

1.2. A kvantummechanika axiomatikus felépítése

A kvantummechanika a fizika egyik axiomatikus felépített rendszerének tekinthető. Azaz ismeretesek azok az alaptörvények (görögül axiómák, latinul posztulátumok), amelyeket közvetlen bizonyítás nélkül el kell fogadnunk és amelyekből minden más állítás levezethető. Az axiómarendszer helyességét az igazolja, hogy az eddig tapasztalt valamennyi jelenség a segítségével értelmezhető, sőt az általa előre megjósolt jelenségeket a mérések utóbb igazolják.

A kvantummechanika axiómáit mi öt db törvénybe foglaljuk össze. Ne zavarjon meg senkit az, hogy az irodalomban máshol esetleg ezekkel a törvényekkel részletesebb bontásban találkozunk. A lényeg ez nem érinti! Ahol az lehetséges volt, ott mi a "lényegileg összetartozó" állításokat egy axiómába foglaltuk össze. Ezen elvek szerint a kvantummechanika öt axiómája két csoportba választható szét. Az első két axióma rögzíti azokat a matematikai fogalmakat (eszközrendszert), amelyeket a fizikai fogalmainkhoz rendelünk. A maradék három axióma pedig lényegében a mérhető fizikai mennyiségekre vonatkozó állításokat fogalmazza meg.

Először az lesz a feladatunk, hogy az axiómákat "kitaláljuk". Ez úgy történik, hogy az egyedi mérési tapasztalatainkat általánosítjuk. Ez a kvantummechanika kialakulása során is így történt. Sok hibás általánosítás csapdái és zsákutcái átvégződve jutottak el a fizikusok a mai "letisztult" állapotig. Az, hogy ez mennyire "tisztá és érthető" illetve, hogy vajon ez-e a "végső" helyzet, az más kérdés. A válasz valószínűen mindkettőre nemleges. De ez már kívül esik a vizsgálódásunk területén.

1.2.1. A kvantummechanika matematikai eszközei

Először csak (az eddigieknek megfelelően) egyetlen részecske mikrofizikai tulajdonságainak a meghatározásával foglalkozunk. Ekkor a környezetnek a részecskére gyakorolt hatását az (általánosított) $V(\vec{r}, t)$ potenciális energia függvény fejezi ki. (Az általánosítás az időfüggésben van!) A "több részecskés rendszerek" vizsgálatára később kerül majd sor, amikor már kellő jártasságot szereztünk az "egyszerűbb" jelenségek megértésében.

A Schrödinger egyenletek tárgyalásánál már bevezettük az ún. Hamilton operátort. Eddig ez azt a célt szolgálta csupán, hogy egyenleteink formálisan egyszerűbbnek tűnjenek. Általában a matematikában az ilyenfajta egyszerűsítés valójában valamilyen lényeges struktúra felismerését jelenti. Ez pedig már nem üres formai játék, mert magában rejtheti az általánosítás lehetőségét. Mint kiderült most is erről van szó. A $\hat{H}\psi = E \cdot \psi$ időfüggetlen Schrödinger egyenlet formailag egy sajátérték egyenlet, amely, a mérési tapasztalatok szerint, az elektron (vagy valamilyen más részecske) energiájának a meghatározására szolgál. Az „E” energiát az egyenlet sajátértéke adja meg. Ezen (egyedi tapasztalatot kifejező) egyenlet általánosításával juthatunk el az axiómák egy részéhez. Azaz tételezzük fel, nem csak az energia, hanem minden más esetben is hasonló matematikai számításokkal kaphatjuk meg egy keresett fizikai mennyiség számértékét! Kiindulásul megfogalmazhatjuk tehát a **harmadik axiómát**. Eszerint:

"Minden fizikai mennyiség lehetséges mérhető értékeit, az illető fizikai mennyiségre jellemző sajátérték-egyenlet sajátértékei adják meg."

Ezekben az egyenletekben operátorok, sajátértékek és sajátfüggvények szerepelnek. Meg kell tehát mondani, hogy milyen operátorokat kell használnunk, illetve azt, hogy mit jelentenek a sajátfüggvények? Ez irányú tapasztalatainkat az első két axiómában foglaljuk össze.

Kimondhatjuk tehát, a **második axióma** később még kibővítésre kerülő egyszerű változatát, azaz, hogy:

"A fizikai mennyiségekhez (jelen esetben mechanikáról lévén szó ezeket dinamikai változóknak fogjuk nevezni) operátorokat kell rendelni."

Eddig annyit tudunk, hogy az összenergiához a Hamilton operátor tartozik. A többi operátor-hozzárendelést ebből fogjuk kitalálni és azt ugyancsak a második axiómába fogjuk rögzíteni. Induljunk ki abból, hogy a dinamikai változók közötti kapcsolatokat a klasszikus mechanikából már ismerjük! Tételezzük fel, hogy ezek a kvantummechanikában is érvényben maradnak! Ezek szerint egy tömegpont (részecske) minden dinamikai

tulajdonsága megmondható, ha a helye (\vec{r}) és az impulzusa (\vec{p}) ismeretes. Tehát minden dinamikai változó az \vec{r} vektor és a \vec{p} vektor függvényeként definiálható. A klasszikus mechanikában a W_k kinetikus és a V potenciális energia összegét a $H(\vec{r}, \vec{p}) \equiv W_k(\vec{p}) + V(\vec{r})$ Hamilton függvénynek nevezzük. A feladatunk tehát az, hogy kitaláljuk azokat az operátorokat, amelyeket a helykoordinátákhoz (x, y, z) és az impulzus koordinátákhoz (p_x, p_y, p_z) kell rendelnünk úgy, hogy azok a jól ismert \hat{H} Hamilton operátort adják vissza.

OROSZ L. Kvantummechanika 34. oldal

A $H(p_x, p_y, p_z, x, y, z)$ Hamilton függvény és a Schrödinger egyenletnél bevezetett \hat{H} operátor összehasonlításával egy kézenfekvő lehetőség kínálkozik a hely(koordináta) és az impulzus(koordináta) operátorok megkonstruálására. Mi a Schrödinger által javasolt megoldást fogjuk használni. Eszerint a hely(koordináta)-hoz rendelt operátornak a "helykoordinátával való szorzást" feleltetjük meg és az impulzus(koordináta)-hoz rendelt operátor a megfelelő "helykoordináta szerinti deriválás" matematikai műveletével hozható kapcsolatba.

Azaz $\hat{x} \equiv x \cdot$ valamint $\hat{p}_x \equiv \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x}$ és a többi komponens is esetén hasonló módon járunk el.

Az (x, y, z, p_x, p_y, p_z) dinamikai alapmennyiségekhez rendelt operátorok ismeretében egy tetszőleges $F(\vec{p}, \vec{r})$ dinamikai változóhoz rendelt \hat{F} operátor a Hamilton operátor mintájára kapható meg.

Ezek szerint, egy tetszőleges F dinamikai változóhoz oly módon rendelünk operátort (2. axióma!), hogy előbb felírjuk a dinamikai változó $F(p_x, p_y, p_z, x, y, z)$ klasszikus definícióját, majd ezután a koordináta és impulzuskomponensek helyébe beírjuk a Schrödinger féle operátorokat, azaz $\hat{F} \equiv F(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$.

Az eddigiek alapján már megfogalmazhatjuk azt az általános matematikai módszert, amelyet mindig alkalmazunk majd valamely ismert dinamikai változó kvantummechanikai tárgyalása során. Először felírjuk az illető dinamikai változó klasszikus mechanikai definícióját ($F(\vec{p}, \vec{r})$). Utána a 2. axióma szerint megkonstruáljuk a dinamikai változóhoz rendelt operátort (\hat{F}). Majd ezután felírjuk a sajátérték egyenletet és megoldjuk ($\hat{F}\varphi_i = F_i \cdot \varphi_i$). A 3. axióma szerint így megkapjuk a szóban forgó dinamikai változó mérhető értékeit $\{F_1, F_2, F_3, \dots, F_i, \dots\}$. A kapott számítások a kísérletekkel összehasonlíthatók, azaz (és ez nagyon lényeges!) a használt elméleti modell fizikailag közvetlenül vagy közvetetten értelmezhető. A használt módszer egyszerűsített sémája tehát a következő:

"Klasszikus mechanika \rightarrow Operátorok \rightarrow Sajátérték egyenlet \rightarrow Fizikai értelmezés \rightarrow Mérés".

A továbbiakban mindig így fogunk hivatkozni rá!

Az imént elmondottak a természettudományos gondolkodásmód (paradigmarendszer) alapsémájának az alkalmazását jelenti a kvantummechanikában.

