = 0, \quad \text{ha} \quad [H, F] = 0, \quad Q.E.D.$$

A

$$\frac{dF}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, F]$$

mennyiséget *kvantummechanikai időderivált*nak nevezzük.

A kvantummechanikai időderivált segítségével gyorsabban levezethetjük Ehrenfest tételét és mélyebb bepillantást nyerhetünk a newtoni mechanika törvényeinek érvényességi körébe.

Legyen $F = x\cdot$. Ekkor

$$\frac{dx}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, x] = \frac{i}{2\mu\hbar} \left(p_x^2 x - x p_x^2 \right)$$

$$= \frac{i}{2\mu\hbar} \left(p_x(p_x x - x p_x) + (p_x x - x p_x) p_x \right) = \frac{1}{\mu} p_x$$

Legyen $F = p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. Ekkor

$$\frac{dp_x}{dt} = \frac{i}{\hbar}(Hp_x - p_x H) = \frac{i}{\hbar} (V p_x - p_x V) = -\frac{\partial V}{\partial x}.$$

Ennek véve a várható értékét, kapjuk Ehrenfest tételét. Newton törvényei tehát operátor egyenlőség alakjában érvényesek.

3.5. HEISENBERG-FÉLE HATÁROZATLANSÁGI ÖSSZEFÜGGÉSEK

Ha egy mikrorendszer ψ állapotfüggvénye az A operátornak (fizikai mennyiségnek) nem sajátfüggvénye, akkor az A által leírt fizikai mennyiség értékére a mérések általában különböző értékeket szolgáltatnak. Minél távolabb vannak ezek az értékek az általuk szolgáltatott átlagértéktől, annál *határozatlan*abb (*elmosódottabb*) ilyenkor a kérdéses fizikai mennyiség értéke, azaz annál nagyobb a mérés *szórása*.

Definiáljuk a **négyzetes közepes eltérés**t (szórásnégyzetet):

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle,$$

ahol $\langle A \rangle \equiv \langle \psi | A\psi \rangle$ az A fizikai mennyiség (= hermitikus operátor) várható (átlag–, közép–) értéke.

Tétel: A négyzetes közepes eltérés sajátállapotban (és csakis ebben) zérus.

Bizonyítás: Kiindulunk a definícióból, majd elvégezzük a négyzetreemelést és a közepelést:

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 \, \psi \rangle = \langle \psi | (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) \, \psi \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2.$$

Sajátállapotban ($A\psi = k\psi$) a jobboldal valóban zérust ad $(k \cdot k - k^2) = 0$, egyébként nem.

Bizonyítjuk a következő *tétel*t:

Amennyiben két fizikai mennyiség operátora egymással nem felcserélhető, akkor közepes eltérésük szorzatának legkisebb értéke a két operátor kommutátorából képezett várható érték abszolút értékének a fele, azaz

$$\text{ha} \quad [A, B] = C, \quad \text{akkor} \quad \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle|. \tag{25a}$$

Bizonyítás: Kiindulunk az analízisből jól ismert

$$\langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq \langle f | g \rangle \langle g | f \rangle = |\langle f | g \rangle|^2$$

Schwarz-féle egyenlőtlenségből, és definiáljuk az $A' = A - \langle A \rangle$, $B' = B - \langle B \rangle$ hermitikus operátorokat, amelyek kommutátora szintén C: $[A', B'] = C$. Legyen továbbá $f = A'\psi$ és $g = B'\psi$. Ezt a Schwarz egyenlőtlenségbe helyettesítve kapjuk

$$\begin{gathered}
(\Delta A \Delta B)^2 \geq |\langle A'B' \rangle|^2 = \\
\Big| \Big\langle \frac{A'B' + B'A'}{2} \Big\rangle + \Big\langle \frac{A'B' - B'A'}{2} \Big\rangle \Big|^2 = \\
\Big| \Big\langle \frac{A'B' + B'A'}{2} \Big\rangle \Big|^2 + \Big| \Big\langle \frac{A'B' - B'A'}{2} \Big\rangle \Big|^2 \\
+ \Big\langle \frac{A'B' + B'A'}{2} \Big\rangle^* \Big\langle \frac{A'B' - B'A'}{2} \Big\rangle \\
+ \Big\langle \frac{A'B' + B'A'}{2} \Big\rangle \Big\langle \frac{A'B' - B'A'}{2} \Big\rangle^* .
\end{gathered}$$

