

Operátorok a kvantummechanikában

2020. október 29.

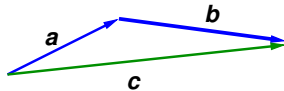
Lineáris vektortér

Legyen F egy Test. Egy V nemüres halmazt vektortérnek nevezünk az F test felett, ha

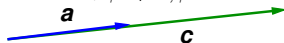
- V halmazon értelmezve van egy *összeadás* nevű művelet, $V \times V \rightarrow V$ függvény, $\forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in V$ elempárhoz hozzárendel egy és csak egy V -beli elemet $(\mathbf{u} + \mathbf{v})$, valamint
- F és V között értelmezve van egy *skalárral való szorzás* nevű művelet, $F \times V \rightarrow V$ függvény, $\forall \lambda \in F$ és $\mathbf{v} \in V$ elempárhoz egyértelműen hozzárendel egy V -beli elemet $(\lambda \mathbf{v})$,

3D tér vektorai

- Vektorok összeadása: $\mathbf{c} = \mathbf{a} + \mathbf{b}$



- Skalárral való szorzás:
 $\mathbf{c} = \alpha \mathbf{a}$, $\alpha \in \mathcal{R}$
Lineáris kombináció:
 $\mathbf{c} = \alpha \mathbf{a} + \beta \mathbf{b}$, $\alpha, \beta \in \mathcal{R}$

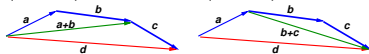


Vektortér-axiómák

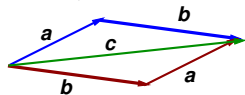
1 V az összeadásra nézve kommutatív, azaz az összeadás:

- Asszociativitás: $\forall \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in V: \mathbf{u} + (\mathbf{v} + \mathbf{w}) = (\mathbf{u} + \mathbf{v}) + \mathbf{w}$.
- Kommutativitás: $\forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in V: \mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{u}$.
- Létezik neutrális elem: $\mathbf{0} \in V$, V nullvektora: $\mathbf{v} + \mathbf{0} = \mathbf{v}, \forall \mathbf{v} \in V$.
- Invertálhatóság: $\forall \mathbf{v} \in V: \exists$ olyan $-\mathbf{v} \in V$ additív inverz: $\mathbf{v} + (-\mathbf{v}) = \mathbf{0}$.

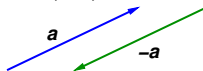
• $(\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c} = \mathbf{a} + (\mathbf{b} + \mathbf{c})$



• $\mathbf{c} = \mathbf{a} + \mathbf{b}$



• $\mathbf{a} + (-\mathbf{a}) = \mathbf{0}$



Vektortér-axiómák

② *Skalárral való szorzás disztributivitás szabályai:*

- $\forall \lambda \in F$ és $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in V$: $\lambda(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = \lambda\mathbf{u} + \lambda\mathbf{v}$.
- $\forall \lambda, \mu \in F$ és $\mathbf{v} \in V$: $(\lambda + \mu)\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} + \mu\mathbf{v}$.
- $\forall \lambda, \mu \in F$ és $\mathbf{v} \in V$: $\lambda(\mu\mathbf{v}) = (\lambda\mu)\mathbf{v}$.
- $\forall \mathbf{v} \in V$: $1\mathbf{v} = \mathbf{v}$, ahol 1 az F test egységeleme.

Hilbert tér

A H végtelen dimenziós lineáris vektorteret a T komplex számtest feletti Hilbert-térnek nevezzük, ha értelmezve van rajta egy belső szorzat, amely a következő feltételeknek tesz eleget: Legyen x, y, z a Hilbert tér eleme, λ pedig egy komplex szám.

- ❶ $\langle x|x \rangle \geq 0$
- ❷ Ha $\langle x|x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0$
- ❸ $\langle x|y \rangle = \langle y|x \rangle^*$
- ❹ $\langle x|\lambda y \rangle = \lambda \langle x|y \rangle$
- ❺ $\langle x|y + z \rangle = \langle x|y \rangle + \langle x|z \rangle$

Értelmezzük a Hilbert tér normáját a belső szorzat segítségével: $|x| = \sqrt{\langle x|x \rangle}$. A Hilbert tér erre a normára nézve teljes, azaz minden H -beli Cauchy-sorozat konvergál egy Hilbert térbeli elemhez.

