MODERN KVANTUMMECHANIKA

~~(DIÓ)~~ ELEKTRONHÉJBAN

Dávid Gyula (ELTE Fizikai Intézet)

2014.02.03.

0. Bevezető
1. Matematikai alapok
2. A kvantumelmélet axiómái
3. Harmonikus oszcillátor
4. Kétállapotú rendszerek
5. Nyílt kvantumrendszerek
6. Összetett rendszerek
7. Szimmetriák

Ajánlott irodalom:

F. Constantinescu – E. Magyari: Kvantummechanika feladatok (Tankönyvkiadó 1972)

Marx György: Kvantummechanika (Műszaki Kiadó, 1970)

Geszti Tamás: Kvantummechanika (Typotex, 2007)

Neumann János: A kvantummechanika matematikai alapjai (Akadémiai, 1980)

Elméleti fizikai példatár 3. (Tankönyvkiadó 1983)

Feynman, R.P. Mai fizika 7-8 (Műszaki, 1970)

Feynman, R.P. QED, ~~a megfejtett fény~~ a megmagyarázott fény (Scolar 2003)

Blohincev: Méréselmélet

1 MATEMATIKAI ALAPOK

Lineáris tér: $V \ni \vec{v}, \vec{u}$, $S \ni \alpha, \beta \longrightarrow \alpha\vec{v}+\beta\vec{u} \in V$

Hilbert-tér: komplex lineáris tér hermitikus skaláris szorzattal

– speciális jelölés: ket-vektorok: $|u\rangle \in \mathcal{H}$

analógia $\in V$

a megfelelő "sorvektor" $\sim \langle u|$: bra-vektor

Hozzárendelési szabály:

$$|u\rangle = \alpha|a\rangle+\beta|b\rangle \longrightarrow \langle u| = \alpha^*\langle a| + \beta^*\langle b| \,,\quad \alpha,\beta\in\mathbb{C}$$

Skaláris szorzat: $|u\rangle, |v\rangle \in \mathcal{H}$

$\langle u|v\rangle \in \mathbb{C}$ $\qquad \underline{\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*}$ (hermitikus)

$\Longrightarrow \langle u|u\rangle \in \mathbb{R}$

Extra követelmény $\langle u|u\rangle \geq 0$, sőt: $\langle u|u\rangle = 0 \longrightarrow |u\rangle = \underline{0}$ (nullvektor)

CSB-egyenlőtlenség (Cauchy-Schwarz-Bunyakovszkij)

$|\langle u|v\rangle|^2 \le \langle u|u\rangle\langle v|v\rangle$ $\qquad$ Eml: $(\underline{a}\,\underline{b})^2 = |a|^2|b|^2\cos^2\alpha \le |a|^2|b|^2$

Ezért ha $\langle u|u\rangle$ és $\langle v|v\rangle$ létezik ($<\infty$) $\rightarrow$ $\langle u|v\rangle$ is létezik.

Fontos: a QM minden mérhető (mérésekkel ellenőrizhető) eredménye skaláris szorzatok formájában jelenik meg.

Skalárszorzat $\longrightarrow$ ortogonalitás $\langle a|b\rangle = 0$

$\quad\hookrightarrow$ normáltság $\langle a|a\rangle = 1$

Ortonormált rendszer $\langle e^k|e^l\rangle = \delta_{kl}$

Hány dimenziós a tér? / véges: $\mathbb{C}^n$ (komplex euklideszi tér)

\ végtelen < ... (matematikai bonyodalmak)

Véges vagy megszámlálhatóan ∞ dimenzió:

Bázis: teljes, lineárisan független vektorrendszer
└ Minden vektor kifejezhető a báziselemek lineáris kombinációjaként

$$\forall |u\rangle \in \mathcal{H} \quad \exists c_k \in \mathbb{C} : |u\rangle = \sum_k c_k |e^k\rangle$$

Ha a bázis ortonormált (a QM-ben általában az) $\Rightarrow c_k = \langle e^k | u\rangle$

Visszahelyettesítve

$$|u\rangle = \sum_k c_k |e^k\rangle = \sum_k \langle e^k|u\rangle |e^k\rangle = \sum_k |e^k\rangle\langle e^k|u\rangle = \underbrace{\Big(\sum_k |e^k\rangle\langle e^k|\Big)}_{\hat{I}:\ \text{identitás}} |u\rangle$$

Ez a teljességi reláció: $\sum_k |e^k\rangle\langle e^k| = \hat{I}$

Emlékeztető: $\hat{P}^k = \vec{u}^k \circ \vec{u}^k \quad \sum_k \hat{P}^k = \hat{I}$

$|u\rangle\langle v|$ tkp a diadikus szorzás: $(|u\rangle\langle v|)|w\rangle = |u\rangle \langle v|w\rangle$

$$(\| \ \boxed{}\ )\ \| = \|\ (\boxed{}\ \|)$$

↓

Ez egy operátor. (lásd később)

Példák Hilbert-térre

– Minden véges dimenziós komplex lineáris tér.

Speciálisan $\mathbb{C}^n \ni \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \sim |u\rangle \longrightarrow \langle u| \sim (c_1^*, c_2^* \dots c_n^*)$

$$\langle a|b\rangle = (a_1^*, a_2^* \dots; a_n^*) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \sum_k a_k^* b_k = \Big(\sum_k b_k^* a_k\Big)^* = \langle b|a\rangle^*$$

$$\langle a|a\rangle = \sum_k a_k^* a_k = \sum |a_k|^2 \geq 0$$

– Végtelen dimenziós esetben: a képletek ugyanezek, probléma: $\sum_{k=1}^{\infty}$

CSB-tétel: ha $\langle a|a\rangle$ és $\langle b|b\rangle$ véges $\longrightarrow$ $\langle a|b\rangle$ is az

Ezért csak azokat a sorozatokat engedjük meg, amelyre $\sum |a_k|^2 < \infty$: ℓ^2 tér

– Függvények egy $T \subset \mathbb{R}^n$ tartományon $f(\underline{x})$

Skaláris szorzás: $(f, g) = \int_T d^n\underline{x}\, f^*(\underline{x})\, g(\underline{x}) = (g, f)^*$ konvergens-e?

CSB-tétel: ha (f,f) és (g,g) létezik, $\longrightarrow$ (f,g) is:

csak azokat a függvényeket engedjük meg, amelyekre $\int_T |f(\underline{x})|^2 d\underline{x} < \infty$

ezek a "négyzetesen integrálható" függvények: $\mathcal{L}^2(T)$

Ez a három legegyszerűbb Hilbert-tér:

a többit ezeken próbáljuk reprezentálni

Lineáris operátorok a Hilbert-téren

$\hat{A}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ $\quad \forall |u\rangle, |v\rangle \in \mathcal{H}$ és $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$

$$\hat{A}\left(\alpha|u\rangle + \beta|v\rangle\right) = \alpha\left(\hat{A}|u\rangle\right) + \beta\left(\hat{A}|v\rangle\right)$$

Műveletek operátorokkal: (vigyázat! ∞ dimenzióban az eredő operátor létezését mindig külön bizonyítani kell!)

$(\hat{A}+\hat{B})|u\rangle = \hat{A}|u\rangle + \hat{B}|u\rangle$

$(\alpha \hat{A})|u\rangle = \alpha(\hat{A}|u\rangle)$

$(\hat{A}\hat{B})|u\rangle = \hat{A}(\hat{B}|u\rangle)$, ha $\hat{B}|u\rangle$ benne van $\hat{A}$ értelmezési tartományában

↳ Az operátorok asszociatív algebrát alkotnak.

