Függvénynek a matematikában olyan hozzárendelést nevezünk, amely bizonyos számoknak más számokat feleltet meg. Pl. a szinuszfüggvény a 0, $\pi/2$, π számokhoz rendre a 0, 1, 0 számokat rendeli.

Operátoron pedig olyan műveleti utasítást értünk, amely bizonyos függvényekhez más függvényeket rendel. Az általános operátorfogalomra példák a következők:

a *differenciáloperátor*, amely pl. x^2-hez, $\log x$-hez, e^x-hez rendre differenciálhányadosaikat, a $2x$, $1/x$, e^x függvényeket rendeli;

a *gyökvonás*, amely pl. x^2-hez, e^x-hez rendre a $\pm x$, $\pm e^{x/2}$ függvényeket rendeli;

az *abszolútérték-képzés*, amely a függvényekhez bizonyos pontokban önmagukat, bizonyos pontokban (-1)-szeresüket rendeli. Így pl. e^x-nek, $-x^2$-nek rendre az e^x, x^2 függvényeket felelteti meg.

A fenti példák mutatják, hogy az operátorfogalom a függvényfogalom magasabb szinten történő matematikai továbbfejlesztésének tekinthető. Az operátorok még többfélék, mint maguk a függvények. Az operátorok fizikai alkalmazásainál bizonyos korlátozó feltevésekkel kell élnünk. Amiként a klasszikus fizikában sem engedjük meg, hogy egy tömegpont pályáját szakadásos függvény írja le, úgy a kvantumfizikában sem használhatunk akármilyen operátort.

Az operátorokkal kapcsolatban valós változók olyan függvényeivel fogunk foglalkozni, amelyek

egyértékűek,
folytonosak,
korlátosak és négyzetesen integrálhatók.*

A felsorolt követelményeket kielégítő függvényeket a továbbiakban *reguláris függvényeknek* nevezzük. A reguláris függ-

* Négyzetesen integrálhatónak nevezzük azokat a függvényeket, amelyek abszolút értéke négyzetének az egész tartományra képezett határozott integrálja létezik.

vények összességét első részletes tanulmányozójáról HILBERT-féle függvénytérnek, röviden HILBERT-*térnek* hívják. A fizikában alkalmazott operátorok, a fenti követelményeket kielégítő függvényekre hatnak: a HILBERT-tér elemeit viszik át egymásba. A reguláris függvények jelölésére a kis görög betűket ($\psi, \varphi, \ldots$) használjuk. Az operátorokat vastagon szedett betűkkel jelöljük. Így azt a függvényt, amelybe a ψ függvényt az $\mathbf{O}$ operátor átviszi, $\mathbf{O}\psi$-vel jelöljük.

Az operátorok közül a fizikában azokat alkalmazzuk, amelyeknek a következő sajátságaik vannak:

$$\mathbf{O}(\psi_1+\psi_2) = \mathbf{O}\psi_1+\mathbf{O}\psi_2, \tag{7.1}$$

$$\mathbf{O}(k\psi) = k(\mathbf{O}\psi). \tag{7.2}$$

Itt $\mathbf{O}$ a kérdéses operátor, ψ, ψ_1 és ψ_2 olyan reguláris függvények, amelyekre az $\mathbf{O}$ operátor értelmezve van, k tetszőleges (valós, képzetes vagy komplex) szám. A (7.1) és (7.2) követelményeket kielégítő operátorokat *lineáris operátoroknak* nevezzük. (A felsorolt példák közül a differenciál-operátor lineáris, a gyökvonás és abszolútérték-képzés azonban nem. Utóbbiaknál általában sem a (7.1) sem a (7.2) követelmény nem teljesül).

Két operátor összegét a következőképpen értelmezzük:

$$(\mathbf{O}_1+\mathbf{O}_2)\psi = \mathbf{O}_1\psi+\mathbf{O}_2\psi.$$

Két operátor szorzata az operátorok egymás után való alkalmazásának felel meg:

$$\mathbf{O}_1\mathbf{O}_2\psi = \mathbf{O}_1(\mathbf{O}_2\psi) = \mathbf{O}_1\varphi, \text{ ahol } \varphi = \mathbf{O}_2\psi.$$

Látni fogjuk, hogy az operátorok alkalmazásának sorrendje általában nem közömbös; az operátorok a szorzatban nem cserélhetők fel. Egy operátor négyzetének alkalmazása valamilyen függvényre azt jelenti, hogy az operátort kétszer egymás után alkalmazzuk:

$$\mathbf{O}^2\psi = \mathbf{O}(\mathbf{O}\psi) = \mathbf{O}\varphi,$$

ahol $\varphi = \mathbf{O}\psi$.

