Osnove kvantne mehanike

V kvantni mehaniki ne moremo istočasno poznati položaja in hitrosti delca, zato gibanje delca ne moremo opisati s trajektorijo kot klasične delce. Stanje kvantnega sistema opiše valovna funkcija, ki pa nima neke fizikalne predstave in lahko rečemo, da je nekakšen polizdelek, vendar pa vsebuje informacijo o vseh količinah, ki jih lahko izmerimo v sistemu. Valovna funkcija je v splošnem kompleksna funkcija koordinat in časa in predstavlja verjetnostno amplitudo, da najdemo sistem v stanju, ki ga opisuje. Valovna funkcija sistema in stanje sistema se v kvantni mehaniki uporablja ekvivalentno. Še enkrat moramo poudariti, da valovna funkcija nima nobenega fizikalnega pomena. Je pripomoček, iz katerega šele z nadaljnjimi računi dobimo rezultate, ki jih je mogoče dobiti z merjenjem. Valovna funkcija se spreminja s časom in krajem. Fizikalni pomen ima šele verjetnostna gostota oziroma gostota delca, ki je kvadrat absolutne vrednosti valovne funkcije

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t)$$

Če valovna funkcija opisuje stanje enega delca, mora biti integral verjetnostne gostote po vsem prostoru, kjer se delec lahko giblje, enak 1.

$$\int |\psi(\vec{r},t)|^2 d\vec{r} = \int \rho(\vec{r},t) d\vec{r} = 1$$

Vidimo, da v kvantni mehaniki ne poznamo natančnega gibanja delca, temveč le porazdelitev delca po prostoru. Iz te porazdelitve pa lahko dobimo podatke o povprečni gibalni količini, povprečnem položaju, vrtilni količini itd. Na podoben način, kot govorimo o verjetnostni porazdelitvi po položaju, lahko govorimo tudi o verjetnostni porazdelitvi po gibalni količini. Količine iz klasične fizike, kot so položaj, gibalna količina niso spremenljivke, temveč operatorji.

Valovna funkcija mora imeti naslednje lastnosti. Biti mora

- končna (če ni končna, imamo v tej točki neskončno gostoto, kar je fizikalno nesmiselno)
- zvezna (če ni zvezna, ima v točki nezveznosti lahko dve različni gostoti, kar pa je fizikalno nesmiselno)
- zvezno odvedljiva (če nima zveznega odvoda, imamo v točki nezveznega odvoda različno gostoto toka delcev. To je možno samo, če imamo v tej točki izvor delcev, nastajanja delcev pa s klasično kvantno(?) mehaniko ne moremo obravnavati)
- kvadratno integrabilna, če imamo opravka z vezanimi stanji. (Če funkcija ni kvadratno integrabilna, potem ne moremo zadostiti pogoju, da moramo v nekem prostoru zagotovo najti delec, se pravi, da je integral gostote po vsem območju enak 1.)

Naj bo ψ valovna funkcija kvantnega sistema in $\hat{A}$ katerikoli linearni operator neke fizikalne količine. Če velja

$$\hat{A}\psi = a\psi,$$

je a lastna vrednost operatorja $\widehat{\mathrm{A}}$ in hkrati tudi izmerjena vrednost količine, ki jo omenjeni operator opisuje. Ψ pa je lastna funkcija operatorja. Če pa ψ ni lastna funkcija operatorja, potem nam meritev količine, ki jo opisuje operator, lahko da katerokoli vrednost. Rečemo, da vrednost fizikalne količine nima določene vrednosti. Vsako možno vrednost dobimo z neko verjetnostjo. Meritev količine je delovanje operatorja te količine na valovno funkcijo. Rečemo lahko tudi tako, da vsaka meritev količine, ki jo opisuje operator $\widehat{\mathrm{A}}$, postavi sistem v stanje, ki ustreza enemu izmed lastnih stanj tega operatorja. Nadaljnje meritve te količine tega sistema bo vedno dal isto vrednost, ker se je valovna funkcija postavila v valovno funkcijo tega lastnega stanja. Lastna stanja sistema so tista stanja sistema, ki jih operator ne spremeni. Za ponovitev meritve in neodvisno meritev moramo sistem narediti od začetka. Povprečna vrednost dinamične spremenljivke, ki jo opisuje operator $\widehat{\mathrm{A}}$, je enaka

$$\langle\widehat{\mathrm{A}}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r},\mathrm{t})\widehat{\mathrm{A}}\psi(\vec{r},\mathrm{t})d\tau$$

in je enaka povprečni vrednosti vseh meritev. To pomeni vsoto vseh izmerjenih lastnih vrednosti operatorja pomnoženih z verjetnostjo, da se sistem nahaja v lastnem stanju operatorja.