Ez a séma (az "egzakt" tudományok esetén) leegyszerűsítve a következő:

"Elmélet" \rightarrow "Matematikai modell" \rightarrow "Kvantitatív eredmények" \rightarrow "Kísérlet"

Ez a természettudományos gondolkodásmód (a "régi görögöktől" napjainkig) több ezer év során szerzett ismeretek és tapasztalatok során alakult ki és bizonyult sikeresnek. Ennek nyomán az Emberiség egy "technikai civilizációt" hozott létre annak minden örömeivel és keserűségével együtt. Lehet filozofálgatni azon, hogy ez a civilizáció az "Embert" boldogabbá tette-e vagy sem (J.J. Rousseau óta sokan és sokat gondolkodtak már el ezen az "örökzöld" témán). A tény azonban tény marad: az Emberiség ezt az utat választotta a "bölcseleti civilizáció" helyett, jöllehet ennek csírái is megvoltak főleg a távolkeleti gondolkodási sémák mélyén.

A kísérletekkel (a tapasztalattal) való szembesülés azt a "természetes igényünket" fejezi ki, hogy a fizikában használt modelljeink "reálisak" legyenek (azaz legyen "valóságtartalmuk"). Nem reális modellek lehetnek nagyon szépek, izgalmasak, emberközeli és "lélekelvonó" (a vallási mítoszoktól kezdve a számtalan ezoterikus tanon át a hétköznapi babonákig) de ezeknek az "objektív" valóságtartalma a természettudományos szemlélet szerint (diplomatikusan fogalmazva) "erősen vitatható". Így ezek használata kívül esik a Fizika (mint

tudomány) körein. Napjainkban az áltudományok (média által "felkapott") egyre hangosabb (és népszerűbb) képviselői miatt néha rákényszerülünk ilyen irányú tudományos vizsgálatokra is. De (a több százéves tapasztalatok szerint) ennek "józanító" hatása az áltudományokra nézve enyhén szólva is kétséges és így egy "fizikus számára" elvesztett erőfeszítés. Talán ezért hallgatunk akkor is, amikor szólni kellene?! (Pl. "az örökmozgó" évenkénti feltalálása kapcsán.)

Mivel az operátorok kulcsfontosságú szerepet töltenek be a kvantummechanikai számításokban, ezért szükség van az általunk gyakran használt matematikai szabályok és tételek rövid összefoglalására. Itt elsősorban a matematikában a "lineáris terek" elméletében tanultakra alapozunk.

Rövid matematikai összefoglaló.

A háromdimenziós fizikai térünk geometriai tulajdonságait már régóta kutatja a gondolkodó Ember. A geometria a régi görög természetfilozófia egyik alapja volt. Az évszázadok során felgyülemlett geometriai ismertek rendszerbefoglalása Euklidesz nevéhez fűződik. Az alapfogalmakra és axiómákra épülő logikai konstrukció a görög tudományos gondolkodás csúcsteljesítménye volt. Állításai (matematikáról lévén szó) azóta is érvényesek.

Az általánosítás lehetősége több oldalról is kínálkozott, egyrészt a háromnál több dimenzó, másrészt a komplex számok irányába. Így alakult ki aztán a Funkcionálanalízis, mint a matematika egyik fontos részterülete.

A lineáris tér (= vektor tér)

Adott $\Gamma = \{a, b, c, \dots\}$ komplex (vagy valós) számok halmaza, amelyeket "skalároknak" nevezünk. Legyen adva $L = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \dots\}$ „absztrakt” elemek halmaza ezeket "vektoroknak" nevezzük. Itt most nem kell semmiféle konkrét algebrai, vagy geometriai objektumra gondolni, ezek legyenek valóban „absztrakt” elemek. A „felül vonás” (\bar{x}) jelölést azért vezettük be, hogy egy „vektor” láthatóan is különbözzön egy „skalártól” (a). A vektorok „L” halmazán értelmezzük a vektorok összeadása (jelölése: "+") és a skalárral való szorzás (jelölése „·”) műveletét. Ez utóbbit gyakran nem jelöljük (azaz a „pontot” elhagyjuk).

Az "L" halmaz lineáris tér (vagy vektortér), ha teljesülnek a következő axiómák:
(„Ha A akkor B” logikai kifejezést „A→B”-vel fogjuk jelölni)

- 1.) $\bar{x}, \bar{y} \in L \rightarrow \bar{x} + \bar{y} \in L$
- 2.) $\bar{x} \in L \text{ és } a \in \Gamma \rightarrow a\bar{x} \in L$
- 3.) $\bar{x} + \bar{y} = \bar{y} + \bar{x}$ [a vektorok összeadása „kommutatív” művelet.]
- 4.) $(\bar{x} + \bar{y}) + \bar{z} = \bar{x} + (\bar{y} + \bar{z})$ [a vektorok összeadása „asszociatív” művelet]
- 5.) $\exists \bar{0}, \bar{x} + \bar{0} = \bar{x}$ [van „nulla vektor”, jelölés $0 \equiv \bar{0}$]
- 6.) $\exists (-\bar{x}), \bar{x} + (-\bar{x}) = \bar{0}$ [van „inverz” elem, jelölés: $\bar{x} + (-\bar{y}) \equiv \bar{x} - \bar{y}$.]
- 7.) $1 \in \Gamma, 1 \cdot \bar{x} = \bar{x}$
- 8.) $a, b \in \Gamma, a(b\bar{x}) = (ab)\bar{x}$
- 9.) $(a + b)\bar{x} = a\bar{x} + b\bar{x}$
- 10.) $a(\bar{x} + \bar{y}) = a\bar{x} + a\bar{y}$

Ha a skalárok valóságok, akkor "valós lineáris térről", ha komplexek, akkor "komplex lineáris térről" beszélünk.

Bevezethető a skalár szorzás művelete, amely a tér két tetszőleges „ \bar{x}, \bar{y} ” eleméhez egy „ (\bar{x}, \bar{y}) ” komplex számot rendel a következő axiómák szerint:

- 1.) $(\bar{x}, \bar{y}) = (\bar{y}, \bar{x})^*$

- 2.) $(\bar{x}, a\bar{y}) = a(\bar{x}, \bar{y})$
- 3.) $(\bar{x}_1 + \bar{x}_2, \bar{y}) = (\bar{x}_1, \bar{y}) + (\bar{x}_2, \bar{y})$
- 4.) $(\bar{x}, \bar{x}) \geq 0$

A normált terek

A lineáris (vektor) tér normált tér, ha létezik egy "léképzés", amely az L vektortér minden " \bar{x} " eleméhez egy valós $\|\bar{x}\|$ számot rendel a következő axiómák szerint:

- 1.) $\|\bar{x}\| \geq 0$
- 2.) $\|a\bar{x}\| = |a| \cdot \|\bar{x}\|$
- 3.) $\|\bar{x} + \bar{y}\| \leq \|\bar{x}\| + \|\bar{y}\|$

A metrikus terek

Metrikus egy vektortér, ha létezik egy olyan leképzés, amely a tér bármely két " \bar{x}, \bar{y} " eleméhez egy " $r(\bar{x}, \bar{y})$ " valós számot rendel a következő axiómáknak megfelelően:

- 1.) $r(\bar{x}, \bar{y}) = r(\bar{y}, \bar{x})$
- 2.) $r(\bar{x}, \bar{x}) = 0$
- 3.) $r(\bar{x}, \bar{y}) + r(\bar{y}, \bar{z}) \geq r(\bar{x}, \bar{z})$

Euklideszi tér

Euklideszi a vektortér („E”), ha a normát a skalár szorzással definiáljuk (azaz. $L \equiv E = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \dots\}$)

$$\text{Azaz } \|\bar{x}\| = \sqrt{(\bar{x}, \bar{x})} \text{ és } r(\bar{x}, \bar{y}) \equiv \|\bar{x} - \bar{y}\|$$

Hilbert tér

Hilbert térnek („H”) nevezzük a komplex Euklideszi teret. Azaz $H \equiv E = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \dots\}$

A fentiekben nem kellett megmondani, hogy az absztrakt vektor tér $L = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \dots\}$ elemei milyen konkrét matematikai objektumokkal valósítjuk meg.

A lineáris terek egy konkrét megvalósítását a tér **egy reprezentációjának** nevezzük.

A kvantummechanika megalkotása során kiderült, hogy az elméleten belül olyan függvényekkel kell dolgozunk, amelyek Hilbertet alkotnak.

Azaz meg kell ismerkednünk a Hilbert tér egy adott függvényreprezentációjával.

A $H = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, \dots\}$ absztrakt Hilbert tér egy függvényreprezentációját a következőképpen fogjuk jelölni: $H = \{\alpha, \beta, \gamma, \dots, \varphi, \psi, \dots\}$. A halmaz $\alpha, \chi, \gamma, \dots$ stb... elemei adott tulajdonságú (a Hilbert tér axiómarendszerét kielégítő) komplex függvények.

Legyen tehát megadva, (a későbbiekben még részletezendő) ismert tulajdonságú "függvények" $H = \{\alpha, \beta, \gamma, \dots, \varphi, \psi, \dots\}$ halmaza! A matematikai összefoglalóban már láttuk, hogy ezek a tulajdonságok nagyon hasonlítanak egy véges dimenziós Euklideszi vektortér tulajdonságaira. Ezért az elnevezéseket is onnan vettük át.

