

A felcserélési relációk és azok használata

2023. október 31.

- 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.

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:

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

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:

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

Mire jó a felcserélési reláció (kommutátor)

Állítás: Ha az A és B operátor felcserélhető: $AB = BA$, akkor közös sajátállapotuk van.

Legyen $|\varphi_n\rangle$ és $|\psi_n\rangle$ az A és B operátor sajátállapota:

$$[A, B] = 0 \Rightarrow AB = BA \quad A|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle, \quad B|\psi_n\rangle = b_n|\psi_n\rangle$$

$$AB|\psi_n\rangle = \underbrace{b_n A|\psi_n\rangle}_{\text{sajátérték egyenlet}} = BA|\psi_n\rangle \Rightarrow A|\psi_n\rangle \text{ sajátállapota } B \text{ operátornak}$$

$|\psi_n\rangle$ és $A|\psi_n\rangle$ csak egy konstans szorzóban különbözhetnek: $A|\psi_n\rangle = c|\psi_n\rangle$, tehát $|\psi_n\rangle$ sajátállapota az A operátornak!

$$BA|\varphi_n\rangle = \underbrace{a_n B|\varphi_n\rangle}_{\text{sajátérték egyenlet}} = AB|\varphi_n\rangle \Rightarrow B|\varphi_n\rangle \text{ sajátállapota } A \text{ operátornak}$$

$|\varphi_n\rangle$ és $B|\varphi_n\rangle$ csak egy konstans szorzóban különbözhetnek: $B|\varphi_n\rangle = c|\varphi_n\rangle$, tehát $|\varphi_n\rangle$ sajátállapota a B operátornak!

Mire jó a felcserélési reláció (kommutátor)

Mivel az A és B dinamikai mennyiségek mérésekor a rendszer az A és B operátor mért sajátértékéhez tartozó sajátállapotába ugrik, csak azok a mennyiségek mérhetők szimultán, amelyeknek közös sajátállapot rendszerük van! Vagyis ha $[A, B] = 0$!

Mire jó a felcserélési reláció (kommutátor)

Néhány hasznos összefüggés:

- $[\alpha A, \beta B] = \alpha A \beta B - \beta B \alpha A = \alpha \beta (AB - BA) = \alpha \beta [A, B]$
- $[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$
- $AB = AB - BA + BA = [A, B] + BA$
- $[AB, C] = ABC - CAB = \underbrace{ABC - ACB}_{A[B, C]} + \underbrace{ACB - CAB}_{[A, C]B} = A[B, C] + [A, C]B$

•

$$[p, x] = \frac{\hbar}{i}, \quad [p, V(x)] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x}$$

$$\begin{aligned} [p, V(x)]\psi(x) &= pV(x)\psi(x) - V(x)p\psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V(x)\psi(x) - V(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial V}{\partial x} \psi(x) + V(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) - V(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) = \boxed{\frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x}} \psi(x) \end{aligned}$$

Harmonikus oszcillátor

Az egyik leggyakrabban előforduló probléma: harmonikus oszcillátor.
(Egyensúly körüli kis rezgések, molekulák, kristályok rezgései, fononok).
Klasszikusan a harmonikus oszcillátor energiája és a Newton egyenlet:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2, \quad m\ddot{x} = -kx$$

A klasszikus megoldás: $x = A \cos(\omega t + \varphi)$ ahol $\omega^2 = \frac{k}{m}$, ($k = m\omega^2$)

Kvantummechanikában x és p helyére operátorok kerülnek. A rendszer Hamilton operátora:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Klasszikusan egyszerűen belátható, hogy az oszcillátor energiája mindig nagyobb mint nulla. Kvantummechanikában ez azt jelenti, hogy létezik egy legalacsonyabb energiájú állapot, vagyis a Hamilton operátor alulról korlátos. Behelyettesítve a $p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ impulzus operátort az időfüggetlen Schrödinger egyenletet egy másodrendű differenciálegyenlet lesz, amelyet akár meg is oldhatnánk.

Harmonikus oszcillátor

A differenciálegyenlet megoldása helyett játszunk a felcserélési relációkkal!

Vezessünk be egy hosszúság skálát. A Planck állandó dimenziója: $\frac{m^2 kg}{s}$, a

körfrekvencia dimenziója $1/s$. A $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ mennyiségnek hosszúság

dimenziója lesz. Az impulzus egységének válasszuk az $p_0 = \frac{\hbar}{x_0} = \sqrt{\hbar m \omega}$ mennyiséget. Vezessük be a következő két operátort:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + i \frac{p}{p_0} \right), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - i \frac{p}{p_0} \right)$$

Ekkor:

$$a^+ a = \frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} - i \frac{p}{p_0} \right) \left(\frac{x}{x_0} + i \frac{p}{p_0} \right) = \frac{p^2}{2p_0^2} + \frac{x^2}{2x_0^2} + \frac{i}{2x_0 p_0} \underbrace{(xp - px)}_{[x,p] = -\frac{\hbar}{i}}$$

$$a^+ a = \frac{p^2}{2\hbar\omega m} + \frac{1}{2} \frac{m\omega^2}{\hbar\omega} x^2 - \frac{1}{2} = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - \frac{1}{2} \hbar\omega \right)$$

Harmonikus oszcillátor

$$a^+ a = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) = \frac{1}{\hbar\omega} \left(H - \frac{1}{2} \hbar\omega \right)$$

Tehát a Hamilton operátort a két új operátorunkkal így írhatjuk fel:

$$H = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right)$$

A két új operátor felcserélési relációja: $[a, a^+] = 1$

$$[a, a^+] = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{x}{x_0} + i \frac{p}{p_0} \right), \left(\frac{x}{x_0} - i \frac{p}{p_0} \right) \right] = \frac{i}{2\hbar} ([p, x] - [x, p]) = \frac{i}{\hbar} [p, x] = 1$$