Operátor adjungáltja

Ha $\forall |u\rangle, |v\rangle \in \mathcal{H}$ $\quad \langle u|\hat{A}|v\rangle = \langle v|\hat{B}|u\rangle^* \Longrightarrow \hat{B} = \hat{A}^+$ ez $\hat{A}$ adjungált-

interpretáció: $\hat{A}|v\rangle = |t\rangle$

$$\langle u|\hat{A}|v\rangle = \langle u|t\rangle = \langle t|u\rangle^* = \left(\left(\langle v|A^+\right)|u\rangle\right)^*$$

jelölés: $|t\rangle = A|u\rangle \longrightarrow \langle t| = \langle u|A^+$

analógia $\quad [\,] = \boxed{A}\,[\,] \longrightarrow [\quad] = [\quad]\,\boxed{A^+}$

Biz be!
$\hat{A}^+$ reprezentációja az $\underline{A}$ mátrixának $\underline{\underline{A}}^+$ adjungált mátrixa
$\underline{\underline{A}}^+ = \tilde{\underline{\underline{A}}}^*$

Fontos: $(\alpha\hat{A})^+ = \alpha^* \hat{A}^+$

$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$

Speciális esetek:

- Önadjungált (=hermitikus) operátor $\hat{A}^+ = \hat{A}$ (valósban: szimmetrikus)
  - antihermitikus: $\hat{B}^+ = -\hat{B} \Longrightarrow \hat{A} = i\hat{B}$ $\quad \hat{A}^+ = \hat{A}$ már hermitikus
- Unitér: $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$ (valósban ortogonális)
  ↳ skalárszorzat-tartó: $|a'\rangle = U|a\rangle \to \langle a'| = \langle a|U^+$
  $|b'\rangle = U|b\rangle$ $\quad \langle a'|b'\rangle = \langle a|U^+U|b\rangle = \langle a|U^{-1}U|b\rangle = \langle a$

Sajátértékprobléma

$\hat{A}|v\rangle = \lambda|v\rangle \qquad ?\,\lambda \quad ?\,|v\rangle$

tétel $\quad \hat{A}^+ = \hat{A} \to \lambda \in \mathbb{R}$, $\langle u^k|u^l\rangle = 0$, ha $k \neq l$

Biz be! $\quad \hat{B}^+ = -\hat{B} \to \lambda = i\alpha$, $\alpha \in \mathbb{R}$

$U^+ = U^{-1} \longrightarrow \lambda = e^{i\alpha}$ $\quad \alpha \in \mathbb{R}$

Többszörös sajátértékek: sajátaltér

$A|u\rangle = \lambda|u\rangle$
$A|v\rangle = \lambda|v\rangle$ $\longrightarrow A(\alpha|u\rangle + \beta|v\rangle) = \lambda(\alpha|u\rangle + \beta|v\rangle)$

Operátor projektorfelbontása (sajnos nem minden operátorra...)

$$\hat{A}|u^k\rangle = \lambda_k |u^k\rangle \longrightarrow \hat{A} = \sum_k \lambda_k |u^k\rangle\langle u^k|$$

Operátorok függvényei

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \qquad x \in \mathbb{C} \quad \text{konvergens egy } R \text{ sugarú körön belül}$$

R < véges / végtelen (pl exp) / nulla

$$\downarrow$$

$$f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n = \sum_k f(\lambda_k)|u^k\rangle\langle u^k|, \text{ ha } \forall \lambda_k \in \text{konvergenciakör}$$

Spec $\sum |u^k\rangle\langle u^k| = \hat{I}$, inverz $\hat{A}^{-1} = \sum_k \frac{1}{\lambda_k}|u^k\rangle\langle u^k|$, ha $\lambda_k \neq 0$

∞ dimenzióban előfordulhat folytonos spektrum is:
egy intervallumban $\forall\lambda$ sajátérték

Matematikailag precíz tárgyalás: Neumann János: A QM matematikai alapjai

Fizikus pongyolasággal:

$$|e^n\rangle \sim |\lambda\rangle\sqrt{\Delta\lambda}$$

$$P^k = |e^k\rangle\langle e^k| \sim \sqrt{\Delta\lambda}\,|\lambda\rangle\langle\lambda|\sqrt{\Delta\lambda} = |\lambda\rangle\langle\lambda|\,\Delta\lambda$$

$$I = \sum_k |e^k\rangle\langle e^k| \longrightarrow \int d\lambda\, |\lambda\rangle\langle\lambda|$$

$$\hat{A} = \sum_k \lambda_k |e^k\rangle\langle e^k| \longrightarrow \int d\lambda\, \lambda\, |\lambda\rangle\langle\lambda|$$

$$f(\hat{A}) = \sum_k f(\lambda_k)|e^k\rangle\langle e^k| \longrightarrow \int d\lambda\, f(\lambda)\, |\lambda\rangle\langle\lambda|$$

Kommutáló operátorok: $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \longrightarrow$ az egyik operátor sajátvektorai benne vannak a másik operátor valamelyik sajátalterében — és viszont

Speciális esetek:
- csupa egyszeres sajátérték → egybeeső sajátvektorok
- az egyik operátornak sokdimenziós sajátaltere van (pl $T^2 = 1 \rightarrow T = \pm 1$)
  → a másik operátor sajátvektorait ezekben az alterekben kell keresni

Több kommutáló operátor: fokozatosan szűkíthető a sajátaltér, ld. teljes mérés

egészen egy dimenzióig: sajátértékek: kvantumszámok $(n, l, m \ldots)$

Létezik egy olyan $\hat{F}$ operátor, amelynek már csak egyszeres sajátértékei vannak, és mindegyik $\hat{A}_k$ operátorral kommutál:
- ekkor az $\hat{A}_k$ operátorok $\hat{F}$ függvényének tekinthetők $\hat{A}_k = f_k(\hat{F})$

REPREZENTÁCIÓK

$|e^k\rangle$ ortonormált bázis (csak ilyet használunk)

$$\langle e^k|e^l\rangle = \delta_{kl} \text{ (ortonormáltság)} \qquad \sum_k |e^k\rangle\langle e^k| = \hat{I} \text{ (teljesség)}$$

$$|u\rangle = \sum_k c_k |e^k\rangle \to c_k = \langle e^k|u\rangle \in \mathbb{C} \qquad \underline{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \in l^2 \text{ (sorozattér)}$$

az absztrakt $|u\rangle$ a $\underline{c}$ vektorral reprezentálható

Operátor $|u\rangle = \hat{A}|v\rangle$ $\quad |v\rangle = \sum_k \alpha_k |e^k\rangle$ $\quad |u\rangle = \sum \beta_l |e^l\rangle$

$$\beta_l = \langle e^l|u\rangle = \langle e^l|\hat{A}|v\rangle = \langle e^l|\hat{A}\sum_k \alpha_k|e^k\rangle = \sum_k \langle e^l|\hat{A}|e^k\rangle \alpha_k = \sum_k A_{lk}\alpha_k$$

$A_{kl} = \langle e^k|\hat{A}|e^l\rangle$ az operátor mátrixelemei (eml:)

$$\hat{A} = \sum_k \sum_l A_{kl} |e^k\rangle\langle e^l|$$ (Biz be! számítsd ki A_{pq}-t!)

