Operátorok és sajátértékeik

Amennyiben az $\boldsymbol{O}$ operátornak a ψ függvény (a rendszer ψ állapota) sajátfüggvénye (sajátállapot), λ pedig az ehhez tartozó sajátérték:

$$\boldsymbol{O}\psi = \lambda\psi$$

Tehát sajátfüggvényre alkalmazva, a hermitikus operátor hatása mindössze egy valós számmal való szorzás.
Fizikai jelentés: amennyiben a rendszer az adott fizikai mennyiségre nézve sajátállapotban van, akkor a mérés eredménye az adott sajátállapothoz tartozó érték: λ.

A sajátfüggvények legyenek regulárisak, tehát folytonosak és négyzetesen integrálhatók. Csak ekkor bírhatnak fizikai jelentéssel.
Erre a belső szorzat definíciója miatt van szükség:

$$(\phi, \psi) = \int_V \phi^* \psi \, dV$$

Az állapotfüggvények legyenek egyre normáltak: $(\psi, \psi) = 1$

Amennyiben két állapot ortogonális (egymást kizáró állapotai a rendszernek):

$$(\phi, \psi) = 0$$

Időtől független Schrödinger-egyenlet

Amennyiben az ***O*** operátor az energia operátora, akkor a sajátérték egyenlet az időtől független Schrödinger-egyenletet adja:

$$\boldsymbol{E}\psi = E\psi$$

Egy *V* potenciáltérben mozgó, *T* kinetikus energiával rendelkező részecskére, az energia a potenciális és kinetikus energiák összege, vagyis a Hamilton-függvény: $H = T + V$
Tehát az energia operátora a Hamilton operátor:

$$\boldsymbol{H}\psi = E\psi$$

Nem relativisztikus esetben a kinetikus energia: $T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

Tehát a Schrödinger-egyenlet:

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \boldsymbol{V}\right)\psi = E\psi$$

Derékszögű Descartes koordinátarendszerben:

$$\left(\frac{\boldsymbol{p_x}^2 + \boldsymbol{p_y}^2 + \boldsymbol{p_z}^2}{2m} + \boldsymbol{V}(x, y, z)\right)\psi = E\psi$$

Ortonormált bázis

A rendszerek állapotait megadó ψ függvények tulajdonságaikat tekintve **vektoroknak** tekinthetők a végtelen (vagy legalábbis nagyon nagy) dimenziójú Hilbert-térben. Ez a tér a rendszer összes lehetséges hullámfüggvényéből tevődik össze.

A rendszer Ψ hullámfüggvénye általában nem valamelyik sajátállapot.

Neumann János:
Amennyiben a hermitikus operátor sajátértékei diszkrétek, akkor a sajátfüggvények teljes ortonormált függvényrendszert alkotnak (ortonormált bázis).

Ezekkel az eredeti állapot sorbafejthető:

$$\Psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + \cdots + a_n\psi_n$$ az a_i-k komplex számok

Tehát a rendszer állapota sorbafejthető a mérés lehetséges sajátállapotainak segítségével.

A hullámfüggvények felírására Dirac bevezette a bra-ket jelölést:

$\psi \coloneqq |\psi\rangle$ illetve $\psi^* \coloneqq \langle\psi|$

ket vektor bra vektor

Így a belső szorzat: $(\phi, \psi) = \langle\phi|\psi\rangle$

Mérés várható értéke

Ha tehát a rendszer nincs a mérendő mennyiség operátora nézve egy sajátállapotban, akkor a lehetséges mérési eredményekre csak valószínűségeket tudunk megállapitani, illetve kiszámolható a mérés várható értéke (lehetséges eredmények valószínűségekkel súlyozott átlaga):

$$\bar{O} = (\Psi, \boldsymbol{O}\Psi) = \int \Psi^* \boldsymbol{O}\Psi dV = \sum_{k=1}^{n} \int {a_k}^* {\psi_k}^* \lambda_k a_k \psi_k dV$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \lambda_k {a_k}^* a_k \int {\psi_k}^* \psi_k dV = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k {a_k}^* a_k$$

Itt tehát az ${a_k}^* a_k = |a_k|^2 = w_k$ szorzat annak a valószínűsége, hogy a mérés tényleges elvégzésekor a λ_k sajátértéket kapjuk eredményül.

Természetesen a valószínűségek összege egységnyi kell legyen, hiszen a mérés során a lehetséges sajátértékek valamelyikét mindenképpen megkapjuk, és más érték nem fordulhat elő!

$$\sum_{k=1}^{n} {a_k}^* a_k = 1$$

Időtől függő Schrödinger-egyenlet

A rendszer Ψ állapota az időnek folytonos függvénye, időbeli fejlődését az időtől függő Schrödinger-egyenlet írja le:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \boldsymbol{H}\Psi = 0$$

A kvantumfizika klasszikus (Niels Bohr féle vagy koppenhágai értelmezés) elképzelése szerint a hullámfüggvény kétféle folyamaton mehet keresztül:

1-es folyamat: Egy $\psi_1, \psi_2, \psi_3,$ sajátállapotokkal rendelkező mérés elvégzésekor a rendszer eredeti Ψ állapota a ψ_k sajátállapotba ugrik $a_k{}^* a_k = |(\Psi, \psi_k)|^2$ valószínűséggel. Ez egy nem folytonos változás!

2-es folyamat: Az elszigetelt rendszer állapotának folytonos, determinisztikus változása az idő függvényében az időtől függő Schrödinger egyenlet szerint.

Schrödinger azt az elképzelést, hogy a fizikai rendszer állapota mindaddig bizonytalan, amíg a mérést el nem végezzük, igencsak furcsának találta: macskás gondolatkísérlet.

Hugh Everett III pedig a hullámfüggvény 1-es folyamat szerinti összeomlását találta logikailag és matematikailag nem értelmezhetőnek, ezért eltekintett attól (Everett-féle vagy oxfordi interpretáció).

Házi feladat 5:

Elolvasni a következő cikket a kvantumfizika értelmezéseiről:

https://ojs.uni-miskolc.hu/index.php/multi/article/view/646/404