

A kvantummechanika axiómái

2020. november 5.

- Hamilton függvény: $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$.
A Hamilton függvény (energia) független változói: $\mathbf{p}$, $\mathbf{r}$.
- Newton egyenlet: $\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r})$
- Kanonikus egyenletek:

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} = v_i = \dot{r}_i,$$

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = \frac{\partial V}{\partial r_i} = -\mathbf{F}_i = -\dot{p}_i$$

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \dot{\mathbf{r}},$$

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\dot{\mathbf{p}}$$

Azok a szimmetria műveletek – eltolás, forgatás, időben eltolás – amelyek a Hamilton függvényt változatlanul hagyják egy csoportot alkotnak. Ezt a csoportot hívjuk a rendszer szimmetria csoportjának. Emmy Noether megmutatta, hogy minden egy rendszer minden folytonos szimmetria csoportjához tartozik egy mozgásállandó. A mozgásállandók teljes idő szerinti deriváltja eltűnik.



- **Térbeli eltolás $\Rightarrow$ lendület megmaradás**

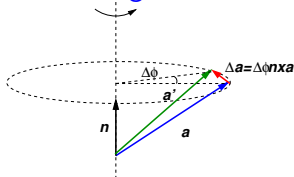
Tekintsünk egy kis $\Delta \mathbf{r}$ vektorral való eltolást:

$$\Delta H = H(\mathbf{p}, \mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}) - H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial H}{\partial r_i} \Delta r_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \Delta \mathbf{r} = 0$$

Használjuk fel a kanonikus egyenleteket:

$$\Delta H = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial H}{\partial r_i} \Delta r_i = - \sum_{i=1}^3 \dot{p}_i \Delta r_i = 0, \forall \Delta \mathbf{r} \Rightarrow \dot{\mathbf{p}} = 0, \mathbf{p} = \text{állandó}$$

• Forgatás $\Rightarrow$ perdület megmaradás



Forgassunk el egy a vektort $\mathbf{n}$ egységvektor körül $\Delta\varphi$ szöggel. A vektor megváltozása: $\Delta\mathbf{a} = \Delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{a}$. A forgatás során mind a perdület, mind a hely vektor megváltozik.

$$\Delta\mathbf{p} = \Delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{p}, \quad \Delta\mathbf{r} = \Delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r}$$

Ha a Hamilton függvény invariáns a forgatásokra, akkor a megváltozása egy tetszőleges forgatással szemben el kell, hogy tűnjön:

$$\Delta H = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \Delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \Delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{p} = 0$$

Használjuk fel ismét a kanonikus egyenleteket:

$$\begin{aligned} \Delta H &= \Delta\varphi (-\dot{\mathbf{p}}(\mathbf{n} \times \mathbf{r}) + \dot{\mathbf{r}}(\mathbf{n} \times \mathbf{p})) = \\ &= \Delta\varphi \mathbf{n} (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{p}} + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{p}) = \Delta\varphi \mathbf{n} \frac{d}{dt}(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = 0 \end{aligned}$$

Tehát, ha a Hamilton függvény invariáns tetszőleges forgatással szemben, akkor az $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ perdület mozgásállandó lesz.

- Időbeni eltolás $\Rightarrow$ energia megmaradás

Írjuk fel a Hamilton függvény teljes idő szerinti deriváltját:

$$\frac{dH}{dt} = \underbrace{\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}}_{\dot{\mathbf{r}}} \dot{\mathbf{p}} + \underbrace{\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}}_{-\dot{\mathbf{p}}} \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial H}{\partial t}$$

Használjuk fel ismét a kanonikus egyenleteket:

$$\frac{dH}{dt} = \dot{\mathbf{r}}\dot{\mathbf{p}} - \dot{\mathbf{p}}\dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

Ha a Hamilton függvény explicit módon nem függ az időtől, akkor az energia megmarad.

- Eltolás operátora: $T(\Delta \mathbf{r}) = 1 + \Delta \mathbf{r} \nabla$

$$T(\Delta \mathbf{r})f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial r_i} \Delta r_i = \underbrace{(1 + \Delta \mathbf{r} \nabla)}_{T(\Delta \mathbf{r})} f(\mathbf{r})$$

- Forgatás operátora: $R(\mathbf{n}, \Delta \varphi) = 1 + \Delta \varphi \mathbf{n}(\mathbf{r} \times \nabla)$

$$\begin{aligned} R(\mathbf{n}, \Delta \varphi)f(\mathbf{r}) &= f(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial r_i} \Delta r_i \\ &= f(\mathbf{r}) + \Delta \varphi (\mathbf{n} \times \mathbf{r}) \nabla f(\mathbf{r}) = \underbrace{(1 + \Delta \varphi \mathbf{n}(\mathbf{r} \times \nabla))}_{R(\mathbf{n}, \Delta \varphi)} f(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

- 1 Egy rendszer állapotát egy $\mathcal{H}$ Hilbert tér egy Ψ elemével jellemezzük.
- 2 A dinamikai mennyiségeket (A) ezen a $\mathcal{H}$ téren ható lineáris, önandjungált operátorokkal (A) reprezentáljuk. Dinamikai mennyiségnek a koordinátát, az impulzust, illetve az ezekkel kifejezhető mennyiségeket nevezzük. Az impulzus a téreltolás, a perdület a forgatás, az energia pedig az időeltolás generátora.
- 3 Az A dinamikai mennyiség mérésekor annak egy sajátértékét kapjuk.
- 4 Az A dinamikai mennyiség mérésekor a rendszer az A operátor mért sajátértékéhez tartozó sajátállapotába ugrik.