Az utolsó két tag zérust ad, mivel

$$\langle \psi | (A'B' \pm B'A')\psi \rangle^* = \pm \langle \psi | (A'B' \pm B'A')\psi \rangle.$$

Így tehát

$$(\Delta A \Delta B)^2 \geq \Big| \Big\langle \frac{A'B' + B'A'}{2} \Big\rangle \Big|^2 + \Big| \Big\langle \frac{A'B' - B'A'}{2} \Big\rangle \Big|^2 .$$

Az első tagot elhagyva még inkább teljesül az egyenlőtlenség:

$$(\Delta A \Delta B)^2 \geq \Big| \Big\langle \frac{A'B' - B'A'}{2} \Big\rangle \Big|^2 = \Big| \Big\langle \frac{C}{2} \Big\rangle \Big|^2 .$$

Mindkét oldalból gyököt vonva kapjuk a (25a) alatti összefüggést. *Q.E.D.*

Mármost legyen $B = p_x$, $A = x \quad \rightarrow \quad C = -\frac{\hbar}{i}$. Behelyettesítve (25a)-ba, kapjuk a híres *Heisenberg-féle határozatlansági relációk*at

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{25b}$$

továbbá, mivel választhatjuk $A-$t és $B-$t az $y-$, ill. $z-$irányú elmozdulásnak és impulzusnak is,

$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{25c}$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{25d}$$

A Heisenberg-féle határozatlansági relációnak rendkívül mély fizikai (és filozófiai) tartalma van. Azt mondja ki, hogy a koordináta és az impulzus (vagy két más, egymással nem felcserélhető operátorral reprezentált) fizikai mennyiség mérése egyszerre nem végezhető el egy mindig azonos ψ állapotban levő rendszer-sokaságon. A (25) egyenlőtlenségek pontosan azt jelentik, hogy a mindig azonos ψ állapotban levő rendszerek sokaságán sokszor megmérve az $x-$értéket, majd sokszor megmérve a p_x értékét, a mérés során adódó Δx és Δp_x hibák (szórások) szorzata még végtelen pontos műszereket használva sem lehet kisebb, mint a (25) által megszabott alsó korlát. Ezt a negatív állítást szokták a klasszikus szemléletünkkel jobban megragadható, egyetlen objektumra vonatkozó kijelentésként megfogalmazni: egy részecske koordinátája és impulzusa (vagy két más, egymással fel nem cserélhető operátorhoz tartozó fizikai mennyiség) egyidejűleg nem vehet fel pontos (határozott) értéket s így nem is mérhető tetszőleges pontossággal egyidejűleg.

A *makrofizikai* mérésekben a tételnek nincs észrevehető folyománya. Legyen ui. egy $m = 5 \times 10^{-3}$ [kg] tömegű golyónk, amelynek helyét $\Delta x = 10^{-6}$ [m] (=1μm) pontossággal mérjük meg. Ekkor a golyó sebességének határozatlansága a bizonytalansági relációból következően

$$\Delta v = \frac{\Delta p}{m} \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \approx \frac{1 \cdot 10^{-34} Js}{2 \cdot 5 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-6} kg\, m} = 10^{-26} \frac{m}{s}.$$

Ilyen kis sebességek mérésére, észlelésére a makrofizika nem képes, s így megérthetjük, hogy a (25) egyenleteknek a makrofizikában miért nincs észrevehető jelentőségük.

