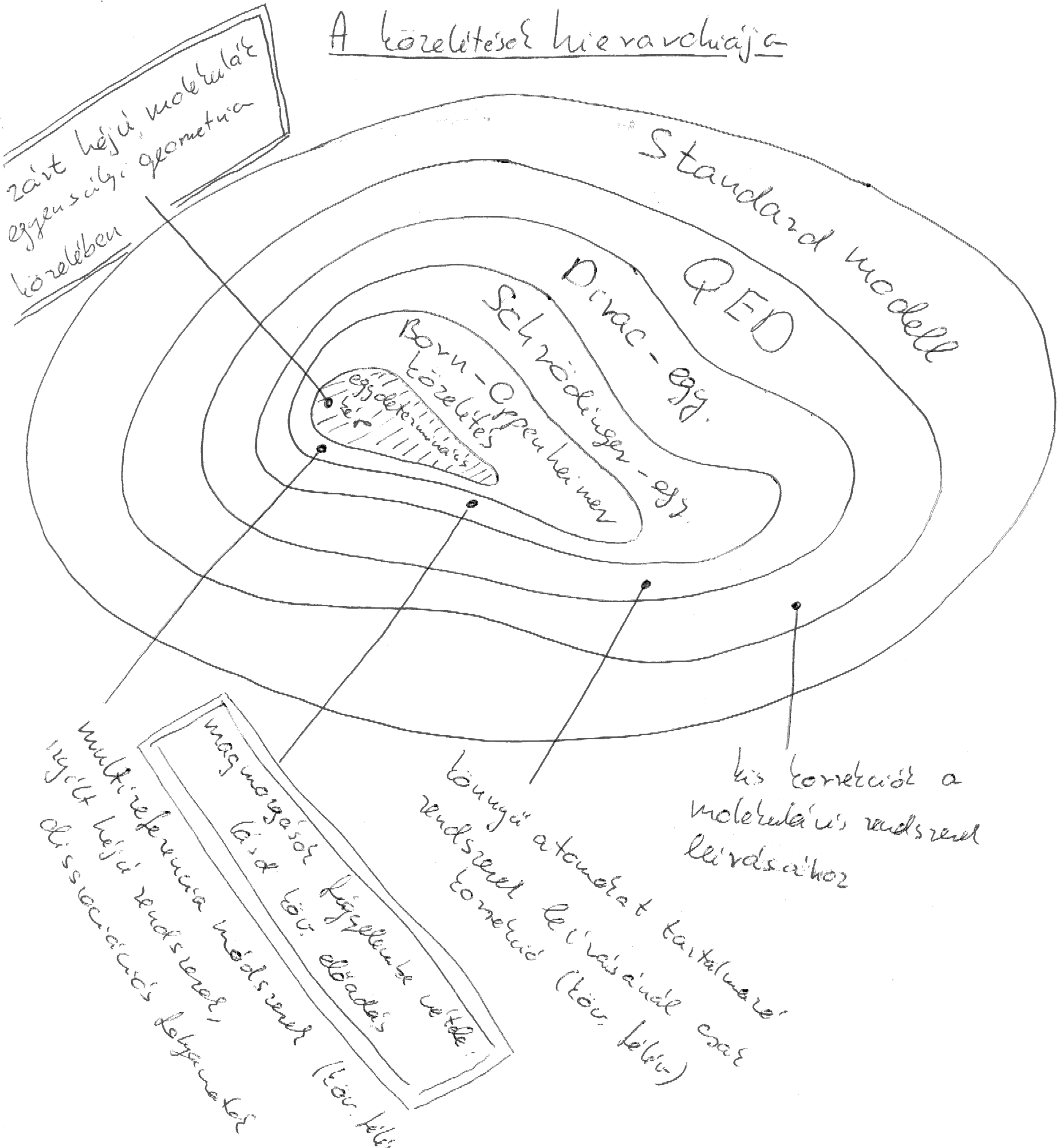
Bevezetés

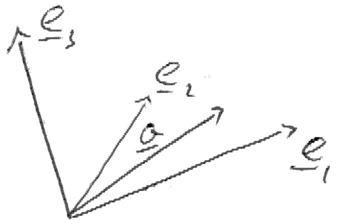
- A kvantummechanika alapfogalmainak elsajátítása a tárgy megértésének előfeltétele.
- Javasolt a Marx könyv „A Fizikai mennyiség" című fejezetének az ismerete.