Bázistranszformáció $|e^k\rangle$ és $|f^l\rangle$ ortonormált bázisok

$$|u\rangle = \sum_k u_k|e^k\rangle = \sum_l u'_l|f^l\rangle$$

$$u'_l = \langle f^l|u\rangle = \langle f^l|\sum_k u_k|e^k\rangle = \sum_k \langle f^l|e^k\rangle u_k = \sum_k R_{lk}u_k \qquad R_{lk} = \langle f^l|e^k\rangle$$

$$u_k = \langle e^k|u\rangle = \langle e^k|\sum_l u'_l|f^l\rangle = \sum_l \langle e^k|f^l\rangle u'_l = \sum_l S_{kl}u'_l \qquad S_{kl} = \langle e^k|f^l\rangle = R^*_{lk}$$

$$\sum_k R_{lk}S_{km} = \sum_k \langle f^l|e^k\rangle\langle e^k|f^m\rangle = \langle f^l|\underbrace{\left(\sum_k |e^k\rangle\langle e^k|\right)}_{I}|f^m\rangle = \langle f^l|f^m\rangle = \delta_{lm} \qquad \underline{\underline{S}} = \underline{\underline{R}}^+, \quad \underline{\underline{S}} = \underline{\underline{R}}^{-1}$$

Az R transzformációs mátrix <u>unitér</u>

$$\underline{\underline{R}}^+ = \underline{\underline{R}}^{-1}$$

Operátor mátrixának transzformációja

$$|u\rangle = \hat{A}|v\rangle \qquad |v\rangle = \sum_k v_k|e^k\rangle = \sum_l v'_l|f^l\rangle \qquad |u\rangle = \sum_k u_k|e^k\rangle = \sum_l u'_l|f^l\rangle$$

$$u'_l = \langle f^l|u\rangle = \langle f^l|\hat{A}|v\rangle = \sum_k \langle f^l|e^k\rangle\langle e^k|\hat{A}\underbrace{\left(\sum_m |e^m\rangle\langle e^m|\right)}_{I}\sum_p v'_p|f^p\rangle =$$

$1 = \sum|e^k\rangle\langle e^k|$

$$= \sum_k\sum_m\sum_p \langle f^l|e^k\rangle\langle e^k|\hat{A}|e^m\rangle\langle e^m|f^p\rangle v'_p = \sum_k\sum_m\sum_p R_{lk}A_{km}S_{mp}v'_p$$

$$= \sum_p A'_{lp}v'_p \qquad A'_{lp} = \sum_k\sum_m R_{lk}A_{km}R^{-1}_{mp}$$

Skaláris szorzás: $|u\rangle = \sum_k u_k|e^k\rangle$ $\quad |v\rangle = \sum_l v_l|e^l\rangle \to \langle v| = \sum_l v_l^*\langle e^l|$

$$\langle v|u\rangle = \left(\sum_l v_l^*\langle e^l|\right)\left(\sum_k u_k|e^k\rangle\right) = \sum_k\sum_l v_l^* u_k \underbrace{\langle e^l|e^k\rangle}_{\delta_{lk}} = \sum_k\sum_l v_l^* u_k \delta_{kl} =$$

$= \sum_k v_k^* u_k$ ez épp az l^2 sorozattérbeli skalárszorzat.

Reprezentáció folytonos bázison

Honnan vegyük a bázisvektorokat?

– Általában valamilyen hermitikus operátor sajátvektorai.

Lehet a spektrum folytonos!

$$\hat{L}|e^k\rangle = \lambda_k |e^k\rangle \longrightarrow \lambda_k\text{-k közelednek}$$

$$|e^k\rangle = \sqrt{\Delta\lambda}\,|\lambda\rangle \quad \rightarrow \quad L|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

$$\hat{I} = \sum_k |e^k\rangle\langle e^k| \rightarrow \int d\lambda\, |\lambda\rangle\langle\lambda| \qquad L = \sum \lambda_k |e^k\rangle\langle e^k| \longrightarrow \int d\lambda\, \lambda\, |\lambda\rangle\langle\lambda|$$

$$|u\rangle = \sum_k c_k |e^k\rangle = \sum_k \underbrace{\frac{c_k}{\sqrt{\Delta\lambda}}}_{\downarrow f(\lambda)} \underbrace{\frac{|e^k\rangle}{\sqrt{\Delta\lambda}}}_{\downarrow |\lambda\rangle} \Delta\lambda = \sum f(\lambda)|\lambda\rangle\Delta\lambda \longrightarrow \int d\lambda\, f(\lambda)\,|\lambda\rangle$$

$$f(\lambda) = \frac{c_k}{\sqrt{\Delta\lambda}} = \frac{\langle e^k|u\rangle}{\sqrt{\Delta\lambda}} = \langle\lambda|u\rangle$$

$f(\lambda) \in \mathcal{L}^2$: ez az H-tér vektorainak folytonos reprezentációja

$$|u\rangle = \int d\lambda\, \langle\lambda|u\rangle\, |\lambda\rangle = \underbrace{\int d\lambda\, |\lambda\rangle\langle\lambda|}_{\hat{I}}u\rangle = \hat{I}|u\rangle \checkmark$$

Skaláris szorzás:

$$f(\lambda) = \langle\lambda|u\rangle = \langle\lambda| \int d\lambda' f(\lambda')|\lambda'\rangle = \int d\lambda' f(\lambda')\langle\lambda|\lambda'\rangle$$

$\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta(\lambda-\lambda')$: a folytonos sajátvektorok Dirac-deltára vannak "normálva"

Legyen $|u\rangle = \int d\lambda\, f(\lambda)|\lambda\rangle \longrightarrow \langle u| = \int d\lambda\, f(\lambda)^* \langle\lambda|$ $\quad \lambda \in \mathbb{R}$, $f(\lambda) \in \mathbb{C}$

$$|v\rangle = \int d\lambda\, g(\lambda)\,|\lambda\rangle$$

$$\langle u|v\rangle = \left(\int d\lambda' f(\lambda')^* \langle\lambda'|\right)\left(\int d\lambda\, g(\lambda)|\lambda\rangle\right) = \int d\lambda' \int d\lambda\, f(\lambda')^* g(\lambda)\, \underbrace{\langle\lambda'|\lambda\rangle}_{\delta(\lambda-\lambda')} =$$

$$= \int d\lambda' \int d\lambda\, f(\lambda')^* g(\lambda)\, \delta(\lambda-\lambda') = \int d\lambda\, f(\lambda)^* g(\lambda) = (f,g).$$

ez épp az $\mathcal{L}^2$-beli skaláris szorzás

Operátor reprezentációja folytonos bázison

$$|\lambda\rangle \qquad \langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta(\lambda-\lambda') \qquad \int d\lambda\, |\lambda\rangle\langle\lambda| = \hat{I}$$

$$|u\rangle = \hat{A}|v\rangle \qquad |u\rangle = \int d\lambda\, u(\lambda)\,|\lambda\rangle \qquad |v\rangle = \int d\lambda\, v(\lambda)\,|\lambda\rangle$$

$$u(\lambda) = \langle\lambda|u\rangle = \langle\lambda|\hat{A}|v\rangle = \langle\lambda|\hat{A}\int d\lambda'\, v(\lambda')|\lambda'\rangle =$$

$$= \int d\lambda' \langle\lambda|A|\lambda'\rangle v(\lambda') = \int d\lambda' A(\lambda,\lambda')\, v(\lambda')$$: integráltranszformáció.

Az integráltranszformáció magja $A(\lambda,\lambda')$ kétváltozós függvény

$$A(\lambda,\lambda') = \langle\lambda|\hat{A}|\lambda'\rangle \rightarrow \hat{A} = \int d\lambda \int d\lambda'\, A(\lambda,\lambda')\,|\lambda\rangle\langle\lambda'|$$

Bázistranszformáció folytonos bázisok között

$$|\alpha\rangle \qquad \langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta(\alpha-\alpha') \qquad \int d\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \hat{I}$$
$$|\beta\rangle \qquad \langle\beta|\beta'\rangle = \delta(\beta-\beta') \qquad \int d\beta\, |\beta\rangle\langle\beta| = \hat{I}$$

$$|u\rangle = \int d\alpha\, f(\alpha)|\alpha\rangle = \int d\beta\, g(\beta)\,|\beta\rangle$$

$$g(\beta) = \langle\beta|u\rangle = \langle\beta|\int d\alpha\, f(\alpha)|\alpha\rangle = \int d\alpha\, f(\alpha)\langle\beta|\alpha\rangle = \int d\alpha\, R(\beta,\alpha) f(\alpha)$$
$$R(\beta,\alpha) = \langle\beta|\alpha\rangle$$

$$f(\alpha) = \langle\alpha|u\rangle = \langle\alpha|\int d\beta\, g(\beta)|\beta\rangle = \int d\beta\, g(\beta)\langle\alpha|\beta\rangle = \int d\beta\, S(\alpha,\beta) g(\beta)$$
$$S(\alpha,\beta) = \langle\alpha|\beta\rangle = R(\beta,\alpha)^*$$

Inverz: $f(\alpha) = \int d\beta\, S(\alpha,\beta) g(\beta) = \int d\beta\, S(\alpha,\beta) \int d\alpha'\, R(\beta,\alpha') f(\alpha') =$
$$= \int d\alpha' \Big(\underbrace{\int d\beta\, S(\alpha,\beta) R(\beta,\alpha')}_{\delta(\alpha-\alpha')}\Big) f(\alpha') = \int d\alpha'\, \delta(\alpha-\alpha')\, f(\alpha')$$

Az $R(\beta,\alpha)$ és az $S(\alpha,\beta)$ által generált integráltranszformációk egymás inverzei.

