III. Formalizmus

1. A Hilbert-tér

A kvantum elmélet két konstrukción alapszik: hullámfüggvények és operátorok. A rendszer állapotait a hullámfüggvények míg a mérhető mennyiségeket az operátorok reprezentálják.

→ Matematikailag a hullámfüggvények absztrakt vektorok, melyeken az operátorok lineáris transzformációként hatnak. A kvantummechanika természetes nyelve tehát a lineáris algebra.

Emlékeztető: Egy N dimenziós térben $|\alpha\rangle \longrightarrow \vec{a} = (a_1, a_2, \dots a_N)^T$

→ A belső szorzata két vektornak:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_N^* b_N$$

→ A lineáris transzformációkat mátrixokkal reprezentáljuk (N×N)

$$|\beta\rangle = T|\alpha\rangle \rightarrow \vec{b} = \hat{T}\vec{a} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & & \\ T_{21} & T_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & T_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

→ A kvantummechanikában felbukkanó „vektorok" függvények, melyek egy végtelen dimenziójú térben élnek. Esetükben a fenti jelölés alkalmazása problémákba ütközik. (A belső szorzat nem mindig létezik)

→ X összes függvényének gyűjteménye egy vektorteret alkot, ami a mi céljainkhoz túl nagy. Fizikai állapotok reprezentálásához a ψ hullámfüggvények normálhatóknak kell lennie:

$$\int |\psi|^2 dx = 1$$

→ Egy meghatározott intervallumon az összes **négyzetesen integrálható függvény** egy (sokkal kisebb) vektorteret alkot.

$f(x)$ négyzetesen integrálható, ha $\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty$
(a,b) intervallumon

/Az (a,b) intervallum az esetek többségében $(-\infty, \infty)$/

→ Az így kapott vektorteret a matematikusok $L_2(a,b)$-nek, a fizikusok Hilbert-térnek nevezik. A kvantummechanikában tehát:

$$\boxed{\text{A hullámfüggvények a Hilbert térben élnek}}$$

/A Hilbert-tér egy teljes belső szorzat tér és a négyzetesen integrálható függvényeké csak egy példa a Hilbert térre - valójában minden véges dimenziójú vektortér Hilbert-tér, Mivel azonban az L_2 a kvantum-

mechanika aréndja, a fizikusok ezt értik általában Hilbert-tér alatt. A teljes szó itt arra vonatkozik, hogy a Hilbert-térbeli függvények bármely Cauchy sorozata olyan függvényhez konvergál, mely maga is a Hilbert tér tagja. → Azaz a térben nincsenek lyukak. Egy tér teljességének semmi köze sincs a függvények sorozatának teljességéhez, aminek azt köszönhetjük, hogy bármely más függvényt kifejthetünk azok lineárkombinációival./

→ Két függvény belső szorzata: $\langle f|g\rangle = \int_a^b f(x)^* g(x)\,dx$

→ Ha f és g négyzetesen integrálható (azaz a Hilbert térben élnek), belső szorzatuk garantáltan létezik. (az integrál véges számhoz konvergál)

$$\rightarrow \quad \langle g|f\rangle = \langle f|g\rangle^*$$

$$\rightarrow \quad \langle f|f\rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx$$

→ $\langle f|f\rangle$ valós, pozitív és csak akkor nulla, ha $f(x)=0$.

→ Azt mondjuk, hogy egy fv. **normált**, ha önmagával képzett belső szorzata 1. Két fv. **ortogonális**, ha belső szorzatuk 0, és függvények egy sorozata $\{f_n\}$ **ortonormált**, ha $\langle f_m|f_n\rangle = \delta_{mn}$. Ha a Hilbert tér bármely másik függvénye $\{f_n\}$ lineárkombinációjaként, azaz:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x) \quad \text{formában felírható,}$$

akkor azt mondjuk, hogy az $\{f_n\}$ fv. sorozat teljes.

→ Ha az $\{f_n(x)\}$ fv.ek ortonormáltak, az együtthatók Fourier trükkének segítségével állíthatók elő:

$$c_n = \langle f_n|f\rangle$$

12. Észlelhető mennyiségek (Observables)

Hermitikus operátorok: Egy érzékelhető $Q(x,p)$ mennyiség várható értéke:

$$\langle Q\rangle = \int \psi^* \hat{Q} \psi\, dx = \langle \psi|\hat{Q}\psi\rangle$$

→ Egy mérés eredménye valós kell, hogy legyen, amiből következik, hogy: $\langle Q\rangle = \langle Q\rangle^*$

→ Egy belső szorzat komplex konjugálása viszont megfordítja a sorrendet:

$$\langle \psi | \hat{Q}\psi \rangle = \langle \hat{Q}\psi | \psi \rangle,$$

aminek minden hullámfüggvényre teljesülnie kell. Az ilyen operátorokat Hermitikus operátoroknak nevezzük.