Bizonyos esetekben előfordulhat, hogy a kiszemelt $\mathbf{O}$ operátor valamilyen φ függvényt ugyanezen függvény konstansszorosába viszi át,

$$\mathbf{O}\varphi = k\varphi. \tag{7.3}$$

Ilyen φ függvény esetében az operátornak a függvényre való alkalmazása, azaz az operátorral való „szorzás" a k számmal történő szorzásnak felel meg. Azt mondhatjuk, hogy az $\mathbf{O}$ operátor, mint általánosított értelemben vett „mennyiség" a φ előtt állva a k értéket „veszi fel". k-t az $\mathbf{O}$ operátor *sajátértékének*, φ-t az operátor *sajátfüggvényének* nevezzük. A (7.3) összefüggés neve *sajátértékegyenlet.*

Találhatók olyan operátorok, amelynek sajátértékei diszkrét sorozatot alkotnak, pl. $k_1, k_2, \ldots k_n, \ldots$ Az ilyen operátor nyilván alkalmas olyan fizikai mennyiség leírására, amelynek lehetséges értékei szintén diszkrétek és éppen a fenti $k_1, k_2, \ldots k_n, \ldots$ számokkal egyeznek meg. A folytonos és differenciálható függvények helyett a lineáris operátorok nyújtanak alkalmas matematikai eszközt a kvantált értékkészletű fizikai mennyiségek leírására.

A sajátértékek vizsgálata esetén első példaként tekintsük az $\mathbf{O} \equiv \mathrm{d}/\mathrm{d}x$ differenciáloperátort. Ennek (7.3) *sajátértékegyenlete*:

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x} = k\varphi.$$

Az egyenletből következik, hogy $\varphi = Ae^{kx}$, a differenciáloperátor sajátfüggvénye az exponenciális függvény. φ-nek természetesen korlátosnak kell lennie. Ez k valós értéke mellett nem következik be, de akkor igen, ha k képzetes: $k = \pm i|k|$, ahol $|k|$ a k abszolút értékét jelenti.

$$\varphi = Ae^{\pm i|k|x} = A\,(\cos|k|x \pm i\sin|k|x).$$

A differenciáloperátor sajátértékei tehát folytonos sokaságot alkotnak. Sajátérték minden képzetes szám.

Diszkrét sajátértékkészletre példaként tekintsük azt a **P** operátort, amelyet a $\psi(x)$ függvényre alkalmazva a $\psi(-x)$ függvényt szolgáltatja (paritásoperátor):

$$\mathbf{P}\psi(x) = \psi(-x). \tag{7.4}$$

Írjuk fel a **P** operátor sajátértékegyenletét.

$$\mathbf{P}\varphi(x) = k\varphi(x), \quad \text{azaz} \quad \varphi(-x) = k\varphi(x). \tag{7.5}$$

Alkalmazzuk az egyenlet mindkét oldalára még egyszer **P**-t. A jobb oldalon ismét használjuk fel a (7.5) összefüggést. Kapjuk:

$$\varphi(x) = k\varphi(-x) = k^2\varphi(x).$$

Ebből leolvasható, hogy $k^2 = 1$. A **P** operátor k sajátértékei tehát a $+1$ és a -1 számok ($k = \pm\sqrt{1}$). A megfelelő sajátfüggvények a

$$\varphi(-x) = \varphi(x) \qquad (k = +1)$$

sajátsággal értelmezett ún. *páros függvények* (e^{-x^2}, $\cos x$ stb.), illetve a

$$\varphi(-x) = -\varphi(x) \qquad (k = -1)$$

sajátsággal jellemzett ún. *páratlan függvénynek* (xe^{-x^2}, $\sin x$ stb.).