A *mikrofizikában*, a kis méretek világában viszont igencsak nagy jelentőséggel bírnak a (25) összefüggések. Próbáljuk megmérni az elektron helyét és sebességét egy atomon belül! Az elektron helyének mérési bizonytalansága maximálisan az atom átmérője lehet: $\Delta x = 10^{-10}$ [m]. Az elektron tömege $m = 9 \times 10^{-31}$ [kg], ezért a sebességének mérési bizonytalansága:

$$\Delta v = \frac{\Delta p}{m} \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \approx \frac{1 \cdot 10^{-34} Js}{1,8 \cdot 10^{-30} \cdot 10^{-10} kg\, m} = 5 \cdot 10^5 \frac{m}{s} = 500 \frac{km}{s}.$$

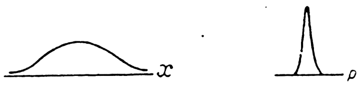
Ez azt jelenti, hogy eleve reménytelen vállalkozás egy atomon belüli elektron sebességének és tartózkodási helyének egyidejű mérése.

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció egyben azt is jelenti, hogy a mikrofizikában nem érvényes a *pálya* fogalma. Egy részecske pályájáról ui. akkor beszélhetünk, ha a részecskének minden időpillanatban ismerjük a tartózkodási helyét, valamint sebességének nagyságát és irányát. Az atomban ez gyakorlatilag (és elvileg is) kizárt, mert amint láttuk, az elektron helyének egyre pontosabb mérése egyre elmosódottabbá tenné a sebességére vonatkozó mérés értékét és viszont. Nem jelenti ez persze azt, hogy általában az elektronnak, mint mikroszkopikus (tömegű) részecskének, nem beszélhetünk a pályájáról. Katódsugárcsőben, vagy ciklotronban az elektron *pályájának* (vagyis helyének Δx és sebességének Δv) bizonytalansága, elmosódottsága a berendezés méreteihez képest elhanyagolható. Tegyük fel például, hogy a ciklotronban a mágneses tér által 1 [m] sugarú *körpályára* kényszerített elektron helyét (a berendezés tervezhetősége miatt) $\Delta x = 10^{-4}[m]$ pontossággal kell ismernünk (megmérnünk). Ez $\Delta v \approx 5\,[\frac{cm}{s}]$ sebességbizonytalanságot jelent, ami viszont a ciklotronbeli tipikusan MeV energiájú elektronsebességekhez viszonyítva elhanyagolható. Tehát ciklotron esetén beszélhetünk az elektron pályájáról.

A Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés rávilágít a mikrofizikának a makrovilághoz képesti sokkal gazdagabb mozgásformáira. Tekintsünk pl. egy elektront. A 14/a. ábrán az elektron olyan mozgásállapotban van, hogy helyét jól ismerjük, impulzusa viszont szétkent eloszlást mutat. Az ilyen állapot a makroszkopikus fizikában megismert "tömegpont" fogalomra hasonlít.

14/a. ábra. A mikrorészecske "tömegpont"-közeli állapotban.

A 14/b. ábrán egy "hullám" mozgásforma ismerhető fel, amelyre az jellemző, hogy az impulzus jól meghatározott, a mozgást végző objektum viszont nem lokalizálódik egy adott helyre.



14/b. ábra. A mikrorészecske "hullám"-közeli állapotban.

A 14/c. ábrán a két előző közti végtelenül sokféle mozgásforma egy lehetséges vátozatát tüntettük fel.

14/c. ábra. A mikrorészecske általános állapotban.

A *zérusponti energák* létét a Heisenberg-féle határozatlansági relációk segítségével is megérthetjük. Például az egydimenziós potenciáldoboz esetén a részecske x koordinátájának várható értéke $\langle x \rangle = L/2$ volt. Azaz az x koordináta mérési bizonytalansága is legfeljebb $L/2$ lehet: $\Delta x \leq L/2$. Ebből (25) alapján

$$\Delta v \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \geq \frac{\hbar}{mL}$$

következik. Így a lokalizáltság miatti minimális (csupán az elmosódottságból adódó), energiára az

$$E_{\min} = \frac{1}{2}m(\Delta v)^2 \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2} = \frac{E_1}{\pi^2},$$

alsó korlátot kaptuk, amely az E_1 zérusponti energia nagyságrendjébe eső érték.