De $R(\beta,\alpha) = S(\alpha,\beta)^*$ → ez egy unitér integráltranszformáció.

Láttunk már ilyet: Fourier-transzformáció!

$$F(k) = \int dx\, \underbrace{\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}}_{R(k,x)} f(x) \qquad f(x) = \int dk\, \underbrace{\frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}}}_{S(x,k) = R(k,x)^*} F(k)$$

Inverz: $\int R(k,x) S(x,k')\,dx = \int \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-ik'x}}{\sqrt{2\pi}}\,dx = \int dx\, \frac{e^{i(k-k')x}}{2\pi} = \delta(k-k')$

Operátorok folytonos mátrixának bázistranszformációja

$$A(\alpha,\alpha') = \langle\alpha|\hat{A}|\alpha'\rangle \qquad A(\beta,\beta') = \langle\beta|\hat{A}|\beta'\rangle$$

Szúrjuk be az egységoperátort!

$$A(\beta,\beta') = \langle\beta|\underbrace{\;}_{1=\int d\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|}\hat{A}\underbrace{\;}_{1=\int d\alpha' |\alpha'\rangle\langle\alpha'|}|\beta'\rangle = \int d\alpha \int d\alpha'\, \langle\beta|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A}|\alpha'\rangle\langle\alpha'|\beta'\rangle =$$
$$= \int d\alpha \int d\alpha'\, R(\beta,\alpha)\, A(\alpha,\alpha')\, S(\alpha',\beta')$$

Speciális operátorok: $W(\alpha,\alpha') = V(\alpha)\,\delta(\alpha-\alpha') \qquad |u\rangle = \hat{W}|v\rangle$

$$u(\alpha) = \int d\alpha'\, W(\alpha,\alpha') v(\alpha') = \int d\alpha'\, V(\alpha)\delta(\alpha-\alpha') v(\alpha') = V(\alpha) v(\alpha) \quad \text{szorzás!}$$

$$P(\alpha,\alpha') = i\,\dot{\delta}(\alpha-\alpha') \qquad |u\rangle = \hat{P}|v\rangle$$

$$u(\alpha) = \int d\alpha'\, P(\alpha,\alpha') v(\alpha') = i\int d\alpha'\, \dot{\delta}(\alpha-\alpha') v(\alpha') \overset{\text{parc. int}}{=} -i\int d\alpha'\, \delta(\alpha-\alpha')\, \dot{v}(\alpha') = -i\dot{v}(\alpha)$$

A szinguláris magú integráloperátor differenciáloperátorként működik!

Bázistranszformáció diszkrét és folytonos bázis között

$$|e^k\rangle \qquad \langle e^k|e^l\rangle = \delta_{kl} \qquad \sum_k |e^k\rangle\langle e^k| = \hat{I}$$

$$|\alpha\rangle \qquad \langle \alpha|\alpha'\rangle = \delta(\alpha-\alpha') \qquad \int d\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \hat{I}$$

$$|u\rangle = \sum_k c_k |e^k\rangle = \int d\alpha\, f(\alpha)\, |\alpha\rangle$$

$$f(\alpha) = \langle\alpha|u\rangle = \langle\alpha| \sum_k c_k |e^k\rangle = \sum_k c_k \underbrace{\langle\alpha|e^k\rangle}_{\varphi_k(\alpha)} = \sum_k c_k \varphi_k(\alpha)$$

függvénysorozat

függvénytérbeli skalárszorzat

$$(\varphi_k, \varphi_l) = \int d\alpha\, \varphi_k^*(\alpha)\, \varphi_l(\alpha) = \int d\alpha\, \langle e^k|\alpha\rangle\langle\alpha|e^l\rangle =$$

$$= \langle e^k| \Big(\underbrace{\int d\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha|}_{\hat{I}} \Big) |e^l\rangle = \langle e^k|e^l\rangle = \delta_{kl}$$

ortogonális függvények!

$$c_k = \langle e^k|u\rangle = \langle e^k| \int d\alpha\, f(\alpha)\, |\alpha\rangle = \int d\alpha\, f(\alpha) \underbrace{\langle e^k|\alpha\rangle}_{\varphi_k^*(\alpha)} = \int d\alpha\, \varphi_k^*(\alpha) f(\alpha) = (\varphi_k, f)$$

A mátrixos leírás (ℓ^2 reprezentáció) és a függvényes leírás (L^2 reprezentáció) között egy ortogonális függvényrendszer közvetít.

Operátor transzformációja

$$\hat{A} = \sum_k \sum_l A_{kl} |e^k\rangle\langle e^l| = \int d\alpha \int d\alpha'\, A(\alpha,\alpha')\, |\alpha\rangle\langle\alpha'|$$

$$A(\alpha,\alpha') = \langle\alpha|\hat{A}|\alpha'\rangle = \sum_k\sum_l A_{kl} \langle\alpha|e^k\rangle\langle e^l|\alpha'\rangle = \sum_k\sum_l A_{kl}\, \varphi_k(\alpha)\, \varphi_l^*(\alpha')$$

$$A_{kl} = \langle e^k|\hat{A}|e^l\rangle = \int d\alpha \int d\alpha'\, A(\alpha,\alpha')\, \langle e^k|\alpha\rangle\langle\alpha'|e^l\rangle =$$

$$= \int d\alpha \int d\alpha'\, \varphi_k(\alpha)^*\, A(\alpha,\alpha')\, \varphi_l(\alpha')$$

② A KVANTUMELMÉLET AXIÓMÁI

(D: dinamikai axiómák)

$\boxed{\text{D1}}$ RENDSZER: fizikai rendszer $\Longleftrightarrow$ $\mathcal{H}$ Hilbert-tér

Ekvivalencia-osztályok $\mathcal{H} \ni |u\rangle, |v\rangle$

$|u\rangle \sim |v\rangle$, ha $\exists\, c \in \mathbb{C}$, $c \neq 0$, $|u\rangle = c|v\rangle$

$\mathcal{H}/\sim$: a Hilbert-tér sugarai

$\boxed{\text{D2}}$ ÁLLAPOT: a fizikai rendszer állapota $\Longleftrightarrow$ a Hilbert-tér egy sugara

pongyola fogalmazás:
állapot ~ a Hilbert-tér egy vektora,
de egy szorzótényező nem számít

Érdemes (de nem kötelező) az állapotokat 1-re normálni

$\langle\psi|\psi\rangle = 1$ Még van egy szabadság $|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = e^{i\alpha}|\psi\rangle$
$\alpha \in \mathbb{R}$

Vigyázz! Az alkalmazásokban szerepelnek nem normálható állapotok: (pl függvényreprezentációban $\delta(x)$, e^{ikx})

Súlyos következmény: a SZUPERPOZÍCIÓ elve:
két állapot lineárkombinációja is állapot!

Klasszikus fizika: két bolygópályát nem lehet összeadni
De a hullámegyenlet (homogén lineáris differenciálegyenlet) megoldásai lineáris teret alkotnak:

a szuperpozíció elve jelenti a kvantumobjektumok HULLÁMTERMÉSZETÉT!