Vizsgáljuk meg a Hamilton operátor és az új operátorok felcserélési relációját:

$$[H, a] = \hbar\omega [a^+ a, a] = \hbar\omega (a^+ [a, a] + [a^+, a] a) = -\hbar\omega a$$

$$[H, a^+] = \hbar\omega [a^+ a, a^+] = \hbar\omega (a^+ [a, a^+] + [a^+, a^+] a) = \hbar\omega a^+$$

Összefoglalva:

$$[a, a^+] = 1, \quad [H, a] = -\hbar\omega a, \quad [H, a^+] = \hbar\omega a^+$$

Harmonikus oszcillátor

Hogyan kereshetnénk meg a Hamilton operátor sajátállapotait (hogyan oldhatnánk meg az időfüggetlen Schrödinger egyenletet) az új operátorok segítségével? Tegyük fel, hogy ismerjük a sajátállapotokat és a sajátértékeket: $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$. Vajon saját állapot lesz-e az $a^+|\varphi_n\rangle$ és $a|\varphi_n\rangle$?

$$Ha|\varphi_n\rangle = (aH + [H, a])|\varphi_n\rangle = (aH - \hbar\omega a)|\varphi_n\rangle = (E_n - \hbar\omega)a|\varphi_n\rangle$$

Tehát $a|\varphi_n\rangle$ sajátállapota H -nak $E_n - \hbar\omega$ sajátértékkel.

$$Ha^+|\varphi_n\rangle = (a^+H + [H, a^+])|\varphi_n\rangle = (a^+H + \hbar\omega a^+)|\varphi_n\rangle = (E_n + \hbar\omega)a^+|\varphi_n\rangle$$

Tehát $a^+|\varphi_n\rangle$ sajátállapota H -nak $E_n + \hbar\omega$ sajátértékkel.

Tudjuk, hogy létezik a Hamilton operátornak egy legalacsonyabb E_0 sajátértékhez tartozó állapota: $|\varphi_0\rangle$. Ha erre hatunk a -val

$Ha|\varphi_0\rangle = (E_0 - \hbar\omega)a|\varphi_0\rangle$ az $a|\varphi_0\rangle$ állapot energiája alacsonyabb lenne mint E_0 , ami ellentmondás. $\Rightarrow a|\varphi_0\rangle = 0$. Mekkora a E_0 ?

$$H|\varphi_0\rangle = \hbar\omega \left(a^+a + \frac{1}{2} \right) |\varphi_0\rangle = \hbar\omega a^+ \underbrace{a|\varphi_0\rangle}_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega|\varphi_0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|\varphi_0\rangle = E_0|\varphi_0\rangle$$

Tehát: $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

Harmonikus oszcillátor

Az előzőek szerint:

$|\varphi_1\rangle = a^+|\varphi_0\rangle$ is sajátállapot $E_1 = \hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega$ sajátértékkel

$|\varphi_2\rangle = a^+|\varphi_1\rangle$ is sajátállapot $E_2 = 2\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega$ sajátértékkel

és így tovább ...

Az n -ik sajátérték: $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$. Az a és a^+ operátorokat a

tulajdonságaik alapján léptető operátoroknak nevezzük. A léptető operátorok konkrét alakját felhasználva meghatározhatjuk az alapállapot hullámfüggvényét:

$$a|\varphi_0\rangle = 0, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + i \frac{p}{p_0} \right) \varphi_0 = 0$$

$$\left(\frac{x}{x_0} + i \frac{p}{p_0} \right) \varphi_0 = \frac{x}{x_0} \varphi_0 + \frac{i}{p_0} \frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi_0}{dx} = 0$$

$$\frac{d\varphi_0}{dx} = -\frac{x}{x_0^2} \varphi_0, \quad \varphi_0 = C e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

Figyelembe véve a norma feltételt:

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

Harmonikus oszcillátor

$$\hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) |\varphi_n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |\varphi_n\rangle, \quad a^+ a |\varphi_n\rangle = n |\varphi_n\rangle$$

A léptető operátorok hatása a sajátállapotokra:

Tudjuk, hogy $a|\varphi_n\rangle = c|\varphi_{n-1}\rangle$

$$|c|^2 \langle \varphi_{n-1} | \varphi_{n-1} \rangle = |a|\varphi_n\rangle|^2 = \langle a\varphi_n | a\varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | a^+ a |\varphi_n\rangle = n \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = n$$

Tehát $a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle$

Hasonlóan, $a^+|\varphi_n\rangle = c|\varphi_{n+1}\rangle$

$$\begin{aligned} |c|^2 &= |a^+|\varphi_n\rangle|^2 = \langle a^+ \varphi_n | a^+ \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | a a^+ |\varphi_n\rangle = \langle \varphi_n | a^+ a + [a, a^+] |\varphi_n\rangle \\ &= \langle \varphi_n | a^+ a + 1 |\varphi_n\rangle = n + 1 \end{aligned}$$

Tehát $a^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$

Összefoglalás:

A harmonikus oszcillátor Hamilton operátora: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

Léptető operátorok:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + i \frac{p}{p_0} \right), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - i \frac{p}{p_0} \right)$$

A Hamilton operátorok a léptető operátorokkal: $H = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right)$ A léptető operátorok hatása:

$$a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle, \quad a^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$$

A Hamilton operátor sajátértékei és sajátállapotai: $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, \quad \varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{+n} \varphi_0$$