Hilbert tér

Dobozba zárt részecske:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Minden $[0, L]$ intervallumon értelmezett hullámfüggvény kifejezhető φ_n -ek segítségével: $\{\varphi_n\}$ bázist alkot a Hilbert térben.

Skalár szorzat:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int \psi^*(x) \phi(x) dx$$

$$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) dx = \delta_{nm} , \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i = j \\ 0 & \text{ha } i \neq j \end{cases}$$

Operátorok

Legyen V, W két lineáris vektortér. Az O operátor V elemeit képezi le a W vektortérre:

$$O\mathbf{v} = \mathbf{w}, \mathbf{v} \in V, \mathbf{w} \in W$$

Az O operátor lineáris, ha

$$O(\alpha\mathbf{v}_1 + \beta\mathbf{v}_2) = \alpha O\mathbf{v}_1 + \beta O\mathbf{v}_2, \quad \alpha, \beta \in \mathcal{C}$$

Példaként tekintsük a 3D tér vektorait. Az O operátor legyen egy α szögű forgatás a z tengely körül:

$$\mathbf{b} = O\mathbf{a}$$

Az $\mathbf{a}$ és $\mathbf{b}$ vektort felírhatjuk az $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ bázisvektorok segítségével:

$$\mathbf{a} = a_1\mathbf{i} + a_2\mathbf{j} + a_3\mathbf{k}, \quad \mathbf{b} = b_1\mathbf{i} + b_2\mathbf{j} + b_3\mathbf{k}$$

$$b_1\mathbf{i} + b_2\mathbf{j} + b_3\mathbf{k} = O(a_1\mathbf{i} + a_2\mathbf{j} + a_3\mathbf{k}) = a_1O\mathbf{i} + a_2O\mathbf{j} + a_3O\mathbf{k}$$

Operátorok

$$b_1\mathbf{i} + b_2\mathbf{j} + b_3\mathbf{k} = O(a_1\mathbf{i} + a_2\mathbf{j} + a_3\mathbf{k}) = a_1O\mathbf{i} + a_2O\mathbf{j} + a_3O\mathbf{k}$$

Szorozzuk be az egyenletet skalárisan az $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ egységvektorokkal:

$$b_1 = a_1\mathbf{i} \cdot (O\mathbf{i}) + a_2\mathbf{i} \cdot (O\mathbf{j}) + a_3\mathbf{i} \cdot (O\mathbf{k})$$

$$b_2 = a_1\mathbf{j} \cdot (O\mathbf{i}) + a_2\mathbf{j} \cdot (O\mathbf{j}) + a_3\mathbf{j} \cdot (O\mathbf{k})$$

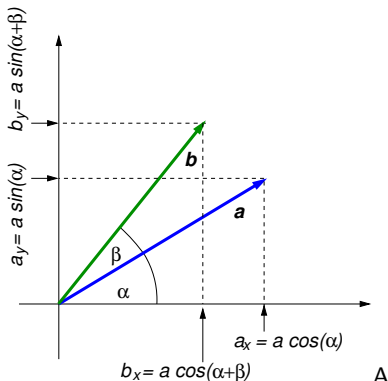
$$b_3 = a_1\mathbf{k} \cdot (O\mathbf{i}) + a_2\mathbf{k} \cdot (O\mathbf{j}) + a_3\mathbf{k} \cdot (O\mathbf{k})$$

Nevezzük át az $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ egységvektort $\mathbf{c}_1$, $\mathbf{c}_2$, $\mathbf{c}_3$ vektorokká. A fenti egyenletet átírhatjuk a következő alakba:

$$b_i = \sum_{j=1}^3 \mathbf{c}_i \cdot (O\mathbf{c}_j) a_j = \sum_{j=1}^3 O_{ij} a_j, \quad O_{ij} = \mathbf{c}_i \cdot (O\mathbf{c}_j)$$

Az O_{ij} mátrixot az O operátor mátrix reprezentációjának hívjuk.