$\boxed{D3}$ IDŐFEJLŐDÉS : lineáris

$$|u(0)\rangle \xrightarrow{t} |u(t)\rangle$$
$$|v(0)\rangle \xrightarrow{t} |v(t)\rangle$$

akkor $|\psi(0)\rangle = \alpha|u(0)\rangle + \beta|v(0)\rangle \xrightarrow{t} |\psi(t)\rangle = \alpha|u(t)\rangle + \beta|v(t)\rangle$

$\Downarrow$ Létezik egy időfejlesztő lineáris operátor: $\hat{G}(t)$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{G}(t)|\psi(0)\rangle$$ Green-operátor

Megköveteljük: $\hat{G}(t)$ tartsa meg a normát $\rightarrow$ unitér

$$1 = \langle u(t)|u(t)\rangle = \langle u(0)|\hat{G}(t)^+\hat{G}(t)|u(0)\rangle = \langle u(0)|u(0)\rangle = 1$$

$\rightarrow \hat{G}(t)^+ = \hat{G}(t)^{-1}$ unitér időfejlődés

$\boxed{D4}$ Időeltolási INVARIANCIA (szimmetriatulajdonság)

– az időnek nincs kitüntetett pontja

$\rightarrow$ ezért $\hat{G}(t)$ csak az időkülönbségtől függhet

$$|u(t_1)\rangle = \hat{G}(t_1)|u(0)\rangle$$
$$|u(t_1+t_2)\rangle = \hat{G}(t_1+t_2)|u(0)\rangle = \hat{G}(t_2)|u(t_1)\rangle = \hat{G}(t_2)\hat{G}(t_1)|u(0)\rangle$$

$\underline{\hat{G}(t_1+t_2) = \hat{G}(t_2)\hat{G}(t_1)}$ csoporttulajdonság

$$\hat{G}(0+t) = \hat{G}(0)\hat{G}(t) = \hat{G}(t) \rightarrow \hat{G}(0) = \hat{I}$$
$$\hat{G}(-t+t) = \hat{G}(0) = \hat{G}(-t)\hat{G}(t) \rightarrow \hat{G}(-t) = \hat{G}(t)^{-1} \quad (= \hat{G}(t)^+)$$

Az időfejlesztő operátorok egyparaméteres folytonos csoportot alkotnak

Minden egyparaméteres csoport exponenciális alakba írható:

$$\hat{G}(t) = e^{\hat{B}t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{B}^n t^n}{n!}$$

$\hat{B}$ mértékegysége $\frac{1}{s}$

$\hat{B}$ csoport generátor

Unitaritás:

$$\hat{G}^+(t) = (e^{\hat{B}t})^+ = e^{\hat{B}^+t} \overset{!}{=} \hat{G}(t)^{-1} = \hat{G}(-t) = e^{-\hat{B}t} \rightarrow \hat{B}^+ = -\hat{B}$$

antihermitikus

Legyen $\hat{B} = -i\hat{A}$ $\quad \hat{A} = i\hat{B}$ már hermitikus

Válasszunk le belőle $\hbar$-t: $\hat{A} = \frac{1}{\hbar}\hat{H}$ $\quad \hat{H} = \hat{H}^+$ energia-dimenziójú hermitikus operátor: Hamilton-operátor

$$\hat{G}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

Tehát $\hat{G}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{G}(t)\,|\Psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle \qquad \Big/ \frac{d}{dt}$$

$$\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \frac{d}{dt}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)\cdot|\Psi(0)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\Psi(t)\rangle \qquad /i\hbar$$

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle}$$ ez a Schrödinger-egyenlet (mely mindent leír)

kezdőfeltétel: $t=0$ $|\Psi\rangle = |\Psi(0)\rangle$

A Sch-egyenlet NEM alaptörvény! A D1-D5 axiómákból következik.

Csak klasszikus nosztalgiából emlegetjük az elmélet alaptörvényeként ezt a diff-egyenletet.

Oldjuk meg! — és akkor mindent tudni fogunk...

MÁR MEG VOLT OLDVA: megoldás $|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle$

A megoldás triviális, hiszen lineáris egyenlet!

Hogyan kell a megoldást TÉNYLEGESEN kiszámítani?

Eml: mátrixfüggvények, projektorfelbontás

Oldjuk meg a Hamilton-operátor sajátértékegyenletét!

$$\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \longrightarrow E_k \in \mathbb{R}, \ |\varphi_k\rangle \text{ (ortonormáltak)}$$

$$\langle\varphi_k|\varphi_l\rangle = \delta_{kl} \qquad \sum_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| = I$$

$$\hat{H} = \sum_k E_k|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| \longrightarrow f(\hat{H}) = \sum_k f(E_k)|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$$

$$\hat{G}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \sum_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\Psi(0)\rangle$$

Ez a Sch-egyenlet kezdőfeltételhez illesztett megoldása.

Szükség van hozzá a $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ egyenlet (időtől független Sch-egyenlet) összes megoldására.

Megoldás a lineáris differenciálegyenletek szokásos módszerével

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle$$

TFH $|\Psi(t)\rangle = |\varphi\rangle e^{-i\omega t}$ (oszd meg és uralkodj!)

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = i\hbar(-i\omega)e^{-i\omega t}|\varphi\rangle = \underbrace{\hbar\omega}_{E}|\varphi\rangle e^{-i\omega t} = E|\varphi\rangle e^{-i\omega t}$$

$$\| \quad \hat{H}|\Psi(t)\rangle = e^{-i\omega t}\hat{H}|\varphi\rangle$$

$\rightarrow$ tehát $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ sajátértékprobléma

$\rightarrow E_k, |\varphi_k\rangle \qquad \omega_k = \frac{1}{\hbar}E_k$

Általános megoldás: lineárkombináció

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k e^{-i\omega_k t}|\varphi_k\rangle$$

$t=0 \quad |\Psi(0)\rangle = \sum_k c_k|\varphi_k\rangle \overset{!}{=} |\Psi(0)\rangle \longrightarrow c_k = \langle\varphi_k|\Psi(0)\rangle$

tehát $|\Psi(t)\rangle = \sum_k \langle\varphi_k|\Psi(0)\rangle e^{-i\omega_k t}|\varphi_k\rangle = \sum_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\Psi(0)\rangle$

Stacionárius állapotok

Ha $|\Psi(0)\rangle = |\varphi_k\rangle$

akkor $|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\varphi_k\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|\varphi_k\rangle = e^{-i\omega_k t}|\varphi_k\rangle \sim |\varphi_k\rangle$

az állapot változatlan marad!

Vajon miért ugrik le a H-atom elektronja a gerjesztett energiaszintekről?

A QM szerint ott marad!

A H-atom (és minden más) NEM ZÁRT RENDSZER

$\rightarrow$ a környezettel való kölcsönhatás megváltoztatja a Hamilton-operátort

$\rightarrow$ átmeneteket indukál!

A Schrödinger-egyenlet reprezentációja

ortonormált bázis : $|e^k\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t)\,|e^k\rangle \qquad c_k(t) = \langle e^k|\psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle \qquad \langle e^k|$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle e^k|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}c_k(t) = \langle e^k|\hat{H}|\psi(t)\rangle =$$

$$= \langle e^k|\hat{H}\sum_\ell c_\ell(t)\,|e^\ell\rangle = \sum_\ell \underbrace{\langle e^k|\hat{H}|e^\ell\rangle}_{H_{k\ell}} c_\ell(t)$$

$$\boxed{i\hbar\frac{dc_k(t)}{dt} = \sum_\ell H_{k\ell}\,c_\ell(t)}$$

∞ sok egyenletből álló elsőrendű lineáris differenciálegyenletrendszer.

kezdőfeltétel

$$t=0 \quad c_k(0) = c_{k0} = \langle e^k|\psi(0)\rangle$$

ℓ^2-reprezentáció

Folytonos bázis (jelölés $\alpha \to x$)

$$|x\rangle \qquad \langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \qquad \int dx\,|x\rangle\langle x| = \hat{I}$$

$$|\psi(t)\rangle = \int dx\; f(x,t)\,|x\rangle \qquad f(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle$$

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}\,|\psi\rangle \qquad /\langle x|$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle x|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(x,t) = \langle x|\hat{H}|\psi(t)\rangle =$$

$$= \langle x|\hat{H}\int dx' f(x',t)\,|x'\rangle = \int dx'\, \underbrace{\langle x|\hat{H}|x'\rangle}_{H(x,x')} f(x',t)$$

tehát a Schrödinger-egyenlet függvényreprezentációja:

$$\underline{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(x,t) = \int dx'\,H(x,x')\,f(x',t)}$$

ez egy lineáris parciális integrodifferenciálegyenlet (tudjuk-e integrálni ?)