Amint azt a (25a) egyenletből látjuk, a határozatlansági relációk a (24) felcserélési törvények egyenes következményei. Így tehát a (24) felcserési törvények kapcsán mondottakat érdemes újra megismételni: azok a kvantummechanika legalapvetőbb axiómái. A felcserélési törvényekből leszármaztatható határozatlansági relációkra pedig úgy tekinthetünk, mint kvantitatív, matematikai formákban kifejezett korlátját annak a szándékunknak, hogy a klasszikus (makroszkópikus) fizikából szerzett absztrakt fogalmainkkal (hely, sebesség, energia, idő, stb.) mikrofizikai (kis mérettartományokban lejátszódó) jelenségeket értelmezzünk, ill. leírjunk.

Röviden érdemes még megjegyezni, hogy a Heisenberg-féle határozatlansági relációk segítségével értelmezhetünk még számos további jelenséget, mint pl. a hidrogénatom (ld. később) alapállapotának szerkezetét (azt tudniillik, hogy miért nem zuhan a magba az elektron), az atomi és magnívók vonalszélességét (és élettartalmuk nagyságrendjét), az impulzusmomentum "furcsaságait" (ld. később), stb. Kiváló magyar nyelvű tárgyalás található a *Marx: Kvantummechanika*, ill. *Nagy Károly: Kvantummechanika* c. tankönyvekben.

Filozófiai tartalom: A Heisenberg-féle határozatlansági összefüggések elvi korlátot állítanak a világ mechanisztikus megismerhetősége elé. Megdőlt a determinisztikus világkép, a Laplace-démon elvileg sem létezhet, mivel nem lehetséges egy adott időpillanatban a világegyetemet alkotó részecskék helyét és sebességét megismerni abszolút pontossággal. A mechanisztikusan determinisztikus világkép helyébe egy sokkal gazdagabb, *lehetőségekkel* teli világszemléletet kaptunk a kvantummechanikától cserébe: a világ nem eleve meghatározott, előre eldöntött valami, amelyben mi emberek (és minden más is) csupán statiszta szerepet játszunk. A fizikai mérés alaptörvényéből (a mérés valószínűségi értelmezéséből), valamint a mechanisztikus determinációt megdöntő Heisenberg-féle határozatlansági relációkból következendően a világ minden pillanatban újjászületik, az újjászületés permanens állapotában van.

(Megjegyzendő, hogy noha e világszemlélet gyermekek számára is könnyen felfogható, a köztudatban, de még a műszaki/természettudományos képzettséggel rendelkezők körében sem terjedt el eléggé. Ezért van az, hogy **Teller Ede** minden interjújában, nyilatkozatában, előadásában stb. megragadja az alkalmat arra, hogy egy-két mondatban szót ejtsen ezen új világnézet lényegéről, amely egyben a kvantummechanika legfontosabb tanítása.)

*

Röviden meg kell említenünk az energia és idő fizikai mennyiség, valamint az impulzusmomentum $z-$ komponense és az azimutális szög fizikai mennyiség felcserélési relációjával kapcsolatos problémákat.

Kimutatható az, hogy a nemrelativisztikus kvantummechanikában a tetszetős

$$\text{energiaoperátor}: \quad \hat{\mathrm{E}} \to -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\text{idő}: \quad \hat{\mathrm{t}} \to t\cdot$$

hozzárendelés [amelyből formálisan "levezethető" az állapotegyenlet és felírható egy

$$[\hat{E}, \hat{t}\,] = \frac{\hbar}{i} \quad \text{(hibás)}$$

felcserélési reláció], nem létezik a teljes energia korlátossága miatt. Ezen operátorok értelmezési tartományát vizsgálva ugyanis kiderül, hogy az időnek diszkrét spektruma lenne. Bizonyítható azonban, hogy az energiamérés és időtartam mérés szórására mégis fennáll a

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{(helyes)}$$

Heisenberg féle határozatlansági reláció.

