Kvantummechanika gyakorlat

(2013/14 őszi félév)

0. óra

Matematikai apparátus

Tekintsünk egy függvényteret, mely tartalmazza a komplex értékű $f(\underline{x}) = f(x, y, z)$ függvényeket és melyekre igaz, hogy négyzetesen integrálhatóak. Ezeket nevezzük Lesbeque-integrálható függvényeknek:

$\forall\, f(\underline{x}) \in \mathcal{L}_2$ –re

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty} |f(x, y, z)|^2 \, dxdydz$$

létezik és véges.

<u>Skalárszorzat:</u>

Ha $f(\underline{x})$ és $g(\underline{x}) \in \mathcal{L}_2$, akkor skalárszorzatuk: $(f, g) = \int f^*(\underline{x}) g(\underline{x}) dx$

Tulajdonságai:

- ha $f, g \in \mathcal{L}_2 \;\Rightarrow \exists (f, g)$
- $(f, g) = (g, f)^*$
- $(f_1 + f_2, g) = (f_1, g) + (f_2, g)$
- $(cf, g) = c^*(f, g); c \in \mathbb{C}$
- $(f, cg) = c(f, g);\;\; c \in \mathbb{C}$

<u>Norma:</u>

Ha $f(\underline{x}) \in \mathcal{L}_2$, akkor f normája: $\|f\| = (f, f)$

$\forall\, f \in \mathcal{L}_2$-re $\|f\| \geq 0$. (Ha $\|f\| = 0 \;\Rightarrow f = 0$)

<u>Ortogonalitás</u>: $(f, g) = 0$

<u>Ortogonális függvény-rendszer</u>: $(f_i, f_j) = 0$, ha $i \neq j$

<u>Ortonormált függvény-rendszer</u>: $(f_i, f_j) = \delta_{ij}$, $(\|f\| = 1)$

ahol δ_{ij} a Kronecker delta: $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{ha } i = j \\ 0, & \text{ha } i \neq j \end{cases}$

Teljes ortonormált függvény-rendszer: ha $\forall\, f \in \mathcal{L}_2$ felírható

$$f = \sum_{i=1}^{\infty} c_i f_i$$

alakba, ahol $c_i \in \mathbb{C}$ a kifejtési együttható és f_i-k adják a teljesen ortonormált bázist.

Állítás: Ha $f = \sum_{i=1}^{\infty} c_i f_i \Rightarrow c_k = (f_k, f)$.

Bizonyítás: $(f_k, f) = (f_k, \sum c_i f_i) = \sum c_i\,(f_k, f_i) = \sum c_i \delta_{ik} = c_k$

Az $\mathcal{L}_2$ függvénytér neve: **Hilbert-tér**, melynek legfontosabb tulajdonsága, hogy van benne teljesen ortonormált függvényleírás.

Függvény normája, kifejtési együtthatókkal:

$$\|f\| = (f, f) = \left(\sum_i c_i f_i\,, \sum_k c_k f_k\right) = \sum_i \sum_k c_i^* c_k (f_i, f_k) = \sum_i \sum_k c_i^* c_k \delta_{ik} = \sum_i |c_i|^2$$

Ha $|c_i|^2 \to \infty$, akkor f nem létezik a Hilbert-térben.

Megjegyzés: $c_i \in \mathbb{C}$ *abszolútértéke:* $|c_i| = \sqrt{(\mathrm{Re}c_i)^2 + (\mathrm{Im}c_i)^2}$

Lineáris operátor: $f \in \mathcal{L}_2$-höz hozzárendeljük $g \in \mathcal{L}_2$-t: $\hat{O} f = g$

Tulajdonságok:

- $\hat{O}(f_1 + f_2) = \hat{O} f_1 + \hat{O} f_2$
- $\hat{O}(c f_1) = c \hat{O} f_1$

Pl: ha $\hat{O} = \frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \hat{O} f = \frac{\partial f}{\partial x}$

Operátorok szorzata: $(\hat{O}_1, \hat{O}_2) f = \hat{O}_1 (\hat{O}_2, f)$ (általában $\hat{O}_1 \hat{O}_2 \neq \hat{O}_2 \hat{O}_1$)

Pl: ha $\hat{O}_1 = x\,\cdot\,;\ \hat{O}_2 = \frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \hat{O}_2 \hat{O}_1 f = \frac{\partial}{\partial x}(x f) = f + x \frac{\partial f}{\partial x}$

$$\Rightarrow \hat{O}_1 \hat{O}_2 f = x\left(\frac{\partial}{\partial x} f\right) = x \frac{\partial f}{\partial x}$$

Inverz operátor: $\hat{O}^{-1} \Rightarrow \hat{O}\hat{O}^{-1} = \mathbb{I}$, ahol $\mathbb{I}$ az identitás vagy egység operátor.