A közelítések hierarchiája



– Vektorterek, bra-ket jelölés

- vektortér



$\underline{a} = a_1 \underline{e}_1 + a_2 \underline{e}_2 + a_3 \underline{e}_3$

$\underline{e}_i \cdot \underline{e}_j = \delta_{ij}$

$\left(\delta_{ij} = \begin{cases} 1, \text{ ha } i \\ 0, \text{ ha } i \end{cases} \right.$

$$\underline{a} = a_1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_3 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

~ Dirac-féle bra-ket jelölés: $|a\rangle = \sum_{i=1}^{3} a_i |e_i\rangle$

– Skalárszorzat: $\underline{a} \cdot \underline{b} = \sum_{i=1}^{3} a_i^* b_i$ ~ komplex vektorok

$$= (a_1^* \; a_2^* \; a_3^*) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \langle a | b \rangle$$

– vektorok adjungáltja: $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}^+ = (a_1^* \; a_2^* \; a_3^*)$

– adjungált vektor bra-ket jelölésben: $|a\rangle^+ = \langle a|$

– Az adjungált vektorok lin. funkcionálok a vektortér felett: $\langle b| : V \longrightarrow \mathbb{C}$, $\langle b|a\rangle$ ~ komplex szám!

- n-dimenziós absztrakt vektorterek:

Egy V halmaz elemei között értelmezve van egy összeadás $\oplus$ és a komplex számokkal való szorzás $\circledast$ a köv. tulajdonságokkal:

$\oplus$

1. $\underline{v} \in V$ és $\underline{u} \in V \Rightarrow \underline{u} + \underline{v} = \underline{v} + \underline{u} \in V$
2. $\underline{u}, \underline{v}, \underline{w} \in V \Rightarrow (\underline{u} + \underline{v}) + \underline{w} = \underline{u} + (\underline{v} + \underline{w})$
3. létezik olyan $\underline{0} \in V$, $\forall \underline{v} \in V$-re $\underline{v} + \underline{0} = \underline{v}$
4. $\forall \underline{v} \in V$-re létezik olyan $\underline{w}$: $\underline{v} + \underline{w} = 0$ $(\underline{w} = -\underline{v})$

$\circledast$

1. $\underline{u}, \underline{v} \in V$, $\lambda \in \mathbb{C}$, $\lambda(\underline{u} + \underline{v}) = \lambda\underline{u} +$
2. $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$, $(\lambda + \mu) \cdot \underline{v} = \lambda \cdot \underline{v} + \mu \cdot \underline{v}$
3. $\lambda \cdot (\mu \underline{v}) = (\lambda \cdot \mu) \cdot \underline{v}$
4. $1 \cdot \underline{v} = \underline{v}$ $\forall \underline{v}$-re

– A kvantummechanikai leírás (Geszti, Landau III) ③

- A fizikai állapotokat egy vektortér (pontosabban Hilbert-tér) elemeivel reprezentáljuk.

  ↳ vektortér + skalárszorzat:

$$\langle x|x\rangle \geq 0 \qquad (\text{norma: } \|x\| = \sqrt{\langle x|x\rangle})$$
$$\langle x|x\rangle = 0 \Rightarrow x = 0$$
$$\langle x|y\rangle = \langle y|x\rangle^*$$
$$\langle x|\alpha y + \beta z\rangle = \alpha\langle x|y\rangle + \beta\langle x|z\rangle$$

- A fizikai mennyiségeket a Hilbert-tér felett értelmezett hermitikus (önadjungált) op.-ok reprezentálják. Ezen operátorok sajátértékei az adott fiz. mennyiség lehetséges értékei.

