Hibert tér

Négyzetesen integrálható fv.-ek tere, $\mathbf{L}^2$ tér

Skalár szorzat $\langle f|g\rangle$

$$\int f^*(\mathbf{r})g(\mathbf{r})d^3r$$

Lineáris operátorok

$A|f\rangle$

példa: $Af(x) = \dfrac{\partial f(x)}{\partial x}; \quad Af(x) = V(x)f(x)$

Operátor adjungáltja

$\langle f|Ag\rangle = \langle A^+ f|g\rangle$

példa: $\langle f|Ag\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\dfrac{\partial g}{\partial x}dx = f^*(x)g(x)|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \dfrac{\partial f^*}{\partial x}g(x)dx = -\int_{-\infty}^{\infty} \dfrac{\partial f^*}{\partial x}g(x)dx = \langle A^+ f|g\rangle$
A négyzetesen integrálható függvények a végtelenben el kell, hogy tünjenek. Az előző sorból leolvasható, hogy a deriválás adjungáltja a deriválás minuszegyszerese: $\left(\dfrac{\partial}{\partial x}\right)^+ = -\dfrac{\partial}{\partial x}$.

Önadjungált (Hermitikus) operátorok

$\langle f|Ag\rangle = \langle Af|g\rangle$ vagyis $A^+ = A$

Legyen $A = i\dfrac{\partial}{\partial x}$. Az előzőekhez hasonlóan: $\langle f|Ag\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)(i)\dfrac{\partial g}{\partial x}dx = i\, f^*(x)g(x)|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} i^*\dfrac{\partial f^*}{\partial x}g(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} i^*\dfrac{\partial f^*}{\partial x}g(x)dx = \langle Af|g\rangle$,
ahol felhasználtuk, hogy $i^* = -i$. Az előző egyenlet jobb és baloldalát összehasonlítva megállapíthatjuk, hogy az A operátor Hermitikus!
$Af(x) = V(x)f(x)$ $\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)V(x)g(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}(V(x)f^*(x))g(x)dx$ Tehát egy valós $V(x)$ függvénnyel való szorzás Hermitikus!

Operátorok

Mátrixok

Sajátérték probléma

$$A|f_i\rangle = \lambda_i|f_i\rangle$$

$$\langle f_i|A = \lambda_i\langle f_i|$$

$\mathbf{A}\mathbf{u}_i = \lambda_i\mathbf{u}_i$, kiírva az összegzést

$$\sum_j A_{kj}u_{ji} = \lambda_i u_{ki}$$

$\mathbf{v}_i^+\mathbf{A} = \lambda_i\mathbf{v}_i^+$, kiírva az összegzést

$$\sum_j v_{ij}^* A_{jk}^* = \lambda_i v_{ik}^*$$

Hermitikus operátor sajátértékei valósak

Tudjak a skalárszorzat tulajdonságaiból, hogy $\langle f|H|g\rangle = \langle H^+f|g\rangle = \langle g|H^+f\rangle^*$, valamint $H = H^+$. Alkalmazzuk ezt az összefüggést a sajátállapotokra:

$$\begin{aligned}\langle f_i|H|f_i\rangle &= \lambda_i\langle f_i|f_i\rangle \\ \langle f_i|H^+|f_i\rangle &= \langle f_i|H|f_i\rangle = (\lambda_i\langle f_i|f_i\rangle)^*\end{aligned}$$

Vagyis $\lambda_i\langle f_i|f_i\rangle = \lambda_i^*\langle f_i|f_i\rangle^*$. Miután $\langle f_i|f_i\rangle = \langle f_i|f_i\rangle^*$, $\lambda_i = \lambda_i^*$, tehát a Hermitikus operátor sajátértéke valós.

$$\mathbf{u}\cdot\mathbf{H}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}\cdot\mathbf{u} = \sum_{ij} u_i^* H_{ij} u_j = \lambda\sum_i u_i^* u_i.$$

Komplex konjugáljuk az egyenletet: $\sum_{ij} u_i H_{ij}^* u_j^* = \lambda^*\sum_i u_i^* u_i$. Miután $\mathbf{H}$ Hermitikus, $H_{ij} = H_{ji}^*$ az előző egyenletet át1írhatjuk a következő alakba: $\sum_{ij} u_i H_{ji} u_j^* = \lambda\sum_i u_i^* u_i = \lambda^*\sum_i u_i^* u_i$, amelyből szintén $\lambda = \lambda^*$ következik.

Hermitikus operátor sajátállapotai ortonormáltak

Legyen $|f_i\rangle$ és $|f_j\rangle$ két különböző λ_i és λ_j sajátértékhez tartoző sajátállapot: $H|f_i\rangle = \lambda_i|f_i\rangle$, $H|f_j\rangle = \lambda_j|f_j\rangle$. Egyrészt $\langle f_j|H|f_i\rangle = \lambda_i\langle f_j|f_i\rangle$, másrészt $\langle f_j|H|f_i\rangle = \langle Hf_j|f_i\rangle = \lambda_j\langle f_j|f_i\rangle$ vagyis $\lambda_i\langle f_j|f_i\rangle = \lambda_j\langle f_j|f_i\rangle$, amely egyenlőség különböző sajátértékek esetén csak $\langle f_j|f_i\rangle = 0$ fenáálásakor teljesül.