Ezen a függvényhalmazon értelmezhetünk különböző transzformációkat. Ezeket a transzformációkat másként operátornak nevezzük. Általában egy transzformáció (operátor) a halmaz egy pl. β elemét a halmaz egy másik pl. φ elemébe visz át. Ezt így jelöljük: $\varphi = \hat{A}\beta$.

Egy \hat{A} **operátor lineáris**, ha eleget tesz az általános linearitási feltételnek. Az operátorok tehát tulajdonképpen a H (függvény)halmazon értelmezett lineáris transzformációk, amelyek a halmazt önmagára képezik le.

Az operátorok között két műveletet definiálunk az "összeadást" $(\hat{A} + \hat{B})$ és a "szorzást" $(\hat{A}\hat{B})$.

A H halmazon értelmezzük a "skalár szorzást". Ez a halmaz bármely két $(\alpha, \beta$ függvény) eleméhez egy $\langle \alpha | \beta \rangle$ komplex számot rendel a megadott (integrálási) definíció szerint.

OROSZ L. Kvantummechanika 35. oldal

Egy α függvény önmagával vett $\langle \alpha | \alpha \rangle$ skalár szorzatát "normának" nevezzük. Ez a skalár szorzat definíciójából fakadóan mindig egy valós szám. A H halmaz olyan függvényekből áll, amelyek normája véges mennyiség. Ezeket normálható függvényeknek nevezzük.

A normát definíciószerűen egynek választjuk, $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$.

Két függvény, α és β "ortogonális", ha a skalár szorzatuk zérus, azaz $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$.

A skalár szorzat felhasználásával minden \hat{A} operátorhoz hozzá tudunk rendelni egy másik \hat{A}^+ ún. "adjungált" operátort a következő képpen: $\langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^+ \phi | \psi \rangle$.

Egy operátor önadjungált, ha adjungáltja megegyezik önmagával $\hat{A} = \hat{A}^+$. Azaz $\langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A} \phi | \psi \rangle$

Az önadjungált operátoroknak kiemelt szerepe van a kvantummechanikai alkalmazásokban. Ennek oka az, hogy az önadjungált operátorok sajátértékei valósak (1.Tétel).

Azaz, ha $\hat{A}^+ = \hat{A}$ és $\hat{A}\alpha = A \cdot \alpha$, akkor $A^* = A$

Így (a már közölt harmadik kvantummechanikai axióma értelmében) a dinamikai változókhoz önadjungált operátorokat kell rendelni, hiszen minden mérési eredmény csak valós szám lehet.

Az önadjungált operátorok másik, a fizikai alkalmazások szempontjából igen fontos tulajdonsága az, hogy a különböző sajátértékeihez tartozó sajátfüggvényei ortogonálisak egymásra (2.Tétel).

OROSZ L. Kvantummechanika 36. oldal

Az ortogonalitás igen fontos tulajdonság. Gondoljunk például arra, hogy segítségével elemi módon, szemléletesen értelmezni tudjuk az egy, két és a háromdimenziós (geometriai) terek egymásra-épülését. Az, hogy az általunk ismert fizikai tér a tapasztalataink szerint háromdimenziós, ez más kérdés! Mint láttuk, a konkrét geometriai (háromdimenziós) terünk egyfajta általánosítás kiindulópontjának tekinthető. Matematikai absztrakciónk képes arra, hogy tetszőleges, háromtól különböző dimenziós, absztrakt tereket is leírjunk és használjunk.

Egy függvényrendszert ortonormálnak hívunk, ha az elemei lineárisan függetlenek, a normájuk egy és az elemek páronként ortogonálisak egymásra. A H függvénytér fontos tulajdonsága az, hogy mindig kiválasztható belőle egy B ortonormált függvényrendszer. Ezt a B függvényrendszert a tér bázisának mondjuk és az α_i elemeket bázisfüggvényeknek nevezzük azért, mert a H függvénytér bármelyik ψ eleme felírható az α_i bázisfüggvények lineáris kombinációjaként. Erre azt mondjuk, hogy a H függvénytér "teljes tér", mert elemei egy bázis szerint sorbafejthetők. A bázisfüggvények száma éppen a tér dimenziószámát adja. (Láthatóan helyzet, és ezért a szóhasználat is, ugyanaz mint a már megszokott és ezért szemléletes háromdimenziós tér esetén.) Mivel (jelen esetben) a H függvénytér α_i bázisfüggvényeinek a száma végtelen ($i = 1, 2, 3, \dots, \infty$), így a H egy végtelen dimenziójú euklideszi tér. Mint ismeretes, a "végtelen" a matematikában nem mennyiség, hanem minőség! Így a "végtelen dimenziós euklideszi" tér néhány tulajdonsága kissé eltér a véges dimenziósokétól. Ez azt jelenti, hogy van néhány olyan tulajdonság, ami a véges dimenziós euklideszi terekben triviálisan teljesül de a végtelen dimenziós térben már nem (pl. egység élhosszúságú kocka "átlós csúspontja"

nem eleme a térnek). Ezért bizonyos kikötéseket kell tennünk annak érdekében, hogy a tér továbbra is "euklideszi" maradjon.

Mindenesetre azokat az euklideszi tereket, amelyekben a "számok" a "komplex számokat" jelentik Hilbert térnek nevezzük (függetlenül annak dimenziójától). A matematikusok azt mondják, hogy a Hilbert tér nem más, mint a "komplex számtest felett értelmezett euklideszi tér".

Mivel a H tér minden φ elemének a normája egy, ezért ez a B bázis szerinti a_i sorfejtési együtthatókra nézve egy megkötést jelent. Az a_i sorfejtési együttható a φ függvénynek és az α_i bázisfüggvény $\langle \alpha_i | \varphi \rangle$ skalár szorzatával egyenlő. A B bázis a H -n értelmezett bármelyik operátor sajátfüggvény-rendszere lehet.

Ezen rövid és koránt sem teljes matematikai összefoglalás után kimondhatjuk a kvantummechanika **első axiómáját** is :

Egy részecske (pl. egy elektron) állapotaihoz a H Hilbert tér elemeit rendeljük.

Ez azt jelenti, hogy a (fizikai) elektronállapotokat a számításaink során (matematikai) függvények reprezentálják, azaz jelenítik meg.

Ebben az axiómában (is) egy igen fontos tapasztalati tény fogalmazódik meg. A mikrofizikai jelenségeknek ugyanis van egy (a klasszikus jelenségeknek nem tapasztalt és ezért a hétköznapi szemléletünk számára egyáltalán nem szemléletes) sajátossága, amit az ún. "szuperpozíció elvében" fogalmazunk meg. Eszerint, ha egy mikrofizikai objektum felvehet két különböző állapotot, akkor felveheti ezen állapotok "valamiféle vegyülékét" is. Ezt nevezzük a két állapot "szuperpozíciójának", amit a matematika nyelvén az állapotokhoz rendelt hullámfüggvények lineáris kombinációjával adunk meg. (Ne felejtjük el, hogy most a számok komplex számokat jelentenek!) Látható, hogy a "szuperpozíció" ténye matematikailag a Hilbert téren, igen egyszerűen megfogalmazható, ugyanakkor nehezen tudjuk (sőt szinte lehetetlen is) ezt a jelenséget hétköznapi foglmainkkal képszerűen leírni. Ennek ellenére (mint azt majd látni fogjuk) a klasszikus szemmel nézve furcsa tapasztalatok sokasága bizonyítja ezen első axióma realitását.

"Hiába, a Kvantummechanika megértéséhez csak a Kvantummechanikán keresztül vezet az út!" (O.L.)

OROSZ L. Kvantummechanika 37. oldal

1.2.2. Az operátorok felcserélési törvényei

Az általunk használt Schrödinger féle kvantummechanikai modellben (ezt Schrödinger féle reprezentációnak is szokták nevezni) már meghatároztuk a helykoordinátákhoz és az impulzus komponensekhez rendelt operátorokat. Érdekes megvizsgálni azt, hogy ha két operátor (egymás után) hat egy függvényre, akkor számít-e az operátorok sorrendje. Láttuk azt, hogy ha két operátor egymás után hat egy függvényre, akkor azt az "operátorok szorzási" műveletével fejezzük ki. Az operátorok között definiáltuk az összeadás (különbség) műveletét is. A két operátorból ennek a két algebrai műveletnek a kombinációjával egy újabb operátor képezhető, amelyet a két operátor ún. "kommutátorának" hívunk. Ha a kommutátor(operátor) zérus, akkor ez azt jelenti, hogy a két operátor egymás utáni alkalmazásakor a sorrendjük felcserélhető. Röviden azt mondjuk, hogy "a két operátor felcserélhető". Mint azt majd látni fogjuk a kommutátoroknak igen fontos szerepe van a kvantummechanikai méréselméletben. Emiatt valójában nem is az a fontos, hogy az alaplennységekhez (koordináta és impulzus) milyen operátorokat rendelünk, hanem az, hogy ezeknek a kommutátorai mivel egyenlők. Ezeket "felcserélési törvényeknek" vagy "kommutációs relációknak" nevezzük.