Forgatás mátrix



forgatás mátrixa:

$$O = \begin{pmatrix} \cos(\beta) & -\sin(\beta) \\ \sin(\beta) & \cos(\beta) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b} = O\mathbf{a}$$

$$a_x = a \cos(\alpha) \text{ , } \quad a_y = a \sin(\alpha)$$

$$b_x = a \cos(\alpha + \beta)$$

$$b_x = a \cos(\alpha) \cos(\beta) - a \sin(\alpha) \sin(\beta)$$

$$b_x = a_x \cos(\beta) - a_y \sin(\beta)$$

$$b_y = a \sin(\alpha + \beta)$$

$$b_y = a \cos(\alpha) \sin(\beta) + a \sin(\alpha) \cos(\beta)$$

$$b_y = a_x \sin(\beta) + a_y \cos(\beta)$$

$$b_x = a_x \cos(\beta) - a_y \sin(\beta)$$

$$b_y = a_x \sin(\beta) + a_y \cos(\beta)$$

Forgatás mátrix

A z tengely körüli forgatás mátrixa:

$$O = \begin{pmatrix} \cos(\beta) & -\sin(\beta) & 0 \\ \sin(\beta) & \cos(\beta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

A forgatás nem változtatja meg a vektor hosszát. Azokat az operátorokat, amelyek nem változtatják meg egy vektortér elem normáját, **unitérnek** hívjuk. A forgatás unitér operátor. Hogyan szerkeszthetünk meg egy tetszőleges irány körüli forgatást?

Forgassuk az $\mathbf{a}$ vektort $\mathbf{n}$ körül. O forgassa el a z tengelyt az új forgástengely irányába. Ha a rendszerünket O^{-1} -el elforgatjuk, abban $\mathbf{n}$ párhuzamos lesz a z tengellyel. Ebben a rendszerben ismerjük a forgatást: O_z . Miután elforgattuk a vektorunkat vissza kell térnünk az eredeti rendszerbe O -val. Tehát:

$$\mathbf{b} = \underbrace{OO_zO^{-1}}_{O'} \mathbf{a}$$

Általában egy A operátor transzformáltja: $A' = UAU^{-1}$, ahol U egy unitér transzformáció.



Forgatás mátrix

Példa: Forgassuk el a z tengely körüli forgatást az x tengely körül 90° fokkal:

$$O_z = \begin{pmatrix} \cos(\beta) & -\sin(\beta) & 0 \\ \sin(\beta) & \cos(\beta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad Q_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(90) & -\sin(90) \\ 0 & \sin(90) & \cos(90) \end{pmatrix}$$

$$Q_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q_x^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$O' = O_x O_z O_x^{-1}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\beta) & -\sin(\beta) & 0 \\ \sin(\beta) & \cos(\beta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\beta) & 0 & -\sin(\beta) \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin(\beta) & 0 & \cos(\beta) \end{pmatrix}$$

Operátorok

Mátrixok

Mátrix transzponáltja:

$$A_{ij}^t = A_{ji} , \quad \mathbf{a}(\mathbf{A}\mathbf{b}) = (\mathbf{A}^t \mathbf{a})\mathbf{b}$$

Szimmetrikus mátrix:

$$A_{ij} = A_{ji} , \quad \mathbf{a}(\mathbf{A}\mathbf{b}) = (\mathbf{A}\mathbf{a})\mathbf{b}$$

Mátrix sajátértéke:

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$$

Szimmetrikus mátrix sajátértékei valósak, sajátvektorai ortonormáltak:
 $\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j = \delta_{ij}$

Operátorok

Operátor adjungáltja:

$$\langle \varphi | \mathbf{A} \psi \rangle = \langle \mathbf{A}^+ \varphi | \psi \rangle$$

Hermitikus operátor:

$$\langle \varphi | \mathbf{H} \psi \rangle = \langle \mathbf{H} \varphi | \psi \rangle$$

Operátor sajátállapota

$$\mathbf{A}|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle$$

Hermitikus operátor sajátértékei valósak és sajátállapotai ortonormált rendszert alkotnak: $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$

Hermitikus operátorok

Hermitikusság:

$$\langle \varphi | H \psi \rangle = \langle H \varphi | \psi \rangle, \quad H = H^+$$

$$\langle \varphi_i | H \varphi_i \rangle = \lambda_i \langle \varphi_i | \varphi_i \rangle = \lambda_i = \langle H \varphi_i | \varphi_i \rangle = \lambda_i^* \langle \varphi_i | \varphi_i \rangle = \lambda_i^*$$

Tehát $\lambda_i = \lambda_i^*$!

$$\langle \varphi_j | H \varphi_i \rangle = \lambda_i \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle = \langle H \varphi_j | \varphi_i \rangle = \lambda_j \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle$$

$$(\lambda_i - \lambda_j) \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle = 0 \Rightarrow \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle = 0$$

Hermitikus operátorok

A Hermitikus operátorok sajátértékei valósak és sajátállapotaik ortonormált bázist alkotnak, amelyek kifeszítik a teljes Hilbert teret.