Spec eset:

$$H(x,x') = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\delta''(x-x') + V(x)\,\delta(x-x')$$

Ekkor
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}f(x,t) + V(x)\,f(x,t)$$

ez már egy parciális diffegyenlet. Schrödinger eredeti egyenlete

Schrödinger eredeti egyenlete valójában egy szinguláris magú parciális integrodifferenciálegyenlet!

:)

De honnan vesszük a Hamilton-operátort?

„Klasszikus" kvantumelmélet

– a vizsgált rendszereknek VAN klasszikus megfelelője

Recept: kanonikus kvantálás

Klasszikus mechanika:
Hamiltoni megfogalmazás:
– az energia q_k és p_k változókkal kifejezve
$H(p\,q)$
– minden fizikai mennyiség a q_k és p_k változókkal kifejezve

pl: $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$ $\quad L_1 = x_2 p_3 - x_3 p_2$

Legyen $F = F(q, p)$

Recept $\hat{F} = F(\hat{q}, \hat{p}) = \hat{F}^+$

Na de honnan vesszük $\hat{q}$-t és $\hat{p}$-t

Heisenberg-féle felcserélési reláció

$$\boxed{K1} \quad [\hat{p}_k, \hat{q}_l] = \frac{\hbar}{i} \delta_{kl} \hat{I}$$
$$[\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0$$
$$[\hat{q}_k, \hat{q}_l] = 0$$

$\hat{q}_k^+ = \hat{q}_k$ $\quad \hat{p}_k^+ = \hat{p}_k$ $\qquad k \in \{1 \dots f\}$, $f < \infty$

! Vigyázz! Végtelen sok szabadsági fok (mezők) esetén ez nem igaz: sok inekvivalens reprezentáció van: QFT :(

„Modern" kvantumelmélet

a vizsgált rendszereknek NINCS klasszikus megfelelője

Nincs recept:
légy pragmatikus
Találd ki $\hat{H}$-t úgy, hogy
– jól leírja a rendszert
– minél egyszerűbb legyen
(pl véges dimenziós)

lásd később!

Neumann tétele:
véges sok szabadsági fok ($f < \infty$) esetén ebben minden benne van!

↓ a relációk minden konkrét reprezentációja ekvivalens (izomorf), és helyes számítás esetén mindig ugyanaz jön ki!

↓ Úgy reprezentáljuk, hogy kényelmes legyen a számolás!

Kanonikus kvantálás

technikai bonyodalmak: Weyl-szabályok

$F = xp = px$ klasszikusan

$\hat{F} = ?$ Weyl: $\hat{F} = \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2} = \hat{F}^{+}$

$x^2p^2 = xpxp = xp^2x = pxpx = p^2x^2$ stb

Ma ezt már nem érezzük annyira fontos kérdésnek, mint 1925 körül...

Figyelem! A csererelació NEM elégíthető ki véges mátrixokkal.

$$px - xp = \frac{\hbar}{i} I \quad / \mathrm{Sp}$$

$$\mathrm{Sp}(\hat{p}\hat{x}) - \mathrm{Sp}(\hat{x}\hat{p})$$

$$\mathrm{Sp} = 0 \neq \mathrm{Sp} = \frac{\hbar}{i} \dim V \quad \lightning \quad \rightarrow$$ végtelen dimenziós ábrázolás

Pl: $\underline{\underline{P}} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \\ & & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$ $\quad \underline{\underline{Q}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ & & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$ BIZ BE!

$[p, x] = \frac{\hbar}{i}$ $\quad [p, x^2] = px^2 - x^2p = px^2 \underbrace{- xpx + xpx}_{0} - x^2p = (\underbrace{px - xp}_{\frac{\hbar}{i}1})x + x(\underbrace{px - xp}_{\frac{\hbar}{i}1})$

$\rightarrow [p, x^2] = \frac{\hbar}{i} 2x \quad \rightarrow [p, x^n] = \frac{\hbar}{i} n x^{n-1}$

analitikus függvény: $f(x) = \sum_n c_n x^n$

$[\hat{p}, f(\hat{x})] = \frac{\hbar}{i} f'(\hat{x})$ $\quad$ hasonlóképpen $[\hat{x}, f(\hat{p})] = i\hbar f'(\hat{p})$

Függvényreprezentáció $\psi(x,t) = \langle x | \psi(t) \rangle \rightarrow \hat{x}\psi(x) = x \cdot \psi(x)$

$[\hat{p}, f(\hat{x})]\psi(x) = \hat{p}(f(x)\psi(x)) - f(x)(\hat{p}\psi(x)) = \frac{\hbar}{i} f'(x) \cdot \psi(x)$

$\rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$: operátorok

Vigyázz: $\hat{x}$ és $\hat{p}$ sajátvektorai nincsenek benne az $\mathcal{L}^2$ függvénytérben!

$\hat{x} \downarrow \delta(x) \qquad \hat{p}: e^{ipx}$

MÉRÉSELMÉLET

TFH $|\Psi(t)\rangle$-t ismerjük. De mit mutat a műszer?

Legyen $\hat{F} = \hat{F}^+$ egy fizikai mennyiség hermitikus operátora.
Oldjuk meg a sajátértékproblémáját:

$$\hat{F}|\varphi_k\rangle = f_k|\varphi_k\rangle \qquad f_k \in \mathbb{R} \qquad \langle\varphi_k|\varphi_l\rangle = \delta_{kl}$$

$$\sum_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| = \hat{I}$$

Mérjük meg egy műszerrel F értékét!

$\boxed{\text{M1}}$ A mérőműszer CSAK az f_k értékeket mérheti

$\boxed{\text{M2}}$ Ha $|\Psi\rangle = |\varphi_k\rangle$, akkor a mérőműszer f_k-t mutat

$\boxed{\text{M3}}$ Ha $|\Psi\rangle \neq |\varphi_k\rangle$ nem sajátállapot, akkor fejtsük ki $|\Psi\rangle$-t a $|\varphi_k\rangle$ bázison: $|\Psi\rangle = \sum c_k|\varphi_k\rangle$
ekkor annak a <u>valószínűsége</u>, hogy a műszer éppen f_k-t mutat: $w_\Psi(F = f_k) = |c_k|^2 = |\langle\varphi_k|\Psi\rangle|^2$

$\boxed{\text{M4}}$ "A hullámfüggvény kollepszuse"
Közvetlenül a mérés után $|\Psi\rangle$ átugrik a $|\varphi_k\rangle$ állapotba, és innen folytatja az uniter időfejlődést.

[Ha sokszor gyorsan megmérem, nem tud elmászni a $|\varphi_k\rangle$ állapotból! Einstein és Bohr vitája 1930-ban: Ma már megmérték!
Lásd: Geszti Tamás: Kvantummechanika]

Méréselmélet folytonos bázison

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |e^k\rangle = \sum_k \frac{c_k}{\sqrt{\Delta\lambda}} \frac{|e^k\rangle}{\sqrt{\Delta\lambda}} \Delta\lambda \to \int f(\lambda)|\lambda\rangle\, d\lambda$$

W (λ benne van a $\Delta\lambda$ hosszú intervallumban) $= |c_k|^2 = |f(\lambda)|^2 \Delta\lambda$

$w(\lambda) = |f(\lambda)|^2$ ezért nem valószínűség, hanem valószínűségsűrűség!

Vajon $|c_k|^2$ tényleg valószínűség?