A kvantummechanika axiómái

Legyen a φ_n az A operátor egy a_n sajátértékű sajátállapota. $A\varphi_n = a_n\varphi_n$. Tetszőleges állapotot kifejezhetünk A sajátállapotain:

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n$$

Annak a valószínűsége, hogy a rendszer a φ_n állapotban van $|c_n|^2$. A hullámfüggvény normájából következik:

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{nm} c_n^* c_m \underbrace{\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle}_{\delta_{nm}} = \sum_n |c_n|^2 = \sum_n P(n)$$

Annak a valószínűsége, hogy az A mennyiség mérése során az a_n értéket kapjuk $|c_n|^2$. Az A mennyiség várható értéke a ψ állapotban:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n a_n P(n) = \sum_n a_n |c_n|^2 = \sum_n \langle \varphi_n | A | \varphi_n \rangle |c_n|^2 \\ &= \sum_{nm} c_n^* \langle \varphi_n | A | \varphi_m \rangle c_m = \langle \psi | A | \psi \rangle \end{aligned}$$

Az A operátor várható értéke egy ψ állapotban: $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$.

Az impulzus operátor

Az infinitezimális eltolás operátora: $1 + \Delta \mathbf{r} \nabla$, 1D-ben, $1 + \Delta x \frac{d}{dx}$. Legyen a p operátor az eltolás generátora. Hermitikus az operátor?

$$\left\langle \psi \left| \frac{d}{dx} \varphi \right. \right\rangle \stackrel{?}{=} \left\langle \frac{d}{dx} \psi \left| \varphi \right. \right\rangle$$

$$\begin{aligned} \left\langle \psi \left| \frac{d}{dx} \varphi \right. \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d\varphi}{dx} dx \\ &= \underbrace{\psi^*(x) \varphi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{\text{a normálhatóság miatt eltűnik}} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*}{dx} \varphi(x) dx \\ &= - \left\langle \frac{d}{dx} \psi \left| \varphi \right. \right\rangle \end{aligned}$$

A $\frac{d}{dx}$ operátor anti hermitikus.

Az impulzus operátor

Az infinitezimális eltolás operátora: $1 + \Delta \mathbf{r} \nabla$, 1D-ben, $1 + \Delta x \frac{d}{dx}$. Legyen a p operátor az eltolás generátora. Hermitikus az operátor?

$$\left\langle \psi \left| \frac{d}{dx} \varphi \right. \right\rangle \stackrel{?}{=} \left\langle \frac{d}{dx} \psi \left| \varphi \right. \right\rangle$$

$$\begin{aligned} \left\langle \psi \left| i \frac{d}{dx} \varphi \right. \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) i \frac{d\varphi}{dx} dx \\ &= \underbrace{i \psi^*(x) \varphi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{\text{a normálhatóság miatt eltűnik}} - \int_{-\infty}^{\infty} i \frac{d\psi^*}{dx} \varphi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(i \frac{d\psi}{dx} \right)^* \varphi(x) dx = \left\langle i \frac{d}{dx} \psi \left| \varphi \right. \right\rangle \end{aligned}$$

A $i \frac{d}{dx}$ operátor hermitikus. A mértékegységet figyelembe véve legyen az impulzus operátor $p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$, 3D-ben $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$!

Felcserélési reláció

Az infinitezimális eltolás operátora $T(\Delta x) = 1 + \Delta x \frac{i}{\hbar} p$. Az eltolás operátorának inverzében $-\Delta x$ szerepel. A transzformáció szabályt felhasználva hely operátor eltoltja:

$$T(\Delta x)x = \left(1 + \Delta x \frac{i}{\hbar} p\right) x \left(1 - \Delta x \frac{i}{\hbar} p\right) = x + \Delta x$$

Tartsuk meg csak a Δx -ben első rendű tagokat:

$$x + \Delta x = x + \Delta x \frac{i}{\hbar} (px - xp) \quad \Rightarrow \quad px - xp = \frac{\hbar}{i}$$

A $px - xp$ műveletet a p és x operátorok kommutátorának nevezzük:

$$px - xp = [p, x] = \frac{\hbar}{i}$$

Ha a x hely operátornak a helyvektorral való szorzást választjuk, akkor teljesül az előző felcserélési reláció:

$$\begin{aligned} [p, x]\psi(x) &= (px - xp)\psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}(x\psi(x)) - x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\psi(x) \\ &= \frac{\hbar}{i}\psi(x) + x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\psi(x) - x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\psi(x) \end{aligned}$$

Hamilton operátor

Egy rendszer Hamilton függvénye (energiája):

$$H(p, r) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

Ha a Hamilton függvényben a p , $\mathbf{r}$ változókat operátorokra cseréljük az axiómák szerint, a Hamilton operátort kapjuk:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}) ,$$

ahol $\hat{V}$ a potenciális energiával való szorzás operátora. Az időfüggő Schrödinger egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V(x)\psi = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \psi + V\psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x) \right) \psi$$

Az időfüggő és az idő független Schrödinger egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi , \quad \hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$$

Hamilton operátor

A Hamilton operátor az állapot időbeni fejlődését írja le:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

A Hamilton operátor φ_n sajátállapotait a rendszer stacionárius állapotainak nevezzük:

$$\hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n$$

Ha Hamilton operátor nem függ az időtől, akkor a formális megoldása az időfüggő Schrödinger egyenletnek:

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi(0)$$

Írjuk vissza a Schrödinger egyenletbe:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi(0) = i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} H\right) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi(0) = H \psi(t)$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = 1 - \frac{i}{\hbar} H t + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar} H t\right)^2 \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} H t\right)^n$$