- Formalizmus

  – a vektortér elemei: $|\Phi_1\rangle, |\Phi_2\rangle, \ldots$ „ket" vektorok

  pl.: $\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ \vdots \\ \pi \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 9 \\ \sqrt{7} \\ \vdots \\ i \end{pmatrix}, \ldots$

  – ezek adjungált elemei: $\langle\Phi_1|, \langle\Phi_2|, \ldots$ „bra" vektorok

  pl.: $(1, 4, \ldots, \pi), (9, \sqrt{7}, \ldots, -i)$

  – skalárszorzat: $\langle\Phi_1|\Phi_2\rangle = \langle\Phi_2|\Phi_1\rangle^*$

  pl.: $$(1, 4, \ldots, \pi)\begin{pmatrix} 9 \\ \sqrt{7} \\ \vdots \\ i \end{pmatrix} = \left[(9, \sqrt{7}, \ldots, -i)\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ \vdots \\ \pi \end{pmatrix}\right]^*$$

- lineáris op.-ok hatása: $$\hat{O}(\alpha|\Phi_1\rangle + \beta|\Phi_2\rangle) = \alpha\underbrace{\hat{O}|\Phi_1\rangle}_{\Psi_1} + \beta\underbrace{\hat{O}|\Phi_2\rangle}_{\Psi_2} = \alpha\Psi_1 + \beta\Psi_2$$

- adjungált / önadjungált operátorok

$$\langle \Phi_1 | \hat{O} | \Phi_2 \rangle \underset{\text{def.}}{=} \langle \hat{O}^+ \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = \langle \Phi_2 | \hat{O}^+ \Phi_1 \rangle^* = \langle \Phi_2 | \hat{O}^+ | \Phi_1 \rangle^*$$

ha $\hat{O}^+ = \hat{O}$, akkor $\hat{O}$ önadjungált

- Az önadjungált operátorok sajátértékei valós számok, sajátvektorai ortonormált rendszert alkotnak

$$\hat{O} | \varphi_i \rangle = \lambda_i | \varphi_i \rangle, \quad \lambda_i^* = \lambda_i$$

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \forall i,j\text{-re}$$

$$\lambda_i = \langle \varphi_i | \hat{O} | \varphi_i \rangle = \langle \hat{O}^+ \varphi_i | \varphi_i \rangle \overset{\hat{O}^+ = \hat{O}}{=} \langle \hat{O} \varphi_i | \varphi_i \rangle = \langle \varphi_i | \hat{O} | \varphi_i \rangle^* = \lambda_i^*$$

$$\langle \varphi_i | \hat{O} | \varphi_j \rangle = \lambda_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle =$$

$$\langle \hat{O} \varphi_i | \varphi_j \rangle = \langle \varphi_j | \hat{O} \varphi_i \rangle^* = \lambda_i^* \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle^*$$

$$= \lambda_i \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle \Rightarrow (\lambda_i - \lambda_j) \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = 0, \text{ ha}$$

$$\lambda_i \neq \lambda_j \Rightarrow \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = 0$$

- A hermitikus op-ok spektrális alakja

$$\hat{O} = \sum_i \lambda_i | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i |$$

megj.: $\forall$ normál op. felbontható spektrális alakban. Normál op.: $\hat{A}^+ \hat{A} = \hat{A} \hat{A}^+$

$$\hat{O} | \varphi_j \rangle = \sum_i \lambda_i | \varphi_i \rangle \underbrace{\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle}_{\delta_{ij}} = \lambda_j | \varphi_j \rangle$$

Ha a φ_j, $j = 1, 2, \ldots$ bázis teljes, akkor tetszőleges Φ eleme a térnek felbontható mint

$$\Phi = \sum_j c_j \varphi_j$$

$$\hat{O} \Phi = \hat{O} \sum_j c_j \varphi_j = \sum_j c_j \lambda_j \varphi_j$$

- A teljesség feltétele: $\hat{I} = \sum_i | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i |$ ~ identitás op.

