1 Tilastollisen kvanttimekaniikan perusteita

1.1 Mikrotilat

Kvanttimekaniikan yhden hiukkasen systeemin täydellisen kuvauksen antaa sitä vastaava tilavektori $|\Psi\rangle$, joka on (yhden hiukkasen) Hilbertin avaruuteen $\mathcal{H}$ kuuluva vektori. Hilbertin avaruus on *lineaarinen*, ts. kahden sen vektorin kompleksikertoimien summa kuuluu avaruuteen. $\mathcal{H}$:ssa on myös määritelty sisätulo $\langle a|b\rangle$, joka totetuttaa yleiset skalaaritulon aksioomat. Fysikaaliset tilat voidaan aina normittaa ykköseksi, tästä lähtien oletammekin, että kvanttitiloille $\langle\Psi|\Psi\rangle \equiv \|\Psi\|^2 = 1$.

Observaabeleita (havaittavia suureita) vastaavat kvanttimekaniikassa lineaariset hermittiiviset operaattorit $\widehat{\mathrm{A}}$, jotka Schrödingerin kuvassa oletetaan ajasta riippumattomiksi. Observaabelien mahdollisia havaittavia arvoja ovat $\widehat{\mathrm{A}}$:n ominaisarvot, jotka yhdessä vastaavien (ajasta riippumattomien) ominaistilojen kera saadaan selville ominaisarvoyhtälöstä. $\widehat{\mathrm{A}}\,|\mathrm{n}\rangle$,

jonka ratkaisut on tässä yksinkertaisuuden vuoksi oletettu diskreetiksi. Kaikki alla johdettavat tulokset voidaan kuitenkin helposti yleistää tapaukseen, jossa hermittiivisen operaattorin $\widehat{\mathrm{A}}$ ominaispekstri (eli ominaisarvot ja tilat) on jatkuva. Tällöin kaikki summat tilojen $|\mathrm{n}\rangle$ yli korvataan yksinkertaisesti integraaleilla.

Operaattorin oletetusta hermittiivisyydestä seuraa, että sen ominaisarvot ovat reaalisia ja ominaisvektorit muodostavat Hilbertin avaruuden täydellisen ortonormittuvan kannan. Voidaan siis olettaa, että ominaistilat toteuttavat relaation

$$\langle\mathrm{n}|\mathrm{m} = \delta_{\mathrm{mn}}\rangle\,,$$

minkä lisäksi yksikköoperaattori voidaan kirjoittaa muodossa

$$1 = \sum |\mathrm{n}\rangle\,\langle\mathrm{n}|$$

Observaabelin $\widehat{\mathrm{A}}$ odotusarvo kvanttitilassa $|\Psi\rangle$ saadaan näin kirjoitettua muotoon:

$$\langle\widehat{\mathrm{A}}\rangle = \langle\Psi|\widehat{\mathrm{A}}|\Psi\rangle = \sum_{m,n} \langle\Psi|m\rangle\,\langle m|\widehat{\mathrm{A}}|n\rangle\,\langle n|\Psi\rangle = \sum_n A_n|\langle n|\Psi\rangle|^2$$

jossa tulkitsemme siten, että tekijät $|\langle n|\Psi\rangle|^2$ antavat todennäköisyyden sille, että tarkasteltavalle observaabelille saadaan mittauksessa diskreetti arvo A_n.

Usein on kätevää kirjoittaa tilavektorit komponenttiesityksenä sopivan hermiittisen operaattorin ortonirmitetussa kannassa.

$$\Psi = \sum_n \langle n|\Psi\rangle\,|n\rangle\,,$$

missä olemme käyttäneet yllä johdettua yksikköoperaattorin muotoa. Koordinaattikannassa $|\vec{x}\rangle$