A második axiómánkat ki kell tehát egészítenünk avval, hogy megadjuk a koordináta és impulzuskomponensek között fennálló felcserélési törvényeket.

OROSZ L. Kvantummechanika 38. oldal

Fontos tétel a következő:

Ha két operátor felcserélhető, akkor a sajátfüggvény-rendszerük megegyezik.

Két esetet különböztethetünk meg.

Az első esetben a két (függvény)operátor olyan, hogy különböző változójú függvényekre hatnak. Ekkor a közös sajátfüggvény-rendszer a két operátor sajátfüggvényeinek a szorzatából áll.

A másik esetben a két operátor olyan, hogy az egyik operátor a másiknak egy hatványsorba fejthető függvénye. Ez létezhet, hiszen az operátorok összeadása és szorzása jól definiált műveletek. Ekkor a két operátor sajátfüggvényei ugyanazok lesznek és a sajátértékek mintegy öröklik az operátorok közötti függvénykapcsolatot is.

1.2.3. A kvantummechanikai méréselmélet alapjai

Láttuk azt, hogy a $\Psi(\vec{r}, t)$ állapotfüggvény Born féle fizikai értelmezése egy olyan intuitív kijelentés volt, amelyet a mérési tapasztalatok igazoltak. (Intuíció: a dolgok lényegének ösztönös felismerése)

Az elektronra (mikro részecskékre) vonatkozó valószínűségi kijelentések csak a méréseken keresztül értelmezhetők. Ezért szükség lesz majd a "mérés" fogalmának a precíz definiálására. Addig is a "mérésen" a klasszikus fizikában már megszokott eljárást fogjuk érteni. A mérést magát egy mérőrendszer végzi. Ez egyrészt tartalmaz egy olyan berendezést, amely egy adott állapotú elektron (vagy egyéb részecske) előállítására alkalmas, másrészt egy mérőműszert, amelyik az ezen az elektronon (részecskén) végrehajtott mérés eredményét kijelzi. A mérőrendszert egy blokk diagrammal szemléltethetjük. A mérőrendszer mindkét része igen bonyolult lehet. Gondoljunk csak azokra a hatalmas részecskegyorsítókra, amelyekkel a földi körülményekhez képest igen különleges állapotú részecskéket lehet "gyártani". Valamint azokra az igen bonyolult számítógépek által vezérelt detektorokra, amelyek a mérőműszer szerepét töltik be. A funkció a lényeg, nem a bonyolultsági fok! Egy mérőműszer természetesen csak egyféle dinamikai változó mérésére alkalmas (hiszen egy adott méréskor csak egyféle eredményt jelezhet). Így beszélhetünk, pl.: helymérő, impulzusmérő, energiamérő, stb... műszerekről.

A negyedik axiómához a hullámfüggvény valószínűségi értelmezésének az általánosításán keresztül juthatunk el, a következőképpen. Legyen adva egy φ állapotú elektron (1.axióma)! Az egyszerűség végett tételezzünk fel egy egydimenziós modellt, azaz $\varphi(x)$ állapotfüggvény csak az x koordinátának legyen a függvénye! Legyen ebben az állapotban az elektron energiája E (3.axióma)! Ez azt jelenti, hogy ha valahányszor megmérnénk a φ állapotú elektron energiáját arra mindig E értéket kapnánk. Ezért az energiamérés átlaga is E lesz. Ezt az E értéket, mint az energiamérés átlagát, a $\varphi(x)$ állapotfüggvény ismeretében a Schrödinger egyenletből egy skalár szorzat segítségével ki tudjuk számítani: $\langle E \rangle_\varphi = \langle \varphi | \hat{A} | \varphi \rangle$. Ugyanekkor a $\varphi(x)$ állapotfüggvény ismeretében, a Born-féle valószínűségi értelmezés felhasználásával ki tudjuk számítani a helymérés várható értékét (a helymérés átlagát) is: $\langle x \rangle_\varphi = \langle \varphi | \hat{x} | \varphi \rangle$. Azt tapasztaljuk, hogy mind az energiamérés, mind pedig a helymérés várható(átlag)értékére formailag ugyanolyan típusú matematikai kifejezést kapunk. Ezek után az eredményeink általánosíthatóak. Azaz kimondjuk a **negyedik axiómát**, amely szerint:

"Egy tetszőleges φ állapotú állapotú elektron (részecske) esetén, egy tetszőleges "A" dinamikai változó mérésének a várható (átlag) értéke a $\langle \varphi | \hat{A} | \varphi \rangle$ skalár szorzat segítségével számítható ki."

;

Mielőtt tovább mennénk, iktassunk be "pihentetőnek" illetve "kedvesínálónak" egy kis "Filozofikus Közjátékot":

Az eddigiekben megalkottuk a kvantummechanika axiómarendszerét. Az axiómarendszer helyességét a mérési eredmények igazolják. Mi ezt (a szakmai érdeklődésünknek és a céljainknak megfelelően) az elektron(ok) viselkedésének a leírására fogjuk felhasználni. Így az alkalmazott matematikai egyenleteink is ennek felelnek majd meg. Ez azonban nem azt jelenti, hogy a kvantummechanika közölt axiómái csak az elektronokra érvényesek. Ugyanez az axiómarendszer, de

egy általánosabb és absztraktabb formában, alkalmas a ma ismert valamennyi mikrofizikai jelenség leírására is. Mi ezzel a tanulmányaink során nem tudunk foglalkozni. De jó az, ha tudjuk, hogy a felírt axiómákkal egy olyan szemlélethez és paradigma rendszerhez (gondolkodási sémák rendszeréhez) jutottunk, amellyel a ma ismert (majdnem!) valamennyi fizikai jelenség (a gravitációt kivéve!) tárgyalható. A fizikusok vágya az, hogy az ismert négy kölcsönhatás (úgy, mint az erős, gyenge, elektromágneses és gravitáció) egyetlen egy kölcsönhatásból levezethető legyen. Eddig a gravitáció még kicsúszott a kezeink közül, de a másik három már valamiféle egységbe vonható. Az úton tovább kell haladni, bár az elméleti nehézségek óriásiak.

Az út neve a "GUT = Grand Unification Theories = Nagy Egyesítési Elméletek".

Az eddigi kísérleti és elméleti részecskefizikai ismereteink lehetővé teszik, hogy megbízhatóan reprodukáljuk az univerzum állapotát a nagy robbanást követő 10^{-18} (!!!) másodperctől kezdve napjainkig. De még sejtelmünk sincsen arról, hogy milyen meglepetéseket tartogat a Természet, ha születésének korábbi titkait kutatjuk. Az eddigi úton (GUT) mindvégig azt a kvantummechanikát használtuk, amelynek egyszerűsített változatát az előzőekben "kitaláltuk".

Joggal mondhatjuk, hogy a KVANTUMMECHANIKA az emberiség szellemi alkotásainak a csúcsa. Teljesítőképessége (az Univerzum titkainak a feltárása) és gyakorlati használhatósága (mai modern technológiák) minden eddigi szellemi alkotás fölé emelik ŐT ! .

OROSZ L. Kvantummechanika 41. oldal

Ezen kis kitérő után térjünk vissza a kvantummechanikai méréselmélet kidolgozásához.

Láttuk azt, hogy a 3. és a 4. axióma a részecskék dinamikai jellemzőinek a mérésével kapcsolatosan tesz alapvető kijelentéseket. Szükség van tehát annak a pontos definiálására, hogy mit is kell értenünk "mérésen" a kvantummechanikában.

Induljunk ki a triviális esetből! Ekkor az elektron egy olyan állapotban van, amelyet egy olyan α_i függvény reprezentál (1. axióma), amelyik a mérendő \mathbf{A} dinamikai változóhoz rendelt \hat{A} operátor (2. axióma) i-edik sajátfüggvénye, azaz $\hat{A}\alpha_i = A_i \cdot \alpha_i$. Ekkor, valahányszor "megmérjük" az \mathbf{A} dinamikai változót, mindannyiszor az A_i sajátértéket kapjuk (3. axióma). A mérendő dinamikai változó szempontjából azt mondhatjuk tehát, hogy az elektron a mérés előtt egy "sajátállapotban" volt és a mérés során mindvégig abban is maradt. Ezen hosszú és bonyolult mondatok helyett röviden azt szoktuk mondani, hogy az elektron egy α_i "sajátállapotban" volt és a mérés "sajátállapotban" történt.