Legyen $|\psi\rangle = \sum_k c_k |\varphi_k\rangle \qquad c_k = \langle\varphi_k|\psi\rangle \quad c_k^* = \langle\psi|\varphi_k\rangle$

$$\sum_k W_k = \sum_k |c_k|^2 = \sum_k c_k^* c_k = \sum_k \langle\psi|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\psi\rangle =$$

$$= \langle\psi|\Big(\underbrace{\sum_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|}_{\hat{I}}\Big)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{I}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$$\int w(\lambda)\,d\lambda = \int d\lambda\, |f(\lambda)|^2 = \int d\lambda\, f^*(\lambda) f(\lambda) = \int d\lambda \langle\psi|\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle =$$

$$= \langle\psi|\Big(\underbrace{\int d\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|}_{1}\Big)|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

A valószínűség interpretációra épülő fogalmak

Várható érték:

F fizikai mennyiség $\quad \hat{F}|\varphi_k\rangle = f_k|\varphi_k\rangle$

$\quad |\psi\rangle = \sum c_k |\varphi_k\rangle$

$$\overline{F_\psi} = \sum_k f_k\, w(F = f_k) = \sum_k f_k |c_k|^2 = \sum_k f_k c_k^* c_k =$$

$$= \sum_k f_k \langle\psi|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\psi\rangle = \langle\psi|\Big(\underbrace{\sum_k f_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|}_{\hat{F}}\Big)|\psi\rangle = \underline{\underline{\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle}}$$

szendvics

Ez a mennyiség más bázison is kiszámolható, a c_k-k, sőt az f_k-k ismerete nélkül is!

Speciálisan: Ha $|\psi\rangle = |\varphi_k\rangle \qquad \overline{F} = \langle\varphi_k|\hat{F}|\varphi_k\rangle = \langle\varphi_k|f_k|\varphi_k\rangle = f_k$

a mért érték

SZÓRÁS

$$\bar{F} = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$$

$$\overline{\hat{F} - F} = \bar{F} - \bar{F} = 0$$

Szórásnégyzet $(\Delta F)^2 = \overline{(\hat{F} - \bar{F})^2} = \overline{\hat{F}^2 - 2\bar{F}\hat{F} + \bar{F}^2} = \overline{\hat{F}^2} - \bar{F}^2$

Heisenberg-féle határozatlansági reláció:

Legyen $\hat{A}^+ = \hat{A}$ és $\hat{B}^+ = \hat{B}$ két fizikai mennyiség operátora

Ekkor $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ antihermitikus

$= i\hat{C}$ $\quad \hat{C}^+ = \hat{C}$ már hermitikus

legyen tehát $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$

Ekkor tetszőleges $|\psi\rangle$ állapotban

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\bar{C}|}$$

Ha az egyenlőtlenség egyenlőségként teljesül: intelligens állapot (minimális szórású)

Viszont, a jobb oldal lehet 0 is!

De speciálisan $[\hat{p}, \hat{x}] = i\hbar \hat{I}$

↳ $\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ abszolút korlát

Függvényreprezentáció: intelligens állapot: Gauss-görbe

$$f(x) = N e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{a^2}} \xrightarrow[\text{transzformáció}]{\text{Fourier-}} F(p) = M e^{-\frac{1}{2}\frac{p^2}{q^2}} \qquad a \cdot q = 1$$

KVANTUMMECHANIKAI KÉPEK

Eml: $|\psi(t)\rangle = \hat{G}(t)|\psi(0)\rangle \qquad \hat{G}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

Várható érték: $\hat{A} \to \hat{A}_S \leftarrow$ Schrödinger

$$\bar{A}_\psi = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \bar{A}(t)$$

$$= \langle\psi(0)|\underbrace{\hat{G}^+(t)\hat{A}_S G(t)}_{\hat{A}_H(t)\,:\ \text{Heisenberg-kép}}|\psi(0)\rangle$$

Sch	$\psi(t)$	$\hat{A}_S$	$\Big\} \bar{A}(t)$ ugyanaz
Heis	$\psi(0)$	$\hat{A}_H(t)$	

$$\hat{A}_H(t) = \hat{G}^+(t)\hat{A}_S G(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{d}{dt}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right) A_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} A_S \frac{d}{dt}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{A}_H(t) - \hat{A}_H(t)\hat{H}\right) = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{A}_H\right]$$

Emlékeztető: klasszikus mechanika: Poisson-zárójel

$$\frac{d}{dt}A(q,p) = \{H, A\}$$

Ehrenfest-tétel: az operátorokra kapott mozgásegyenletek azonosak a megfelelő klasszikus mechanikai egyenletekkel!

Spec $[H, A] = 0$ (ez az időfejlődés megoldása NÉLKÜL is kiszámítható)

$$\longrightarrow \hat{A}_H(t) = A_S = \text{Constans: megmaradási tétel!}$$

Íme a klasszikus mechanika ÖSSZES problémájának EGZAKT megoldása:

$$\hat{X}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{x}_0 e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \left(\sum_k e^{\frac{i}{\hbar}E_k t}|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\right)\hat{x}_0\left(\sum_l e^{-\frac{i}{\hbar}E_l t}|\varphi_l\rangle\langle\varphi_l|\right) =$$

$$= \sum_k\sum_l \underbrace{\langle\varphi_k|\hat{x}_0|\varphi_l\rangle}_{\hat{x}_{kl}} e^{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_l)t}|\varphi_k\rangle\langle\varphi_l| \quad \checkmark$$

A nehézség megmaradásának tétele: $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$-t általában nem tudjuk megoldani.

Kölcsönhatási kép (Dirac-kép)

$$H = H_0 + K$$

H_0: egyszerű, ismerjük a sajátvektorokat

$$\hat{A}_D(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\,\hat{A}_S\,e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$$

Ilyenkor $|\psi(t)\rangle$ is változik, de ennek mozgásába csak a $\hat{K}$ operátor szól be.

Ha $\hat{K}$ "kicsi" → sorfejtés, perturbációszámítás

	ψ	$\hat{A}$
Sch	$\psi(t)$	A_S const
Heis	$\psi(0)$	$A_H(t)$
Dirac	$\psi_D(t)$	$A_D(t)$
	↑ H	↗ H_0

H_0: pl harmonikus oszcillátor, szabad mozgás

K pl anharmonikus potenciál, zavaró potenciál stb

(3) Ismerteti-e a legegyszerűbb fizikai rendszereket? (3) /11

HARMONIKUS OSZCILLÁTOR

$$K = \frac{m\dot{x}^2}{2} \quad V = \frac{k}{2}x^2 \quad (m\ddot{x} = -kx) \quad \omega^2 = \frac{k}{m}$$

$$\downarrow k = m\omega^2$$

$$p = m\dot{x} \rightarrow K = \frac{m\dot{x}^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$

$$H(p,x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

$$\hat{p}^+ = \hat{p} \quad \hat{x}^+ = \hat{x}$$

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad \Big| \quad [\hat{p},\hat{x}] = \frac{\hbar}{i}\hat{I}}$$

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$
?

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}}\hat{p} = \frac{\hat{p}}{p_0} \quad \hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} = \frac{\hat{x}}{x_0} \rightarrow [\hat{P},\hat{X}] = \frac{1}{i}\hat{I}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{P}^2 + \hat{X}^2) \qquad \hat{P}^+ = \hat{P} \quad \hat{X}^+ = \hat{X}$$

új, nem hermitikus operátorok:

$$\hat{a} = \frac{\hat{X} + i\hat{P}}{\sqrt{2}} \qquad \hat{a}^+ = \frac{\hat{X} - i\hat{P}}{\sqrt{2}} \rightarrow \hat{X} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^+}{\sqrt{2}} \quad \hat{P} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^+}{\sqrt{2}\, i}$$

$$\Longrightarrow [\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{I}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{P}^2 + \hat{X}^2) = \dots \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{I}\right)$$

Figyelem! $\hat{a}$ és $\hat{a}^+$ mindig $\hat{x}, \hat{p}$ párból leszármaztatható, de $\hat{H}$ csak a harmonikus oszcillátor esetében lesz ilyen egyszerű!