A következő fejezetben fogjuk látni, hogy az impulzusmomentum z komponense az azimutális szög deriváltjával kapcsolatos:

$$L_z \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}.$$

A $[p_x, x] = \hbar/i$ felcserérési reláció analógiájára felírt

$$[L_z, \phi] = \frac{\hbar}{i}$$

reláció szintén problematikus, mert a belőle folyó

$$\Delta L_z \Delta\phi \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{(hibás)}$$

határozatlansági összefüggés helytelen. A felcserélési relációból a határozatlansági relációba történő levezetésnél ui. mindig kihasználtuk, hogy az operátorok hermitikusak. Viszont az L_z operátor csak a 2π szerint periódikus függvények terén hermitikus, míg $\phi = \arctan y/x$ nem periódikus. Jackiw és mások megmutatták, hogy periódikus (pl. $\Phi = \sin\phi$) változót használva, csak kis $\Delta\phi$ szórások esetén kapunk a fenti bizonytalansági relációhoz hasonló eredményt.

3.6. AZ AZONOSSÁG ELVE

A mikrovilágban előforduló objektumok (elemi részecskék, elektronok, atomok, atommagok stb.) nagyfokú hasonlóságot mutatnak egymáshoz. A tapasztalat szerint ezen mikrorendszerek nemcsak hasonlóak, hanem minden tekintetben *azonosak* is egymással. Az egyik elektron olyan, mint a másik, ugyanazon tömeggel, töltéssel és más fizikai jellemzőkkel rendelkezik. A Holdról, vagy a meteoritokból származó ásványokat alkotó elemek azonosak a Föld bármely pontján találhatókkal (az elemek rendszerbe foglalhatók).

Makroszkópikus világunkban előforduló fizikai rendszerek közül ilyen nagyfokú hasonlóság leginkább pl. egy hegedű húrjával kapcsolatban figyelhető meg: adott anyagú, hosszúságú, feszességű húr mindig ugyanazon a hangon fog megszólalni, függetlenül attól, hogy hol és mikor készítették. Az azonosság elve élesen ellentmond az atomok bolygómodellként való elképzelésének. Amíg Naprendszerünk számtalan olyan változatban megvalósulhat, amelyek a kezdeti feltételek kismértékű eltérésében különböznek csak, addig egy vasatom alapállapotban csak egyféleképpen valósulhat meg. Minden kisebb perturbáció arra nézve, hogy a vasatombeli elektronok mozgását megzavarja, hatástalan addig, amíg a közölt energia éppen nem elegendő a vasatom egyik gerjesztett állapotának létrehozásához.

A mikroobjektumok azonosságát tehát a perturbácókkal szembeni nagyfokú stabilitásával magyarázhatjuk, ami végső soron a fizikai mennyiségek kvantáltságával függ össze. (Ez viszont, legalábbis ami a zérusponti [alapállapoti] energiát illeti, a határozatlansági elvvel kapcsolatos. Az azonosság elve tehát végső soron a (24) csererelácók egyik megnyilvánulási formája. Mindez azonban nagyon áttételesen függ csak össze, ezért leghelyesebb az azonosság elvét egy teljesen független alapelvnek tekinteni.)

Vizsgáljuk most meg, milyen matematikai következménnyel jár az azonosság elve a kvantummechanikában. Mivel az előbbiek szerint a kvantummechanikában határozott pályáról nem beszélhetünk [nem tudjuk nyomon követni (elvileg sem!) az egyes elemi részecskéket], ezért pl. *két* azonos részecskéből álló rendszer $\Psi(1,2)$ állapotfüggvénye ugyanazt az állapotot kell jelentse, mint $\Psi(2,1)$. Azaz, minden mérés szempontjából azonosnak kell lenni a két állapotnak, amit a következő két egyenlettel fejezhetünk ki:

$$|\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2$$

és

$$|\langle\Phi|\Psi(1,2)\rangle|^2 = |\langle\Phi|\Psi(2,1)\rangle|^2.$$

(Az első egyenlet a térbeli megtalálási valószínűségek azonosságát, a második pedig a mérésekkel szembeni azonosságot fejezi ki.)