Bonyolultabb az eset akkor, amikor az elektron olyan állapotban van, amelyet egy olyan φ függvény reprezentál (1. axióma), amelyik nem tartozik a mérendő \mathbf{A} dinamikai változóhoz rendelt \hat{A} operátor (2. axióma) sajátfüggvényei közé. Ekkor pongyolán, de röviden azt mondjuk, hogy a mérést "nem sajátállapotban" végezzük. Mi lesz ekkor a mérés eredménye? Keressük meg azt az axiómát, amelyik közvetlenül választ adhat erre a kérdésre! Ez csak a 4. axióma lehet, hiszen a 3. axióma közvetlenül csak a sajátállapotban történő mérésre alkalmazható. Azaz a szóban forgó esetben a megméréndő \mathbf{A} dinamikai változó várható(átlag)értékét tudjuk csak előre kiszámítani. Szükség van tehát arra, hogy precízen megmondjuk, hogy mit is jelent a kvantummechanikai mérés során a várható(átlag)érték méréssel történő meghatározása. Ezen (egyáltalán nem triviális) kísérleti kiértékelési mód megadása igen szemléletesé válik, ha előbb néhány, egyszerű elméleti megfontolást teszünk.

Elemi számolással és az axiómák felhasználásával a kérdéses várható értékre (az átlagértékre) egy igen fontos matematikai kifejezést kapunk. A levezetés során felhasználtuk azt, hogy az \mathbf{A} dinamikai változóhoz rendelt \hat{A} operátornak az A_i sajátértékeihez tartozó α_i sajátfüggvényei a Hilbert tér egy bázisát adják és így a φ állapotfüggvény ezen bázisfüggvények szerint sorbafejthető. A sorfejtési együtthatókat a_i jelöli. Eredményül az adódik, hogy a mérés átlagértéke (a várható érték) az A_i sajátértékeknek $|a_i|^2$ -el súlyozott összege lesz, azaz:

$\langle A \rangle_\varphi = \sum_i |a_i|^2 A_i$. A súlyozási együtthatók az a_i sorfejtési együtthatókkal fejezhető ki. A φ állapotfüggvény

normája miatt az $|a_i|^2$ súlyozási együtthatók összege egy: $\sum_i |a_i|^2 = 1$. Az eredmény az elemi valószínűség

számításban tanultak alapján matematikailag könnyen értelmezhető.

A fizikai értelmezéshez további megfontolások szükségesek.

A mondandónk jobb kifejezhetősége végett finomítsuk a szóhasználatunkat és vezessük be az "elemi mérés" és a "mérés" fogalmát. Ez a két fogalom némileg hasonlít a valószínűs égszámításban használt "elemi esemény" és "esemény" fogalmakhoz. Bevezetésének didaktikai célja van. Az irodalomban **nem !! található** meg, mert ott mindkét fogalomra ugyanazt a "mérés" szót használják. A szövegkörnyezetből következik, hogy pontosan melyik fogalomról van éppen szó.

Elemi mérésnek fogjuk nevezni azt, amikor egy valamilyen állapotban lévő elektron (részecske) kölcsönhatásba lép a mérőműszer detektorával és ennek hatására az egy adott "értéket jelez". Pongyolán, de röviden azt fogjuk mondani, hogy a mérőműszerünket "rákapcsoltuk" az adott állapotú elektronra (részecskére). A 3.axióma értelmében egy elemi mérés eredménye csak egyetlen egy sajátérték lehet. Ha egy adott állapotú elektronon ugyanazon dinamikai változónak sok elemi mérését hajtunk végre, akkor a dinamikai változó méréséről beszélünk.

Nézzük meg, hogy az imént bevezetett fogalmak segítségével a tárgyalt méréseket hogyan tudjuk értelmezni (interpretálni).

A "sajátállapotban történő" mérés során A dinamikai változó mérését egy α_i sajátállapotban hajtjuk végre, akkor minden elemi mérés eredménye ugyanaz az A_i sajátérték lesz. A mérés eredménye tehát az A_i sajátérték maga.

Mint azt láttuk, a "nem sajátállapotban történő mérés" esetén a mérés várható értéke a mérendő dinamikai változó sajátértékeinek súlyozott átlagaként számítható ki. A valószínűség számításban tanultak értelmében az $|a_i|^2$ súlyozó együtthatókat valószínűségekként kell értelmeznünk. Ez most az alábbi módon tehető meg:

Tekintsünk egy φ állapotú elektront! MÉRJÜK meg ennek az elektronnak azt a fizikai tulajdonságát, amelyet az A dinamikai változóval jellemzünk! Ha ezen a φ állapotú elektronon egy elemi mérést végrehajtunk, akkor ennek eredménye a 3.axióma szerint csak valamelyik A_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) sajátérték lehet. Végezzünk el N db elemi mérést, de ügyeljünk arra, hogy minden elemi mérés előtt az elektron ugyanabban a φ állapotban legyen. A mérés tehát most N db elemi mérésből áll. Minden egyes elemi mérés eredménye (véletlenszerűen!) valamelyik sajátérték lesz. Most a mérés eredményének azt a hisztogramot tekintjük, amelyik az elemi mérések során adódó A_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) sajátértékek relatív gyakoriságát tartalmazza. Ez azt jelenti, hogy N db elemi mérés közül N_i esetben adódott A_i sajátérték. A valószínűségszámításban tanultak alapján $N \rightarrow \infty$ esetén az A_i sajátérték N_i/N relatív gyakorisága annak a valószínűségét adja, hogy egy elemi mérés eredménye éppen A_i lesz.

A kvantummechanikában a mérés tehát az alábbi módon interpretálható. A mérés előtt az elektron valamilyen φ állapotban van. Az, hogy ismerjük-e ezt az állapotot vagy sem most nem lényeges. A gyakorlatban mind a két eset előfordul. Egyszerűen tekintsük adottnak ezt a φ állapotot. Meg akarjuk mérni az A dinamikai változót. Rákapcsolva az A dinamikai változót mérő műszert a rendszerre (egy elemi mérést végrehajtva) a műszer valamelyik A_i sajátértéket fogja mutatni. De ez egyben, a 3.axióma szerint, azt is jelenti, hogy az elektronunk éppen α_i állapotban van. Azaz az elemi mérés során az elektron a kezdeti φ állapotból a mérőműszerrel való kölcsönhatás következtében az α_i állapotba ment át. Az elemi mérés előtt csak azt tudjuk megmondani, hogy mi annak a valószínűsége, hogy az elektron φ állapota pl. α_i állapotra fog változni. Azt mondjuk erre, hogy "elemi mérés pillanatában(!)" dől az el, hogy melyik állapot fog létrejönni (realizálódni).

Tehát egy elemi mérés kimenetelére (általában az események bekövetkezésére) a kvantummechanika "ab ovo" (eleve azaz már az axiómák szintjén!) csak valószínűségi kijelentéseket tud tenni.

Ez alapvetően más, mint az, amit a klasszikus fizikában (mechanikában) tapasztaltunk. Ott a valószínűségi kijelentések mögött mindig egy szigorúan kauzális (ok-okozati) "alvilág" húzódott meg. Gondoljunk pl. a statisztikus fizikában tanultakra, ahol a gázmolekulák mindegyike az egzakt Newton törvények szerint mozgott, azaz bármelyik molekula mozgása elvileg determinisztikus volt. Praktikus okokból (a 10^{23} nagyságú, hatalmas részecskeszám miatt) tértünk rá a statisztikus tárgyalásra. Mindez azonban az elméleti, elemi alapokat nem érintette.

Mindez azért izgalmas dolog, mert a kvantummechanikában a Természet (jelenlegi ismereteink szerinti) legalapvetőbb törvényeit fogalmaztuk meg. A klasszikus fizika szigorú kauzalitásán nevelkedett szemléletünk számára nagyon mehökkentő kijelentés az, hogy a Természet alaptörvényei véletlenszerűek. Azaz nincsen egy kauzális "alvilág" a kvantummechanikai események mögött (hiszen, ha lenne, akkor az axiómáink nem lennének alaptörvények). Legalább is eddig még ilyet senki soha nem tapasztalt! Ez az "okok nélküli véletlen" nehezen emészthető fogalom. Nagyon úgy néz ki, hogy Einstein kétkedése ellenére az Úristen mégis csak kockajátékos!

Az elmondottak filozófiai következményei beláthatatlanok.

Különösen ismeretelméleti vonatkozásai izgalmasak, ezért óvakodnunk kell az elhamarkodott és felületes kijelentésektől!

