Kvantummechanika gyakorlat
(2012/13 őszi félév)

5. óra

1. feladat: Határozzuk meg 1 dimenzióban a térbeli eltolás operátorát, vagyis keressük meg azt az $\hat{U}_{x_0}$ műveletet, melyre: $\hat{U}_{x_0}\psi(x) = \psi(x + x_0)$!

Megoldás: Fejtsük Taylor-sorba a $\psi(x + x_0)$ függvényt $x_0 = 0$ körül:

$$\psi(x + x_0) = \psi(x) + \frac{d\psi}{dx}x_0 + \frac{1}{2!}\frac{d^2\psi}{dx^2}x_0^2 + \frac{1}{3!}\frac{d^3\psi}{dx^3}x_0^2 + ...$$

Tudjuk, hogy az impulzus operátora a hely szerinti deriválás műveletével kapcsolatos: $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$, így

$$\psi(x + x_0) = \psi(x) + \frac{i\hat{p}}{\hbar}\psi(x)x_0 + \frac{1}{2!}\Big(\frac{i\hat{p}}{\hbar}\Big)^2\psi(x)x_0^2 + \frac{1}{3!}\Big(\frac{i\hat{p}}{\hbar}\Big)^3\psi(x)x_0^3 + ...$$

Kiemelhetjük a $\psi(x)$ függvényt:

$$\psi(x + x_0) = \Big[1 + \frac{i\hat{p}}{\hbar}x_0 + \frac{1}{2!}\Big(\frac{i\hat{p}}{\hbar}x_0\Big)^2 + \frac{1}{3!}\Big(\frac{i\hat{p}}{\hbar}x_0\Big)^3 + ...\Big]\psi(x) = e^{\frac{i\hat{p}}{\hbar}x_0}\psi(x),$$

ahol használtuk az exponenciális függvény definícióját. A keresett operátor ezzel:

$$\hat{U}_{x_0} = e^{\frac{i\hat{p}}{\hbar}x_0}.$$

Megjegyzés: azt mondjuk, hogy az $\frac{i\hat{p}}{\hbar}$ operátor az eltolás műveletének generátora, x_0 a paramétere.

2. feladat: Bizonyítsuk a következő két állítást!

a., Legyen c komplex szám. Ha

$$[\hat{A}, \hat{B}] = c,$$

akkor

$$[\hat{A}, e^{\lambda\hat{B}}] = \lambda c e^{\lambda\hat{B}},$$

ahol λ tetszőleges komplex szám.

b., Ha

$$\Big[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{A}\Big] = 0, \qquad \Big[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}\Big] = 0$$

akkor

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}.$$

Megoldás:

a., Számítsuk ki az $[\hat{A}, e^{\lambda\hat{B}}]$ kommutátort!

$$[\hat{A}, e^{\lambda\hat{B}}] = [\hat{A}, \lambda\hat{B} + \frac{\lambda^2}{2!}\hat{B}^2 + \frac{\lambda}{3!}\hat{B}^3 + ...] = [A, \lambda\hat{B}] + [\hat{A}, \frac{\lambda^2}{2!}\hat{B}^2] + [\hat{A}, \frac{\lambda^3}{3!}\hat{B}^3]...$$

Az összeg egyes tagjai rendre így írhatók:

$$[A, \lambda\hat{B}] = \lambda(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = \lambda c,$$

$$\left[\hat{A}, \frac{\lambda^2}{2!}\hat{B}^2\right] = \frac{\lambda^2}{2!}(\hat{A}\hat{B}^2 - \hat{B}^2\hat{A}) = \frac{\lambda^2}{2!}(2c\hat{B} + \hat{B}^2\hat{A} - \hat{B}^2\hat{A}) = \frac{\lambda^2}{2!}2c\hat{B},$$

$$\left[\hat{A}, \frac{\lambda^3}{3!}\hat{B}^3\right] = ... = \frac{\lambda^3}{3!}3c\hat{B}^2,$$

$$...$$

A teljes összeg tehát:

$$[\hat{A}, e^{\lambda\hat{B}}] = \lambda c + \frac{\lambda^2}{2!}2c\hat{B} + \frac{\lambda^3}{3!}3c\hat{B}^2 + \frac{\lambda^4}{4!}4c\hat{B}^3 + ... =$$

$$= \lambda c\Big(1 + \lambda\hat{B} + \frac{\lambda^2}{2!}\hat{B}^2 + \frac{\lambda^3}{3!}\hat{B}^3 + ...\Big) = \lambda c e^{\lambda\hat{B}},$$

ami éppen a bizonyítandó állítás.

b., Legyen $f(x) := e^{\hat{A}x}e^{\hat{B}x}$! Ekkor $f(x)$ deriváltja:

$$\frac{df}{dx} = \hat{A}e^{\hat{A}x}e^{\hat{B}x} + e^{\hat{A}x}\hat{B}e^{\hat{B}x} = e^{\hat{A}x}\hat{A}e^{\hat{B}x} + e^{\hat{A}x}e^{\hat{B}x}\hat{B}.$$