A mérhető mennyiségeket hermitikus operátorok reprezentálják

Példa: Hermitikus-e az impulzus operátor?

$$\langle f | \hat{p} g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{\hbar}{i} \frac{dg}{dx} dx = \frac{\hbar}{i} \left[f^* g \right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right)^* g \, dx = \langle \hat{p} f | g \rangle$$

/ha f és g négyzetesen integrálható, akkor $\pm\infty$-ben nullához kell tartaniuk./

Determinált állapotok: Egy észlelhető mennyiség identikus rendszereken történő mérésekor a kvantummechanikai bizonytalanság következményeként mindig más és más eredményt kapunk. Kérdés: van-e arra lehetőség, hogy a fizikai állapotot úgy „állítsuk be", hogy abban Q minden mérésekor ugyanazt az értéket (legyen q) kapjuk? Ez az állapot a $\hat{Q}$ operátor egy determinált állapota lenne.

→ A megoldást az operátor sajátértékegyenlete adja meg:

$$\hat{Q}\psi = q\psi$$

↳ ψ az operátor sajátfüggvénye, q pedig a hozzá tartozó sajátérték.

A determinált állapotok $\hat{Q}$ operátor sajátfüggvényei

→ A sajátértékek kollekcióját az operátor spektrumnak nevezzük.

→ Néha két (v. több), lineárisan független sajátfüggvény osztozik ugyanazon a sajátértéken. Ekkor azt mondjuk, hogy a spektrum degenerált.

→ Például: A teljes energia determinált állapotai a Hamilton-operátor sajátfüggvényei: $\hat{H}\psi = E\psi$, ami pontosan az idő független Schrödinger-egyenlet.

Feladat III/1. Vizsgáljuk meg a $\hat{Q} = d^2/d\varphi^2$ operátort, ahol φ az azimutális polárkoordináta. Hermitikus az operátor? Ha igen, mik a sajátfüggvényei és sajátértékei? Mi a spektruma? Degenerált a spektrum?

→ Periodikus a határfeltétel: $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$. A sajátérték egyenlet:

$$\hat{Q}\psi = q\psi \longrightarrow \frac{d^2\psi}{d\varphi^2} - q\psi = 0 \quad \text{(másodrendű lin. hom diff. egy.)}$$

$$\frac{d^2\psi}{d\varphi^2} = \lambda^2 e^{-\lambda\varphi}, \quad \frac{d\psi}{d\varphi} = -\lambda e^{-\lambda\varphi}, \quad \psi = e^{-\lambda\varphi} \Rightarrow e^{-\lambda\varphi}(\lambda^2 - q) = 0$$

$$\lambda = \pm\sqrt{q} \longrightarrow \text{Az ált. mego.: } \psi(\varphi) = Ae^{\sqrt{q}\varphi} + Be^{-\sqrt{q}\varphi} = \underline{\underline{Ae^{\pm\sqrt{q}\varphi}}}$$

A határfeltételből: $Ae^{\sqrt{q}\varphi} = Ae^{\sqrt{q}(\varphi+2\pi)} \Longrightarrow \cancel{2\pi}\sqrt{q} = \cancel{2\pi} i n \Rightarrow \underline{\underline{q = -n^2}}$

$n = -\infty, \dots -2, -1, 0, 1, 2, \dots \infty$

⇒ A spektrum kétszeresen degenerált, hiszen minden n értékhez 2 sajátfüggvény tartozik (a plusz, ill. minusz jel a kitevőben.)

---

3. A hermitikus operátor sajátfüggvényei:

→ A figyelmünk kp-jába a hermitikus operátorok sajátfüggvényei kerülnek tehát. (Fizikai értelemben a mérhető mennyiségek determinisztikus állapotai.)

→ Ha a spektrum diszkrét, akkor a sajátfüggvények a Hilbert-térben fekszenek és valós fizikai állapotot testesítenek meg.

→ Ha a spektrum folytonos, akkor a sajátfüggvények nem normálhatók és nem reprezentálnak lehetséges hullámfüggvényeket (habár lineárkombinációjuk elképzelhető, hogy normálható.)

→ Egyes operátoroknak csak diszkrét spektruma van (pl.: harm. osc. Hamilton operátora) egyesekné csak folytonos (pl: szabad részecske Ham. op.), de olyanok is akadnak, melyeknek van diszkrét és folytonos részük is. (pl: véges és pot. kút Hamilton operátora)

Diszkrét spektrum:

→ Matematikailag a normálható sajátfüggvényei egy herm. operátornak két fontos tulajdonsággal rendelkeznek.