1.2.4. A koordináta és az impulzus kvantummechanikai tárgyalása

Mint azt láttuk, a 4. axiómához a hullámfüggvény Born féle értelmezésének az általánosításával jutottunk el. Most nézzük meg azt, hogy a 4. axiómából hogyan jön ki a Born féle értelmezés! Mint az ismeretes, ebben az esetben azt tudjuk megmondani, hogy mekkora valószínűséggel található meg az elektron a tér egy tetszőleges pontjában. Tehát helymérésről van szó. Az egyszerűség végett egydimenziós modellen fogunk dolgozni. A bevezetett sémánk szerint a mérőrendszerünk most egy $\varphi(x)$ állapotú elektrontól és egy helykoordináta mérő műszerből áll. A helymérés eredménye a tapasztalatok szerint bármekkora lehet. Azaz az \hat{X} dinamikai változóhoz rendelt \hat{x} operátor sajátértékei folytonos spektrumot adnak. Ez némi nehézséget jelent a további matematikai lépésekben. Azért, hogy ezt könnyebben elviseljük, mindent a már megtanult diszkrét spektrum mintájára fogunk csinálni. Így pontosan tudni fogjuk azt, hogy honnan hová akarunk eljutni. Mint azt említettük, az \hat{x} operátor x sajátértéke bármilyen valós szám lehet, ezért a sajátértékek és így a sajátfüggvények halmaza "kontinuum számosságú". Ez azt jelenti, hogy a sajátértékek ill. a sajátfüggvények nem számlálhatók meg. Ezért nem alkalmazhatunk egy $i=1,2,3,..$ számláló indexet. Ehelyett bevezetünk egy folytonosan változó paramétert, amely átveszi a számláló index szerepét, és a sajátfüggvények megkülönböztetésére szolgál. Célszerű ennek az azonosító paraméternek magát a (folytonos) sajátértéket választani. Így tehát a $\chi(x, x')$ sajátfüggvényben az x betű a változót az x' szimbólum pedig az azonosító paramétert jelöli. Ez azt jelenti, hogy az x' sajátértékhez tartozó, x változótól függő függvényről van szó. A levezetés menete mindenben követi a már jól ismert diszkrét spektrumú esetet. Annyi csak a különbség, hogy a (diszkrét) szummázások helyett most (folytonos) integrálokat kell használni. A levezetés célja meghatározni azt, hogy mi annak a valószínűsége, hogy a kezdetben $\varphi(x)$ állapotú elektron az elemi helymérés hatására a $\chi(x, x')$ állapotba megy át. Ez más szavakkal azt is jelenti, hogy meghatározzuk annak $P(x')$ valószínűségét, hogy a helymérés eredménye x' lesz, azaz, hogy az elektront az x' helyen találjuk. Hasonlóan a diszkrét esethez ez a valószínűség most is a $\langle \chi | \varphi \rangle$ skalár szorzattal kapcsolatos.

A $P(x')$ valószínűség meghatározásához ismernünk kell az \hat{x} operátornak a $\chi(x, x')$ sajátfüggvényeit. Mi a Schrödinger féle operátorokat használjuk, ezért az \hat{x} operátor az x -el való szorzást jelenti. A sajátérték egyenlethől látszik az, hogy a $\chi(x, x')$ sajátfüggvény nem tartozhat az eddig használt H függvényter elemei közé. Valójában nem is tekinthető a hagyományos értelemben vett függvénynek. A függvényfogalom általánosításával kapható ún. disztribúciók közé tartozik és Dirac-deltának hívják. A nevét P.A.M. Dirac-ról

kapta, aki először oldotta meg ezt a sajátérték problémát. Ezek után már meghatározható a $\langle \chi | \varphi \rangle$ skalár szorzat és így a keresett valószínűség is. Eredményül a várt Born-féle kifejezést kapjuk.

OROSZ L. Kvantummechanika 45. oldal

Az előzőekben meghatároztuk a helykoordináta operátor sajátfüggvényeit. Oldjuk most meg a másik alaplmenyiségre, az impulzusra vonatkozó sajátérték problémát is. A p_x , p_y és p_z impulzus komponensékhöz tartozó operátorok egymással felcserélhetők és egymástól független változókra hatnak. Ez azt jelenti, hogy közös sajátfüggvény-rendszerük van, ami a különböző változójú sajátfüggvények szorzatából áll. (Lásd a 38. oldalon elmondottakat.) Eredményül azt kapjuk, hogy az impulzus sajátértékei és sajátfüggvényei éppen a jól ismert, a de-Broglie által intuitív módon bevezetett síkhullámok. Ez pont összhangban van az eddigiekkel.

Láttuk tehát, hogy sem a helykoordináta operátor sajátfüggvényei (Dirac delta disztribúciók) sem pedig az impulzus operátor sajátfüggvényei (nem normálható síkhullámok) nem tartoznak a H Hilbert tér elemei közé.

Belátható azonban, hogy ezek az állapotfüggvények előállíthatók a Hilbert tér elemeinek "határértékekként". Ezért (egy lehetséges módszerként) ezeket a "állapotfüggvényeket" is hozzávesszük a H halmazhoz, és az így kiegészített H^* téren fogjuk értelmezni az 1. axiómát.

OROSZ L. Kvantummechanika 46. oldal

1.2.5. A határozatlansági reláció

A helyes kvantummechanikai szemléletünk kialakításának egyik igen fontos állomásához érkeztünk. A kapott összefüggések alapján végérvényesen szakítanunk kell a megszokott klasszikus fogalmainkkal és egy másfajta gondolkodásmódot kell önmagunkban kialakítanunk. Mindez nem nélkülözhet némi filozófiai kitérőt sem.

Tekintsünk egy φ állapotú elektront és mérjük ezen két dinamikai változót (legyen ez A és B)! Vigyázzunk most is arra, hogy minden elemi mérés előtt az elektronunk φ állapotban legyen! A mérés eredménye két hisztogram lesz, amely a két dinamikai változó sajátértékeinek relatív gyakoriságait tartalmazza. Az axiómák segítségével előre meghatározhatók a két hisztogram jellemző adatai. Ezek a várható értékek (átlagértékek) és a négyzetes szórások. A várható(átlag) értékeket a 4. axióma alapján közvetlenül kiszámíthatjuk. Nézzük meg van-e valamiféle kapcsolat a két szórás (ΔA és ΔB) között? A kérdés indokolt, hiszen a két mérést ugyanabban a φ állapotban lévő elektronon történik.

A szórások kiszámításánál is a kvantummechanikai módszereit kell követnünk. Először is a szórás klasszikus definícióját lefordítjuk a kvantummechanika "nyelvére", majd az axiómák felhasználásával elvégezzük a szükséges számításokat.

A szórás matematikai definíciója a következő: "az átlagtól való eltérés négyzetének az átlagából vont négyzetgyök." A kvantummechanikai számításokban az "átlagot" a 4. axióma előírása szerint kell képezni. Ehhez pedig szükség van az "átlagtól való eltérés" (\hat{A} illetve \hat{B}) operátorára. Ezt az operátort a 2. axióma szerint kell képeznünk. Azaz először megadjuk a klasszikus definíciót, majd utána a dinamikai változók helyébe operátorokat írunk. Az átlagérték nem dinamikai változó, hanem egy skalár érték, ezért a hozzá rendelt operátor az ezzel a számmal való szorzás lesz. A két dinamikai változó kvantummechanikai viszonyát a hozzájuk rendelt \hat{A} és \hat{B} operátorok csererelációja adja meg. Egyszerűen bizonyítható, hogy a \hat{A} és \hat{B} operátorok között is ugyanez a cserereláció érvényes. Képezzük a $\hat{G} = g \cdot \hat{A} + j \cdot \hat{B}$ operátort, ahol g tetszőleges valós paraméter. \hat{G} nem reprezentál semmilyen dinamikai változót, mert nem önadjungált. Egyszerűen egy matematikai segédmenyiségnek kell tekintenünk. Képezzük a $\hat{G}\varphi$ függvény normáját, amelyik definíció szerint egy nem negatív valós mennyiség. Jelöljük ezt $I(g)$ -vel. Az adódik, hogy $I(g)$ a valós g paraméter négyzetes függvénye.

Ahhoz, hogy $I(g)$ ne legyen negatív, az szükséges, hogy a "g" paraméter megfelelő együttthatóiból képzett "diszkrimináns" ne legyen pozitív. Ebből a feltételből a ΔA és ΔB szórásokra egy egyenlőtlenség adódik. Ez az ún. Heisenberg féle határozatlansági reláció. Eszerint ha a két dinamikai változóhoz rendelt két operátor nem cserélhető fel, akkor a szórások szorzata nagyobb, mint egy pozitív szám. Ez azt jelenti, hogy nem létezik olyan állapot, amely esetén mindkét dinamikai változó "egyszerre" nulla szórással mérhető.

Tekintsük az x és a p_x között fennálló határozatlansági relációt. Eszerint az elektron lehet például egy olyan állapotban, hogy a helye közel nulla szórással mérhető. Azaz az elektron tér egy meghatározott pontjának nagyon kicsi környezetében található. Ekkor azonban az impulzusmérés szórása nagyon nagy lesz, azaz erről semmi biztosat nem tudunk mondani. Ugyanakkor viszont, van olyan állapotú elektron is, amelynek az impulzusa egy jól meghatározott érték. Ekkor viszont az elektron helymérése lesz nagyon bizonytalan.