$\mathbf{H}\mathbf{u} = \lambda_1\mathbf{u}$, $\mathbf{H}\mathbf{v} = \lambda_2\mathbf{v}$

$$\begin{aligned}\sum_{ij} v_i^* H_{ij} u_j &= \lambda_1\sum_i v_i^* u_i \\ \sum_{ij} v_i^* H_{ij} u_j &= \sum_{ij}(v_i H_{ji})^* u_j = \lambda_2\sum_i v_i^* u_i\ ,\end{aligned}$$

tehát $\lambda_1\mathbf{v}\mathbf{u} = \lambda_2\mathbf{v}\mathbf{u}$, ahonnan $\mathbf{v}\mathbf{u} = 0$ következik.

A kvantummechanika axiomái

1. Egy rendszer állapotát a $\mathcal{H}$ Hilbert tér egy eleme jellemzi.

2. A dinamikai mennyiségeket (A) ezen a H téren ható lineáris Hermitikus operátorokkal ($\hat{A}$) reprezentáljuk. Dinamikai mennyiségnek a koordinátát, az impulzust, illetve az ezekkel kifejezhető mennyiségeket nevezzük. A reprezentációnak olyannak kell lennie, hogy (a klasszikus mechanikához hasonlóan) az impulzus a téreltolás, az impulzus momentum a forgatás, az energia pedig az időeltolás generátora legyen.

3. Ha a rendszer a $|\psi\rangle$ állapotban van, annak a valószínűsége, hogy egy másik $|\varphi\rangle$ állapotban találjuk a két állapot skalárszorzatának a négyzete lesz: $p = |\langle\psi|\varphi\rangle|^2$. Annak a valószínűsége, hogy egy A mérhető mennyiséget, amelynek sajátértékei és sajátállapotai a_k és $|k\rangle$, egy $|\psi\rangle$-vel jellemzett állapotban a_k-nak mérünk $p = |\langle k|\varphi\rangle|^2$. A mérés után a rendszer a $|k\rangle$ állapotba kerül.

4. A rendszer időfejlődése sorám megőrzi az állapot normáját, vagyis unitér.

$$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

1 Impulzus operátor

Infinitezimális eltolás operátora:

$$f(x+\Delta x) = f(x) + \Delta x\frac{\partial}{\partial x}f(x) = (1 + \underbrace{\Delta x\frac{\partial}{\partial x}}_{\substack{\text{eltolás}\\ \text{generátora}}})f(x)$$

Egy eltolás vagy forgatás generátorának azt az infinitezimálisan kicsiny távolsággal, vagy szöggel való műveletet nevezzük, amellyel tetszőleges eltolás vagy forgatás felépíthető, annik ismétlésével. Az előzőekben láttuk, hogy a deriválás nem Hermitikus operáció ezért válasszuk az impulzusnak

$$p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

műveletet, amely már Hermitikus lesz. A $\hbar$ állandó biztosítja a megfelelő mértékegységet. Az impulzus operátornak 3D-ben három komponense lesz:

$$p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \qquad p_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \qquad p_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$$

Az impulzus operátor segítségével az infinitezimális eltolás operátorát a következőképpen írhatjuk fel:

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

2 Operátor transzformációja

Tekintsünk egy A lineáris operátort, amely a H Hilbert téren hat. Legyn U egy unitér transzformáció. (Gondoljunk pl. egy forgatásra.) A tér egy elemének elforgatotját az $|f'\rangle = U|f\rangle$ transzformácóval kapjuk. A' legyen A transzformáltja. Ekkor $A'|f'\rangle = U(A|f\rangle)$ vagyis $A'U|f\rangle = UA|f\rangle$. Egy unitér transzformációnak mindíg létezik inverze. Szúrjunk be egy $U^{-1}U$ egységoperátort az előző képletbe:

$$A'U|f\rangle = UAU^{-1}U|f\rangle \ .$$

Ezek szerint $A' = UAU^{-1}$.

Legyen az U operátor az infinitezimális eltolás operátora $U = 1 + \frac{i}{\hbar}\Delta xp$. Δx-ben első rendben ennek az inverze $U = 1 - \frac{i}{\hbar}\Delta xp$. Az x helyoperátor eltoltja nyilván $x + \Delta x$ lesz:

$$UxU^{-1} = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\Delta xp\right) x \left(1 - \frac{i}{\hbar}\Delta xp\right) = x + \frac{i}{\hbar}\Delta x(px - xp) = x + \Delta x \ ,$$

vagyis

$$px - xp = \frac{\hbar}{i} \ .$$

Az $px - xp$ kifejezést az p és x operátor kommutátorának nevezzük és az $px - xp = [p, x]$ jelölést használjuk rá.