A fenti egyenletekből az következik, hogy a két hullámfüggvény csak egy egységnyi abszolút értékű konstansban térhet el egymástól:

$$\Psi(1,2) = k\Psi(2,1) = k^2\Psi(1,2).$$

Ebből következik, hogy $k^2 = 1 \rightarrow k = \pm 1$, azaz

$$\Psi(1,2) = \begin{cases} +\Psi(2,1) & \text{szimmetrikus, (bozonok)} \\ -\Psi(2,1) & \text{antiszimmetrikus, (fermionok)} \end{cases}$$

a két részecske felcseréléssel szemben.

Kimondhatjuk tehát az azonosság elvéből fakadó matematikai tételt: *a kvantummechanikában csak olyan reguláris függvények írnak le fizikai állapotot, amelyek szimmetrikusak vagy antiszimmetrikusak az azonos részecskék (változóinak) felcserélésével szemben.*

Az azonosság elvéből fakadó további tételek:

Tétel: *Azonos részecskékből álló fizikai rendszer energiaoperátora mindig szimmetrikus:* $H(1,2) = H(2,1)$.

Bizonyítás: Tekintsük a

$$H(1,2)\Psi(1,2) = i\hbar\frac{\partial\Psi(1,2)}{\partial t}$$

Schrödinger egyenletet. Cseréljük fel az 1−es részecskét 2−sel. Kapjuk a

$$H(2,1)\Psi(2,1) = i\hbar\frac{\partial\Psi(2,1)}{\partial t}.$$

Schrödinger egyenletet. Használjuk ki az állapotfüggvény azonosság elve következtében meglévő szimmetriáját a $1 \leftrightarrow 2$ koordináta cserével szemben. Kapjuk:

$$\pm H(2,1)\Psi(1,2) = \pm i\hbar\frac{\partial\Psi(1,2)}{\partial t}.$$

Egyszerűsítve a mindkét oldalon előforduló $\pm-$szal és kivonva a felcserélés előtti Schrödinger egyenletet az iménti Schrödinger egyenletből, kapjuk a szimmetrikusságot jelentő $H(2,1) = H(1,2)$ egyenletet Q.E.D.

Tétel: *A (13) állapotegyenletnek mindig létezik szimmetrikus, vagy antiszimmetrikus megoldása.*

Bizonyítás: Legyen $\Omega(1,2)$ egy megoldás, azaz

$$i\hbar\frac{\partial\Omega(1,2)}{\partial t} = H(1,2)\Omega(1,2).$$

Ekkor viszont $\Omega(2,1)$ is megoldás, hiszen

$$i\hbar\frac{\partial\Omega(2,1)}{\partial t} = H(2,1)\Omega(2,1) = H(1,2)\Omega(2,1),$$

ahol kihasznátuk az előző tételt. Minthogy két megoldás szuperpozíciója is megoldás, a

$$\Psi(1,2) = \Omega(1,2) \pm \Omega(2,1)$$

megoldás már a kívánt szimmetriát fogja mutatni. *Q.E.D.*

Tétel: *Az állapotfüggvény szimmetriája időben állandó.*

Bizonyítás: Az

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_t}{\partial t} = H\Psi_t$$

állapotegyenlet átírható differenciaegyenletté (a $dt \to 0$ határátmenet elhagyásával):

$$\Psi_{t+dt} - \Psi_t = dt\frac{1}{i\hbar}H\Psi_t,$$

Ebből, átrendezéssel, olyan egyenletet kapunk, amelyben egy későbbi időpillanatbeli állapotfüggvényt egy korábbi időpillanatban érvényes állapotfüggvénnyel fejezünk ki:

$$\Psi_{t+dt}(1,2) = (1 + dt\frac{1}{i\hbar}H)\Psi_t(1,2).$$

Mivel a zárójelben álló kifejezés szimmetrikus a két részecske felcserélésével szemben, az állapotfüggvény szimmetriája időben állandó marad. *Q.E.D.*