Eddig mindig azt mondtuk, hogy egy φ állapotú elektronon N (sok) elemi mérést végzünk. Ezt azonban nem lehet megvalósítani! Ennek az oka a következő. Amikor az elemi mérés során az elektron a mérőműszer detektorával kölcsönhatásba lép, akkor ott mindig reális (mikro)fizikai objektumokkal találkozunk (atomokkal, ionokkal, elektronokkal, elektromágneses térrel, stb...), hiszen a mérőműszer is az anyagi világunk része. A kölcsönhatás során a mérendő elektron mintegy "elkeveredik" a mérőműszert alkotó elektronok között. Mivel minden elektron teljesen egyforma, így őt onnan már visszavenni nem lehet. Azaz egy elemi mérést csakis egy elektronon és csak egyetlen egyszer lehet elvégezni. Akkor hogyan lehet értelmezni az N (sok) elemi mérésből álló mérést? A válasz egyszerű, ha figyelembe vesszük azt, hogy minden elektron tökéletesen egyforma, azaz nem lehet őket egymástól megkülönböztetni. Eszerint nem egyetlen φ állapotú elektronon mérünk N (sok)-szor, hanem N (sok) azonos φ állapotú elektronon mérünk egyszer. Az eredmény nyilván ugyanaz lesz. A két dinamikai változó "egyszerre" történő mérése is hasonlóan történik. Ekkor a sok azonos φ állapotú elektron felén megmérjük az egyik, a másik felén megmérjük a másik dinamikai változót. Az így kapott szórások között a Heisenberg féle határozatlansági reláció fog fennállni. Az elektronok egyformasága miatt a sok független elektronon történő mérésből adódó fizikai következtetéseinket egy elektron (helyesebben: "az" elektron) tulajdonságainak tekintjük. Ilyen módon alakítottuk ki szemléletünket. Ezért beszélhettünk az előzőekben mindig "egy (!) elektron"-ról.

A fontossága miatt foglaljuk össze a határozatlansági relációról hallottakat. A középiskolában azt tanultuk, hogy "egy elektron helyét és impulzusát nem lehet egyszerre pontosan meghatározni". Ez a megfogalmazás könnyen félreérthető, mert nem tisztázza az "egyszerre" szó jelentését. A most tanultak szerint a precíz állítás az, hogy: "Nincsen olyan állapot, amelyben lévő elektronok sokaságán elvégezve a hely- és az impulzusmérést, mindkét mérés szórása tetszőlegesen kicsinek adódik." Az "egyszerre" szó tehát szigorúan véve nem egyidejűsége utal, hanem az ugyanabban az állapotban történő mérést jelenti. Kvalitatív szemléletünkben, egyetlen elektron dinamikai tulajdonságainak jellemzésekor, mégis joggal asszociálunk az egyidejűsége. Hiszen egy objektum (elektron) a tulajdonságaival minden időpillanatban egyszerre rendelkezik. De ezzel ismét a filozófia (az ismeretelmélet) területére tévedtünk és ez már nem tartozik ennek a tantárgynak a témájába.

A határozatlansági reláció alapvető szerepet játszott a kvantummechanikai szemléletünk kialakulásában. A mikrofizikai modelljeink kvalitatív értelmezésekor állandóan használjuk.

1.2.6. A klasszikus mechanika és a kvantummechanika kapcsolata

1.2.6.1. Az Ehrenfest tétel

Az eddigiekben a megmérendő elektron φ állapota nem függött az időtől. Most a $\Psi(t)$ időfüggő állapotban történő mérést fogjuk megvizsgálni. Mivel az elektron állapota állandóan változik így a dinamikai tulajdonságai is pillanatról pillanatra változni fognak. Szó sem lehet tehát arról, hogy egy dinamikai változó mérését (ami sok elemi mérést jelent) egy elektronon egy adott időpontban elvégezzük. Ennek ellenére a továbbiakban is mindig az "egy részecske - sok elemi mérés" szemléletet fogjuk használni az elméleti számításainkban. De tudnunk kell azt, hogy a mérések szempontjából ez valójában mit is jelent.

Legyen az elektronunk a $\Psi(\vec{r}, t)$ időfüggő állapotban. Ekkor az \hat{A} dinamikai változó mérésének a várható értéke is fog függni az időtől. Ezt az időfüggést az átlagérték idő szerinti első deriváltja (a változás sebessége) jellemzi. A várható érték a 4. axióma alapján kiszámítható, az állapot időfüggését az 5. axióma határozza meg. Eredményül az adódott, hogy az \hat{A} dinamikai változó várható értékének a változási sebessége, a \hat{H} energiaoperátor és az \hat{A} operátor kommutátorától függ:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\Psi(t)} = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] | \Psi \rangle$$

Ez az általános Ehrenfest tétel.

OROSZ L. Kvantummechanika 49. oldal

1.2.6.2. A klasszikus mechanika mozgásegyenlete

Az Ehrenfest tétel alkalmazásaként elsőnek vizsgáljuk meg az impulzus várható értékének az időbeli változását. A tételt alkalmazva az adódik, hogy az impulzus várható értékének idő szerinti első deriváltja a potenciális energia negatív gradiensének az átlagával egyenlő:

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \langle \Psi | \left(-\frac{\partial V}{\partial x} \right) | \Psi \rangle$$

A kapott eredmény fizikai értelmezésekor két esetet kell megvizsgálnunk.

Először tekintsünk azt amikor az elektron potenciális energiája nagyon nagyot változik abban a térrészben ahol az elektron nagy valószínűséggel megtalálható. Ez a helyzet pl. atomokba kötött elektronoknál. Ekkor az impulzusátlag időderiváltjának a kiszámításához szükség van a hullámfüggvény ismeretére is. Ez pedig csak a kvantummechanika alkalmazásával kapható meg.

A másik esetben a potenciális energia térbeli változása elhanyagolhatóan kicsi abban a térrészben, ahol az elektron egy adott időpillanatban nagy valószínűséggel van. Ez a helyzet lép fel, amikor az elektront makroszkopikus tartományban változó elektromágneses térbe helyezzük (pl. egy kondenzátorba). Ekkor a potenciális energia gyakorlatilag állandónak tekinthető az elektron "helyén". A kvantummechanikai átlagképzés során a hullámfüggvény az összefüggéseinkből eltűnik:

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle \approx \left[-\frac{\partial V}{\partial x} \right]_{\langle x \rangle}$$

Tehát a mozgástörvényt a kvantummechanika használata nélkül is meg tudjuk fogalmazni, azaz eljutottunk a klasszikus mechanikához. Látható tehát, hogy Newton második axiómáját le tudtuk vezetni a kvantummechanikából. Tehát a kvantummechanika magában foglalja a klasszikus mechanikát, azaz (ahogy annak lennie is kell!) a korrespondencia elv teljesül.

OROSZ L. Kvantummechanika 50. oldal

Most már válaszolhatunk arra a kérdésre is, hogy hogyan alakult ki a klasszikus tömegpont fogalmunk. Egy makroszkopikus méretű objektum mérése során a klasszikus mérőműszerünkben egy időpontban (ami a mikroszkopikus skálán mindig egy véges időtartam) nagyon nagy számú kvantummechanikai elemi mérés zajlik le. Ennek az átlagát jelzi ki a műszerünk mint a klasszikus mérés eredményét. A határozatlansági relációt nem érzékeljük, hiszen a szórások bőven beleesnek a klasszikus mérőműszer pontatlansági tartományába. Azaz a klasszikus mechanikai mérések szerint egy részecske egy adott "időpillanatban" a tér egy adott "pontjában" lesz és adott impulzussal fog rendelkezni. Ennek alapján alkottuk meg a részecskék tömegpont modelljét.

Második példaként vizsgáljuk meg a helykoordináta átlagának az időbeli változását! Az Ehrenfest tétel eredményeként tulajdonképpen a sebesség kvantummechanikai definíciójához jutottunk:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle$$

Az eddigiekből már lezűrhető az az általánosságban is igaznak bizonyuló következtetésünk, mely szerint a kvantummechanikai átlagok között éppen a klasszikus mechanika összefüggései állnak fenn. Ez

tulajdonképpen az általános Ehrenfest tétel verbális megfogalmazása. Így részletes számítások nélkül is felírhatjuk például a munka-tétel Ehrenfest szerinti alakját. Ez a szilárdtest-fizikában nagyon fontos szerephez jut majd.

1.2.6.3. Az energia és az idő közötti határozatlansági reláció

Az "idő" fogalmunk talán a legérdekesebb és bölcséleti szempontból a legizgalmasabb fogalmaink közé tartozik. A "Mi az idő?" kérdésre bizony nehezen tudnánk kapásból válaszolni.