Az első tagba szúrjunk be egy egységoperátort $1 = e^{\hat{B}x}e^{-\hat{B}x}$ alakban:

$$\frac{df}{dx} = e^{\hat{A}x}e^{\hat{B}x}e^{-\hat{B}x}\hat{A}e^{\hat{B}x} + e^{\hat{A}x}e^{\hat{B}x}\hat{B} = e^{\hat{A}x}e^{\hat{B}x}\left[e^{-\hat{B}x}\hat{A}e^{\hat{B}x} + \hat{B}\right]$$

A zárójelben lévő kifejezés első tagjáról megmutatható, hogy a következő egyenlőségnek tesz eleget (Baker-Campbell-Hausdorff formula):

$$e^{-\hat{B}x}\hat{A}e^{\hat{B}x} = \hat{A} + [-\hat{B}x, \hat{A}] + \frac{1}{2!}\Big[-\hat{B}x, [-\hat{B}x, \hat{A}]\Big] + \frac{1}{3!}\left[-\hat{B}x, \Big[-\hat{B}x, [-\hat{B}x, \hat{A}]\Big]\right] + ...$$

Tekintettel arra, hogy az $[\hat{A},\hat{B}]$ kommutátor felcserél $\hat{B}$-vel, az összegből csupán két tag nem nulla:

$$e^{-\hat{B}x}\hat{A}e^{\hat{B}x}=\hat{A}+x[\hat{A},\hat{B}].$$

Vagyis azt kaptuk, hogy:

$$\frac{df(x)}{dx}=f(x)\Big(\hat{A}+x[\hat{A},\hat{B}]+\hat{B}\Big).$$

Az eredeti függvényünk ennek a differenciálegyenletnek az $f(0)=1$ kezdeti feltételt kielégítő megoldása. Ez a megoldás viszont a

$$f(x)=e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{\frac{1}{2}x^2[\hat{A},\hat{B}]}$$

alakba is írható. Egyszerű visszahelyettesítéssel, kihasználva a kommutátor $\hat{A}$-val és $\hat{B}$-vel való felcserélhetőségét kapjuk, hogy valóban megoldás. Összehasonlítva ezt az eredeti alakkal:

$$e^{\hat{A}x}e^{\hat{B}x}=e^{x(\hat{A}+\hat{B})}e^{\frac{1}{2}x^2[\hat{A},\hat{B}]},$$

amit az $x=1$ helyen véve, majd átrendezve:

$$e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}.$$

<u>3. feladat</u>: Keressük meg az $\hat{a}$ lefelé léptető operátor sajátfüggvényeit (koherens állapotok)!

Megoldás: Tekintsük a z komplex paraméterrel jellemzett

$$\varphi_z(x)=e^{z\hat{a}^\dagger-z^*\hat{a}}\Psi_0(x)$$

függvényt, ahol $\hat{a}$ és $\hat{a}^\dagger$ rendre a harmonikus oszcillátor le- és felfelé-léptető operátorok, $\Psi_0(x)$ pedig az alapállapoti hullámfüggvény. Alakítsuk át φ_z -t! Mivel (kihasználva, hogy $[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1$)

$$[z\hat{a}^\dagger,-z^*\hat{a}]=|z|^2[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=|z|^2=\text{ konstans}\,,$$

ezért az előző feladat b., részénél látott tétel alkalmazható.

$$\varphi_z(x)=e^{z\hat{a}^\dagger}e^{-z^*\hat{a}}e^{-|z|^2/2}\Psi_0(x)=e^{-|z|^2/2}e^{z\hat{a}^\dagger}e^{-z^*\hat{a}}\Psi_0(x).$$

Vegyük észre, hogy

$$e^{-z^*\hat{a}}\Psi_0(x)=\Big(1-z^*\hat{a}+\frac{1}{2!}(z^*\hat{a})^2-\frac{1}{3!}(z^*\hat{a})^3+...\Big)\Psi_0(x)=\Psi_0(x),$$

mivel $\hat{a}\Psi_0(x)=0$. Vagyis

$$\varphi_z(x)=e^{-|z|^2/2}e^{z\hat{a}^\dagger}\Psi_0(x),$$

amely alakról már látszik, hogy $\hat{a}$ sajátfüggvénye, mert

$$\hat{a}\varphi_z(x)=e^{-|z|^2/2}\hat{a}e^{z\hat{a}^\dagger}\Psi_0(x)=e^{-|z|^2/2}ze^{z\hat{a}^\dagger}\Psi_0(x),$$

ahol kihasználtuk a 2. feladatnál látott a., tételt. Eszerint

$$\hat{a}\varphi_z=z\varphi_z,$$

vagyis φ_z sajátfüggvény, a sajátértékek pedig tetszőleges komplex számok.