Adjungált operátor: $\hat{O}^{\dagger} \Rightarrow (f, \hat{O} g) = (\hat{O}^{\dagger} f, g)$

Pl: $\hat{O}_1 = x \Rightarrow \hat{O}_1^{\dagger} = x$

$\hat{O}_2 = \frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \hat{O}_2^{\dagger} = -\frac{\partial}{\partial x}$, mert:

$$(f, \hat{O}_2 g) = \int f^* \frac{\partial g}{\partial x} dx = \underbrace{f^* g|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int g \frac{\partial f}{\partial x} dx = (\hat{O}_2^{\dagger} f, g)$$

Önadjungált (hermitikus) operátor: $\hat{O} = \hat{O}^{\dagger}$ Pl: $\hat{O} = i\frac{\partial}{\partial x}$; $\hat{O} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Unitér operátor: $\hat{U}^{\dagger} = \hat{U}^{-1}$

Fontos tulajdonsága: $\hat{U}\hat{U}^{\dagger} = \mathbb{I}$

Ekkor: $(\hat{U}f, \hat{U}g) = (\hat{U}^{\dagger}\hat{U}f, g) = (\hat{U}^{-1}\hat{U}f, g) = (f, g)$

Unitér transzformáció: (áttérés a „vesszős” rendszerbe)

Ha $\forall f \rightarrow \hat{U}f = f'$ és

ha $\forall \hat{O} \rightarrow \hat{U}\hat{O}\hat{U}^{-1} = \hat{O}'$ (ahol $\hat{O} = \hat{O}^{\dagger}$),

akkor : $(f', \hat{O}'g') = (f, \hat{O}g)$

Sajátérték probléma:

$$\hat{O}\Psi = \lambda\Psi,$$

ahol $\hat{O}$ ismert és λ a sajátértéke és Ψ a sajátfüggvénye.

Általában több λ és Ψ létezik:

- ha λ tetszőleges szám egy intervallumban, akkor *folytonos spektrum*ról beszélünk, és $(\Psi, \Psi) = \infty$ (vagyis nem normálható).
- ha λ csak meghatározott (diszkrét) értékeket vehet fel, akkor *diszkrét spektrum*ról beszélünk, és $(\Psi, \Psi) = N < \infty$. Ekkor $\Psi' = \frac{\Psi}{\sqrt{N}}$, így Ψ' is sajátfüggvény és $\|\Psi\| = 1$.

Tétel: Önadjungált (hermitikus) operátor sajátértékei valósak.

Bizonyítás: Geszti Tamás – Kvantummechanika, 6.4 fejezet.

Tétel: Diszkrét spektrumú operátorok sajátfüggvényei teljes-rendszert alkotnak. (Választható teljes ortonormált függvény-rendszer.)

Gyengébb tétel: Ha $\hat{H}$ egy hermitikus operátor $\lambda_1 \neq \lambda_2$ sajátértékekkel, akkor a hozzájuk tartozó sajátfüggvények ortogonálisak: $(\Psi_{\lambda_1}, \Psi_{\lambda_2}) = 0$

Tétel: Ha $\hat{H}$ operátor λ sajátértékéhez több (k db) Ψ_j^{λ} lineárisan független sajátfüggvény tartozik ($j \equiv 1,2, \dots k$), akkor Ψ_j^{λ}-k nem ortogonálisak, de előállíthatók φ_j^{λ}-k, $\varphi_j^{\lambda} = \sum_{l=1}^{k} c_{jl} \Psi_l^{\lambda}$ alakban, így ortogonálisnak választhatók.

Definíció: Ψ függvény $\hat{O}_1$ és $\hat{O}_2$ operátorok szimultán sajátfüggvénye, ha

$$\hat{O}_1\Psi = \lambda_1\Psi$$

és

$$\hat{O}_2\Psi = \lambda_2\Psi$$

Ekkor: $(\hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1)\Psi = 0$,

ahol $\hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1 = [\hat{O}_1, \hat{O}_2]$ –t az operátorok **kommutátor**ának nevezzük.

Az $\hat{O}_1$ és $\hat{O}_2$ operátorok **antikommutátora**: $\{\hat{O}_1, \hat{O}_2\} = \hat{O}_1\hat{O}_2 + \hat{O}_2\hat{O}_1$.

Ha $[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = 0$, akkor $\hat{O}_1$ és $\hat{O}_2$ kommutáló operátorok. Ilyenkor választható közös ortonormált sajátfüggvény-rendszer:

$$\hat{O}_1\varphi_i = \lambda_i\varphi_i$$

$$\hat{O}_2\varphi_i = \mu_i\varphi_i$$

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij}$$

Megjegyzés: λ_i és μ_i nem feltétlenül mind különböző.

A sajátértékek és a sajátfüggvények fontosak, mert az adott fizikai mennyiségek lehetséges értékei a megfelelő operátorok saját sajátértékei, a sajátfüggvények pedig a rendszer jellemzésére szolgálnak.

„Ez az általános szabály: minden megfigyelhető és megmérhető fizikai mennyiséghez tartozik egy operátor, amelynek sajátfüggvényei azok a hullám-függvények, amelyekben az illető mennyiségnek határozott értéke van; ez a határozott érték éppen az operátornak az adott sajátfüggvényhez tartozó sajátértéke."

Geszti Tamás – Kvantummechanika, 6.1 fejezet, 2. bekezdés