$$\hat{I} \Phi = \Phi \quad \forall \Phi\text{-re}$$

• A normálopelátorokra vonatkozó kiegészítés

$$\hat T \hat T^+ = \hat T^+ \hat T$$

$$\hat T|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle \Longrightarrow \hat T^+|\varphi_i\rangle = \lambda_i^*|\varphi_i\rangle$$

$$\|\hat T|\varphi_i\rangle\|^2 = \langle \hat T\varphi_i|\hat T\varphi_i\rangle = \langle\varphi_i|\hat T^+\hat T\varphi_i\rangle$$

$$= \langle\varphi_i|\hat T\hat T^+\varphi_i\rangle = \langle\hat T^+\varphi_i|\hat T^+\varphi_i\rangle = \|\hat T|\varphi_i\rangle\|^2$$

$$\hat T|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle$$

$$\underbrace{(\hat T - \lambda_i)}_{}|\varphi_i\rangle = 0$$

ha $\hat T$ normálop., akkor ez is az!

$$\Longleftrightarrow \|(\hat T-\lambda_i)|\varphi_i\rangle\|^2 = \|(\hat T^+ - \lambda_i^*)|\varphi_i\rangle\|^2$$

$\underbrace{\text{0 a normája}}$ $\Rightarrow (\hat T^+ - \lambda_i^*)|\varphi_i\rangle = 0$ q.e.d.

A normálop.-ok különböző sé.-ekhez tartozó sajátvektorai ortogonálisak

$$\lambda_i^*\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \langle T\varphi_i|\varphi_j\rangle = \langle\varphi_i|T^+\varphi_j\rangle$$

$= \lambda_j^*\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle$, ha $\lambda_i\neq\lambda_j \Rightarrow \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle=0$

(Mi van, ha $\lambda_i=\lambda_j$?)

—o—

• Operátorszorzatok adjungáltja / inverze

$(\hat A\hat B)^+ = B^+A^+$ ill. $(\hat A\hat B)^{-1} = \hat B^{-1}\hat A^{-1}$

$$[\hat A\hat A^{-1} = \hat A^{-1}\hat A = \hat I]$$

- Operátor fv-ek

$$f(x) = f(0) + \frac{1}{1!} f'(0) \cdot x + \frac{1}{2!} f''(0) x^2 + \frac{1}{3!} f^{(3)}(0) x^3 + \ldots$$

Az op. fv-eket a Taylor-sor segítségével értelmezzük:

$$f(\hat{A}) = f(0) + \frac{1}{1!} f'(0) \cdot \hat{A} + \frac{1}{2!} f''(0) \hat{A}^2 + \frac{1}{3!} f^{(3)}(0) \hat{A}^3 + \ldots$$

tfh. $\hat{A} = \sum_i \lambda_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \Rightarrow \hat{A}^2 = \sum_i \lambda_i^2 |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$

$$f(\hat{A}) = \sum_n f^{(n)}(0) \sum_i \lambda_i^n |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = \sum_i \underbrace{\sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) \lambda_i^n}_{f(\lambda_i)} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

$$= \sum_i f(\lambda_i) |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

- pl.: $\hat{U} = e^{\hat{x}} = 1 + \hat{x} + \frac{1}{2!} x^2 + \ldots$

ha $\hat{x}$ antihermitikus, azaz $\hat{x}^+ = -\hat{x}$, akkor

$\hat{U}$ unitér: $\hat{U}^+ = 1 + \hat{x}^+ + \frac{1}{2} \hat{x}^{+2} + \ldots = e^{\hat{x}^+} = e^{-\hat{x}}$