Vezessük be a $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a} = \hat{N}^+$ operátort

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{I}\right)$$

Keressük $\hat{N}$ sajátértékeit és sajátvektorait:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \qquad \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}, \quad n \in \mathbb{R}$$

tehát $[\hat a, \hat a^+] = \hat 1$, $\hat N = \hat a^+ \hat a$ $\quad \hat N|n\rangle = n|n\rangle$

$$n = n\cdot 1 = n\langle n|n\rangle = \langle n|n|n\rangle = \langle n|\hat N|n\rangle = \langle n|\hat a^+\hat a|n\rangle = \langle v|v\rangle \geq 0$$

ahol $|v\rangle = \hat a|n\rangle \rightarrow \langle v| = \langle n|\hat a^+$

Legyen $|u\rangle = \hat a^+|n\rangle \qquad |v\rangle = \hat a|n\rangle$

$$\hat N|u\rangle = \hat N \hat a^+|n\rangle = \hat a^+\hat a\hat a^+|n\rangle = \hat a^+(\hat a^+\hat a+\hat 1)|n\rangle = \hat a^+(\hat N+\hat 1)|n\rangle$$

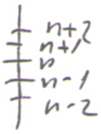
$$= \hat a^+(n+1)|n\rangle = (n+1)\hat a^+|n\rangle = (n+1)|u\rangle$$: $|u\rangle$ is sajátvektor!

$$\hat N|v\rangle = \hat N\hat a|n\rangle = \hat a^+\hat a\hat a|n\rangle = (\hat a\hat a^+ - \hat 1)\hat a|n\rangle = \hat a(\hat a^+\hat a - \hat 1)|n\rangle$$

$$= \hat a(\hat N - \hat 1)|n\rangle = \hat a(n-1)|n\rangle = (n-1)\hat a|n\rangle = (n-1)|v\rangle$$

$|v\rangle$ is sajátvektor!

Ha tehát n sajátérték, akkor $(n+1)$ és $(n-1)$ is az:



$\hat a^+$ és $\hat a$: léptető vagy létra-operátorok

$\rightarrow |u\rangle = \hat a^+|n\rangle = \alpha_n|n+1\rangle \qquad \alpha_n \in \mathbb{C}$

$|v\rangle = \hat a|n\rangle = \beta_n|n-1\rangle \qquad \beta_n \in \mathbb{C}$

$\alpha_n = \langle n+1|\alpha_n|n+1\rangle = \langle n+1|\hat a^+|n\rangle$

$\alpha_n^* = \langle n|\hat a|n+1\rangle = \langle n|\beta_{n+1}|n\rangle = \beta_{n+1} \rightarrow \beta_{n+1} = \alpha_n^*$

Eml: $n = \langle v|v\rangle = \langle n-1|\beta_n^*\beta_n|n-1\rangle = |\beta_n|^2 \longrightarrow \beta_n = \sqrt{n}$

a fázist elhagyjuk

$\beta_n = \sqrt{n} \qquad \alpha_n = \beta_{n+1} = \sqrt{n+1}$

$\rightarrow \boxed{\hat a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \qquad \hat a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle}$ oszcillátor-algebra

Létra $n \rightarrow (n-1) \rightarrow (n-2) \ldots \rightarrow (n-\text{sok}) \longrightarrow \hat a^+\hat a|n\rangle = n|n\rangle$

$\hat a\hat a^+|n\rangle = (n+1)|n\rangle$

de $n \geq 0$

a létrának meg kell szakadnia:

az egyik lefelé lépésnél $a|n\rangle \underset{=0}{\neq} \beta|n-1\rangle$ $\quad |n-1\rangle$ nem létezik

de $\beta_n = \sqrt{n} \rightarrow$ tehát az egyik $n=0$

a létra 0-ról indul $\rightarrow$ n-ek ~~egész~~ természetes számok

$n \in \{0, 1, 2 \ldots\} \qquad N|n\rangle = n|n\rangle$

$\hat H|n\rangle = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})|n\rangle \qquad E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ ✓

$n \in \mathbb{N}$

Az oszcillátor energiasajátállapotai teljes

$$|0\rangle \quad |1\rangle \quad \dots \quad |n\rangle \dots \qquad E_n = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)$$

$$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \qquad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \qquad \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

Legalacsonyabb energiájú állapot: $|0\rangle$ ez nem a nullvektor

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0 \quad \text{zérusponti energia} \qquad \langle 0|0\rangle = 1$$

<u>Oszcillátoralgebra</u>

$$\overline{x^2}_{(n)} = \langle n|\hat{x}^2|n\rangle = x_0^2 \langle n|\left(\frac{\hat{a}+\hat{a}^+}{\sqrt{2}}\right)^2|n\rangle = \frac{x_0^2}{2}\langle n|\left(\hat{a}\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+\right)|n\rangle$$

$$= \frac{x_0^2}{2}\langle n|\left(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\right)|n\rangle = \frac{x_0^2}{2}(n+1+n) = x_0^2\left(n+\tfrac{1}{2}\right)$$

HF $\overline{x p^2 x} = ?$

A báziselemek előállíthatók az alapállapotból:

$$|1\rangle = \hat{a}^+|0\rangle$$

$$\hat{a}^+|1\rangle = \sqrt{2}\,|2\rangle \rightarrow |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^+|1\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^2}{\sqrt{2}}|0\rangle$$

$$\rightarrow \boxed{|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle}$$

Az állapottér tetszőleges eleme:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

Speciális eset: legyen $c_n = K\frac{\beta^n}{\sqrt{n!}} \quad \beta\in\mathbb{C}$

$$|\beta\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} K\frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

$$\langle\beta|\beta\rangle = KK^*\left(\sum_n \frac{(\beta^*)^n}{\sqrt{n!}}\langle n|\right)\left(\sum_m \frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}|m\rangle\right) = |K|^2\sum \frac{(\beta^*\beta)^n}{n!} = |K|^2 e^{|\beta|^2} \stackrel{!}{=} 1$$

$$\rightarrow |\beta\rangle = e^{-|\beta|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = e^{-|\beta|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}\frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle =$$

$$= e^{-|\beta|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\beta\hat{a}^+)^n}{n!}|0\rangle = e^{-|\beta|^2/2}e^{\beta\hat{a}^+}|0\rangle$$

LÉZER

$|\beta\rangle$ koherens állapot

$$\hat{a}|\beta\rangle = \hat{a}\left(e^{-|\beta|^2/2}\sum_n \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\right) = e^{-|\beta|^2/2}\sum_n \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}\hat{a}|n\rangle$$

$$= e^{-|\beta|^2/2}\sum_n \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}\sqrt{n}|n-1\rangle = e^{-|\beta|^2/2}\sum_n \frac{\beta^n}{\sqrt{(n-1)!}}|n-1\rangle = \beta|\beta\rangle$$

$|\beta\rangle$ sajátvektora a (nem hermitikus) $\hat{a}$ léptető operátornak

---

A lézerfizikában az EM mező $|\beta\rangle$ állapotai létrehozhatók és manipulálhatók

A $|\beta\rangle$-k túltelített (oversaturated) bázist alkotnak

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\left(\sum_n \frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}}\langle n|\right)\left(\sum_m \frac{\beta^m}{\sqrt{m!}}|m\rangle\right)e^{-|\beta|^2/2} =$$

$$= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)}\sum_n \frac{(\alpha^*\beta)^n}{n!} = e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)+\alpha^*\beta}$$

Spec eset $\alpha,\beta\in\mathbb{R}$ $\quad \langle\alpha|\beta\rangle = e^{-\frac{(\alpha-\beta)^2}{2}} \neq 0$

- Vagy Schmidt-ortogonalizáció
- vagy nem egyértelmű előállítás a túltelített bázison

Létezik-e a harmonikus oszcillátor?

- molekularezgések
- kristályrezgések
- elektromágneses rezgések egy üregben: minden módus egy oszcillátor

- Kölcsönhatási kép: H_0 a harmonikus oszci, K perturbáció

A kvantummezőelmélet a fizikus nóta folytatása más eszközökkel: nincs benne más, mint harmonikus oszcillátor és perturbáció!