A reguláris függvényekkel végzett számításokban gyakran szerepel két függvény szorzatának integrálja. A jelölések egyszerűsítésére bevezetjük két függvény *skaláris szorzatá-*

nak fogalmát. A skaláris szorzás olyan művelet, amely két függvényhez egy számot rendel a következőképpen:

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)\,\mathrm{d}x. \tag{7.6}$$

A * a komplex konjugáltat jelöli. (Többváltozós függvények esetében mindegyik változó szerint integrálnunk kell a teljes tartományra.)

A (7.6) értelmezés felhasználásával igazolhatók a skaláris szorzat következő sajátságai:

$$(\psi_1, \psi_2+\psi_3) = (\psi_1, \psi_2)+(\psi_1, \psi_3), \tag{7.7}$$

$$(\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1)^*, \tag{7.8}$$

$$(\psi_1, k\psi_2) = k(\psi_1, \psi_2), \tag{7.9}$$

$$(k\psi_1, \psi_2) = k^*(\psi_1, \psi_2), \tag{7.10}$$

$$(\psi_1, 0) = 0. \tag{7.11}$$

E tulajdonságok sokban emlékeztetnek a vektorok skaláris szorzásának műveleti szabályaira. Az analógiát követve két olyan függvényt, amelyeknek skaláris szorzata zérus, egymásra *ortogonálisaknak* mondunk. (Pl. páros és páratlan függvények egymásra ortogonálisak.)

Egy függvénynek önmagával való skaláris szorzata feltétlenül pozitív. E szám pozitív négyzetgyökét a függvény *normájának* nevezzük, és azt a következőképpen jelöljük:

$$||\psi|| = (\psi, \psi)^{1/2}. \tag{7.12}$$

A norma fogalmának olyan szerepe van a függvényeknél, mint a számoknál az abszolút értéknek.

Az $\mathbf{O}^+$ operátort $\mathbf{O}$ *adjungáltjának* nevezzük, ha minden olyan ψ_1 és ψ_2 függvény esetében, melyre $\mathbf{O}$ értelmezve van, fennáll a következő összefüggés:

$$(\psi_1, \mathbf{O}\psi_2) = (\mathbf{O}^+\psi_1, \psi_2). \tag{7.13}$$

Lineáris operátorra egyszerű példa a c komplex számmal való szorzás:

$$\mathbf{O}\psi \equiv c\psi.$$

Az ilyen operátor adjungáltjának (7.9) és (7.10) szerint c komplex konjugáltjával való szorzás felel meg. E példa mutatja, hogy az adjungálás szerepe operátoroknál analóg azzal, amit számoknál a komplex konjugált képzése jelent.

Fizikai alkalmazások esetén a valós számoknak kitüntetett szerep jut: minden mérés valós eredményt ad. Ugyanilyen kitüntetett szerepük van azoknak az operátoroknak, amelyek megegyeznek adjungáltjaikkal:

$$\mathbf{O}^{+} = \mathbf{O}, \text{ azaz } (\psi_1, \mathbf{O}\psi_2) = (\mathbf{O}\psi_1, \psi_2) \tag{7.14}$$

minden ψ_1-re és ψ_2-re. Az ilyen operátorokat *hermitikus operátoroknak* nevezzük. A hermitikus operátorok sajátértékei feltétlenül valósak. Ugyanis

$$\mathbf{O}\varphi = k\varphi,$$

$$(\varphi, \mathbf{O}\varphi) = (\varphi, k\varphi) = k(\varphi, \varphi),$$

másrészt

$$(\varphi, \mathbf{O}\varphi) = (\mathbf{O}\varphi, \varphi) = k^*(\varphi, \varphi), \quad \text{tehát} \quad k = k^*.$$

A mérhető fizikai mennyiségek értékei feltétlenül valós számok. Ezért a fizikában olyan operátorokat kell alkalmaznunk, amelyeknek sajátértékei szintén valósak. A követelménynek a most megismert hermitikus operátorok felelnek meg.

A következőkben kizárólag hermitikus operátorokkal fogunk dolgozni. Operátorokon tehát az alábbiakban mindig *lineáris hermitikus operátort* értünk. (Ez alól kivételt csak az I. Függelékben teszünk.)