1. Tétel: A sajátértékek valósak. Biz.: T.f.h $\hat{Q}f = qf$, és

$$\langle f|\hat{Q}f\rangle = \langle \hat{Q}f|f\rangle. \quad \text{Ekkor}$$

$$q\langle f|f\rangle = q^*\langle f|f\rangle \Longrightarrow q = q^*$$

2. Tétel: A különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvények ortonormáltak. gonálisak.

Biz.: T.f.h.: $\hat{Q}f = qf$, és $\hat{Q}g = q'g$, $\hat{Q}$ pedig hermitikus.

Ekkor: $\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f|g\rangle$, azaz $q'\langle f|g\rangle = q^*\langle f|g\rangle$,

amiből mivel $q' \neq q^*$: $\langle f|g\rangle = 0$

⇒ Tehát ezért voltak a végtelen pot. kút v. a harmonikus oszc. stacionárius állapotai ortogonálisak.

⇒ A 2. tétel sajnos nem mond semmit a degenerált állapotokról ($q = q'$). Azonban ha két v. több fv. ugyanazon a sajátértéken osztozik, bármely lineárkombinációjuk is sajátfüggvény, ugyanazzal a sajátértékkel, így használhatjuk Gram-Schmidt ortogonalizációs eljárást, hogy ortogonális sajátfüggvényeket konstruáljunk minden degenerált altérben. (Szerencsére ezt szinte sosem kell expliciten megtenni.)

Axióma: A megfigyelhető operátorok sajátfüggvényei teljesek. A Hilbert tér bármely függvénye felírható a lineárkombinációjukként.

Folytonos spektrum:

→ Mivel ekkor a belső szorzat nem feltétlenül létezik, az 1. és 2 tételek nem állnak fenn, ugyanakkor a teljesség, ortogonalitás és valósság valamilyen értelemben továbbra is fennállnak.

3.1 példa Találjuk meg az impulzus operátor sajátértékeit és sajátfüggvényeit!

→ Legyen $f_p(x)$ a sajátfüggvény és p a sajátérték:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}f_p(x) = p f_p(x) \implies f_p(x) = Ae^{ipx/\hbar}$$

→ Az eredmény nem integrálható négyzetesen tetszőleges (komplex) p értékre. Az impulzusoperátornak nincsenek sajátfüggvényei a Hilbert térben!

⇒ Ha azonban megköveteljük, hogy a sajátértékek csak valósak lehetnek egy pót-ortogonalitáshoz jutunk.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x)\,dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')\frac{x}{\hbar}}\,dx = |A|^2 2\pi\hbar\,\delta(p-p')$$

Ha $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, akkor: $f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$, ~> akkor

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p-p')$$

-> Megdöbbentően hasonlít az igazi ortogonális feltételhez. Az indexek itt folytonosak, a Kronecker deltát pedig felváltotta egy Dirac-delta. Fenti egyenletet nevezhetjük Dirac ortonormalitásnak.

-> A legfontosabb, hogy a sajátfüggvények teljesek, ha helyettesítjük az összegzést egy integrállal: Bármely (négyzeteren integrálható) fv. felírható a köv. alakban:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) f_p(x)\, dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar}\, dp$$

-> A kifejtési együtthatókhoz ismét Fourier-trükkjének segítségével jutunk:

$$\langle f_{p'} | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \langle f_{p'} | f_p \rangle\, dp = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \delta(p-p')\, dp = c(p')$$

Az impulzus sajátfüggvényei szinusoidok, melyek hullámhossza:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

-> Ez a jó öreg de Broglie formula. Mint kiderült, ez kicsit bonyolultabb annál, mint ahogy de Broglie elképzelte, hiszen nem létezik pontosan meghatározott impulzussal. Készíthetünk azonban egy normálható hullámcsomagot egy keskeny impulzus-intervallummal, mely megfelel az elvártaknak.

Mit tanultunk a fenti példából? Habár $\hat{p}$ egyetlen sajátfüggvénye sem Hilbert tér-beli, egy meghatározott családjuk a „közelben él", kvázi-normálható tulajdonsággal. Nem reprezentálnak valós fizikai állapotot, mégis rendkívül hasznosak, ahogy az kiderült az egy-dimenziós esetnél.

IV. Általánosított statisztikai interpretáció:

-> Az I. fejezetben megtanultuk, hogy kalkuláljuk ki annak valószínűségét, hogy egy részecskét egy megadott intervallumon belül találunk, illetve azt is, hogy miként határozhatók meg az egyes mérhető mennyiségek várható értékei. A II. fejezetben megtanultuk a lehetséges energia kimenetek számolását és azok valószínűségeit. Most meghatározzuk az általános statisztikai interpretációt, mely majd lehetővé teszi tetszőleges