A születésünk után átélt sok szubjektív élmény hatása következtében, lassan érlelődött bennünk az idő szubjektív érzete, majd ennek kapcsán a fogalma. Kisgyermek korunkban a tér-fogalmunk hamarabb alakult ki, mint az időé. Előbb értettük meg azt, hogy mit is jelent az "itt" és az "ott", mint a "most" és a "majd". "Hányat kell még aludni Karácsonyig?" kérdeztük. "Addig kell itt ülnöd, amíg a nagymutató legfelülre nem érkezik!" mondták a felnőttek. Mindkét esetben az "időről" illetve annak "múlásáról" volt szó. Emlékezzünk csak vissza arra, hogy mikor tanultuk meg azt, hogy "mennyi időt mutat az óra"! Ez kb. 8-9 éves korunkra tehető. A hosszú évek során kialakult szubjektív időérzetünk igen csalóka. Egy fogorvosi székből ülve a percek is óráknak tűnnek, a szereteteink körében szinte "repülnek az évek". Az absztrakt idő fogalmunk kialakulása még csak ezek után következett.

Mi tehát az idő? Pusztán csak egy szubjektív fogalom, vagy tőlünk függetlenül létező "valami". Vajon az Univerzumban is "telik az idő?" A Nagy Bumm "előtt is létezett az idő?" vagy az is "csak akkor keletkezett, mint amikor az Univerzum maga?". A kozmológia modern elmélete próbál válaszolni ezekre a kérdésekre (is). A természettudomány (jelesül a fizika) válaszait azonban a "szubjektív időérzettel terhelt elménkkal" kell értelmeznünk és ez egyáltalán nem egyszerű. Nem véletlen, hogy minden filozófiai és vallási rendszer sarkalatos pontja az "időhöz, mint olyanhoz" fűződő viszonya. Gondolhatunk a "lélekvándorlás" ciklikus időfogalmára, vagy a kereszténység lineáris időszemléleten alapuló tanaira, amely szerint az "Örökkévaló" az "örök étellel" kecsegteti vagy riasztja a mulandó embert. "Mi tehát az idő?" Érvényes-e itt is az ismert paradoxon: "Használni jól tudom, de megmagyarázni nem!". Einstein ezt így fogalmazta meg:

"Tudjuk, hogy mi az óra és mi a méter, nem tudjuk azonban, hogy mi az idő és mi a tér."

Emlékezetünkbe idézhetjük Madách Imre szavait az időről és annak mulásáról:

"Minden mi él az egyenlő soká él,
A százados fa, s egy napos rovar.
Eszmél, örül, szeret és elbukik,
Midőn napszámát s vágyait betölté.
Nem az idő halad: mi változunk,
Egy század, egy nap szinte egyre megy.
....."

Ezen kis, lírai kitérő után, térjünk vissza a kvantummechanikához!

Ismereteink már elegendőek ahhoz, hogy a kvantummechanika egyik leginkább félreérthető és ezért legtöbbször valóban félre is értett tételét precízen megfogalmazzuk.

Tekintsünk egy $\Psi(\vec{r}, t)$ időfüggő állapotban lévő elektront és mérjük meg egy *adott időpontban* az energiáját és egy másik \hat{A} dinamikai változóját is! Az *adott pillanatban* a mérés eredménye két hisztogram lesz, értelemszerűen az egyik az energiára, a másik az \hat{A} dinamikai változóra vonatkozik. Mivel az elektron állapota időben változik, így a mérés eredményét szemléltető hisztogramok is pillanatról pillanatra változni fognak. Az Ehrenfest tétel segítségével kiszámítható a várható(átlag)értékek változási sebessége.

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] | \Psi \rangle.$$

A Heisenberg féle határozatlansági reláció pedig megadja a szórások közötti kapcsolatot.

$$\Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \Psi \left| \left[\hat{H}, \hat{A} \right] \right| \Psi \right\rangle \right|.$$

Vezessünk be egy Δt mennyiséget (karakterisztikus időtartamot), amelyik a rendszerben lezajló időbeli változásokat jellemzi, az alábbi definíció szerint:

$$\Delta A = \frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle \cdot \Delta t$$

Azért, hogy jobban megértsük ennek a szükségességét tegyünk ismét egy kis filozófálgató kitérőt:

Az "időt", mint olyat mérni nem tudjuk. Mérni csak valamilyen dinamikai mennyiséget (változót) tudunk. A dinamikai mennyiségek megváltozása kelti bennünk az "idő múlásának" a képzetét. Minden, a Természetben meglévő, vagy az ember által konstruált óra "működésének" is ez az alapelve (pl.: a Hold sarlója megváltozik, a Nap felkel és lenyugszik, a homokszemek lepereregnek, az óramutató elmozdul, a kvarckristály alakja eltorzul, az elektromágneses térerősség megváltozik, stb.) Ha a változások a testünket felépítő sejtek fiziológiai tulajdonságait jellemzik, akkor az "idő múlását" bizony már saját bőrünkön is tapasztalhatjuk. ("Nem az idő halad: mi változunk...") Ezért alakult ki bennünk az az érzés, mintha az "idő" mint olyan **önállóan létező, abszolút valami lenne**. Ezt a képzetet az einsteini relativitáselmélet már meg kellett, hogy rendítse bennünk (egyidejűség, idődilatáció, ikerparadoxon). A kvantummechanika remélhetőleg a maradék illúzióinkat is eloszlatja majd. Ez persze nem megy könnyen! Beidegzett gondolkodásmódunkhoz, megszokott szemléletünkhöz sokszor irracionális makacssággal ragaszkodunk. Néha "jobban hiszünk a szemünknek, mint az eszünknek". Minden esetre mindez vitára készlet! Mint azt a bevezetőben elmondottak is sugallhatják, az időről, mint olyanról folytatott vitáink és elmélkedéseink nagyon messzire vezethetnek. Fontos filozófiai kategóriáról van szó, amellyel kapcsolatos gondolataink a tiszta racionalitástól, a bennünk szunnyadó miszticizmus gyökeréig ívelhetnek. Mindez azonban nem tartozik e tantárgy keretei közé.

Ott tartottunk tehát, hogy bevezettük a Δt mennyiséget. Ennek fizikai jelentése igen szemléletes. A Δt az az időtartam, ami alatt az A dinamikai változó átlaga éppen egy szórásnyit változik. Ez tehát egy olyan karakterisztikus, mérhető időtartam, amellyel a $\Psi(t)$ időbeli változását jellemezhetjük. Az állapotfüggvény ugyanis közvetlenül nem(!) mérhető, így annak időbeli megváltozása sem. Az előzőekben elmondottak szerint tehát az A dinamikai változó az óra szerepét tölti be. Ha a Δt kicsi, akkor ez azt jelenti, hogy az elektron az állapotát gyorsan változtatja. Ha a Δt nagy, akkor ez a változás lassú. Ezek után a fenti egyenletek kombinációjából egy igen fontos és érdekes összefüggésre juthatunk, nevezetesen:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Láthatóan a számolásunk eredményeképp egy határozatlansági relációt kapunk a Δt karakterisztikus időtartam és az energia ΔE szórása között.

Az elmondottak szemléltetésére nézzünk egy példát. Tekintsük a Hidrogén atom energiaszintjeit. Az alapállapotban az elektron végtelen hosszú ideig tartózkodhat ($\Delta t \rightarrow \infty$) ezért az alapállapot energiája egy pontos érték ($\Delta E \rightarrow 0$). Ha az elektron egy magasabb energiaszintre kerül, akkor egy idő múlva visszaugrik az alapállapotba, azaz az állapota megváltozott ($\Delta t = \text{véges}$). Ezért a gerjesztett állapot energiája nem egy pontos érték, hanem véges szórással rendelkezik ($\Delta E = \text{véges}$). A legerjesztődéskor kisugárzott energia sem lesz egy meghatározott érték, és ez elmondható a kisugárzott foton frekvenciájáról is. Azt mérjük, hogy az atom által kisugárzott fotonok frekvenciája nem egy meghatározott érték, hanem egy keskeny frekvenciatartományba esik, amelynek a "szélességét" $\Delta E \equiv \hbar \cdot \Delta \nu$ összefüggéssel definiáljuk. Azt mondjuk erre, hogy a spektrumvonal elmosódik, kiszélesedik. Ezt a spektroszkópiában tapasztalt jelenséget a spektrumvonalak ún. "természetes vonalszélességének" nevezzük.

* * * * *

Ezzel befejeztük a kvantummechanikával kapcsolatos általános vizsgálódásainkat. Megtanultuk az alaptörvényeket (axiómákat) és a belőlük fakadó azon következtetéseket, amelyek már elegendőek ahhoz, hogy megértsük a kvantummechanikai gondolkodásmód lényegét. Az egyéni szemléletet azonban mindenkinek magának kell kialakítania önmagában. Természetesen még nagyon sok igen érdekes részlet van, amiről nem hallottunk. Ez azonban már nem tartozik azon ismeretek közé, amelyek feltétlenül elvárhatók lennének egy mérnöktől.

Ezek után az eddigiek alkalmazásával fogunk foglalkozni. A végső célunk azon mikrofizikai folyamatok alapelveinek a megértése, amelyek az elektronikus eszközökben lezajlanak.

Előtte azonban még meg kell értenünk azt, hogy egyetlen atom hogyan épül fel és hogyan “működik”.

FOLYTATÁS: “FIZ32Mb.*”**