$e^{\hat{x}} e^{-\hat{x}} = \hat{U}\hat{U}^+ = \hat{I}$ | megj.: $\hat{U}|\varphi_i\rangle = \lambda_i |\varphi_i\rangle \Rightarrow \underbrace{\hat{U}^+\hat{U}}_{\hat{I}}|\varphi_i\rangle = |\lambda_i|^2 |\varphi_i\rangle$ $\Rightarrow |\lambda_i|^2 = 1$

- Kommutáló hermitikus operátoroknak van közös sajátfv. rendszere

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$; $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

tfh. a mátrixokat az $\hat{A}$ sajátbázisán írjuk fel!

$$\langle\varphi_k|\hat{A}|\varphi_j\rangle = \lambda_j \delta_{jk} = A_{kj}$$

$$\langle\varphi_k|\hat{B}|\varphi_j\rangle = B_{kj}$$

$$0 = \langle\varphi_k|[\hat{A}, \hat{B}]|\varphi_m\rangle = [\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}]_{km} = (\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{B}})_{km} - (\underline{\underline{B}}\,\underline{\underline{A}})_{km} = \sum_e A_{ke} B_{em} - \sum_e B_{ke} A_{em}$$

$$= \sum_e \lambda_k \delta_{ke} B_{em} - \sum_e B_{ke} \delta_{em} \lambda_m = \lambda_k B_{km} - \lambda_m B_{km} = 0,$$

ha $k \neq m$ és $\lambda_k \neq \lambda_m \Rightarrow B_{km} = 0$, azaz szintén diagonális!

- Egy ortonormált bázis segítségével az op-ok mátrixokkal, az állapotok vektorokkal reprezentálhatók

$$M_{ij} = \langle \varphi_i | \hat M | \varphi_j \rangle \qquad \hat M |v\rangle = |u\rangle$$

$$v_i = \langle \varphi_i | v \rangle =$$

$$\langle \varphi_i | \sum_j v_j |\varphi_j\rangle = v_i$$

$$\hat M \longrightarrow \underline{\underline{M}}$$

$$|v\rangle \longrightarrow \underline{v}$$

$$\hat M \sum_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|v\rangle = |u\rangle$$

$$\langle\varphi_i| \,/$$

$$\sum_j \langle \varphi_i|\hat M|\varphi_j\rangle v_j = u_i$$

$$\sum_j M_{ij} v_j = u_i \Rightarrow \underline{\underline{M}}\,\underline{v} = \underline{u}$$

- A teljességi relációban megjelenő $|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ tag projektor, vetít a $|\varphi_i\rangle$ állapotra.

$$\hat P_i \phi = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \sum_j v_j |\varphi_j\rangle = v_i|\varphi_i\rangle$$

$$\phi = \sum_j v_j|\varphi_j\rangle$$

$\hat P_i \hat P_i = \hat P_i \Rightarrow$ a projektorok idempotensek („idem" ~ u.a.)

$$\sum_{i\in \text{altér}} \hat P_i = \hat P_{\text{altér}}$$

megj.: a projektorok is normál op-ok

Ha φ_i $(i=1,\dots)$ ortonormált bázis és φ_i' $(i=1,\dots)$ szintén az, akkor az $\hat U = \sum_i |\varphi_i'\rangle\langle\varphi_i|$ op a φ_i bázist a φ_i'-be forgatja.

$\hat U|\varphi_k\rangle = |\varphi_k'\rangle$, $\forall k$-ra.

megj.: az unitér op-ok is normál operátorok

$$\hat U \hat U^+ = \hat I, \quad \hat U^+\hat U = \hat I, \quad \hat U^{-1} = \hat U^+$$

$$\left(\hat A^{-1}\hat A = \hat I \quad \text{ill.} \quad (\hat A\hat B)^{-1} = \hat B^{-1}\hat A^{-1}\right)$$

$$\hat U^+ = \sum_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j'|$$

$$\hat U^+ \hat U = \sum_{i,j} |\varphi_j\rangle \underbrace{\langle\varphi_j'|\varphi_i'\rangle}_{\delta_{ij}} \langle\varphi_i| = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = \hat I$$

Az unitér transzformáció érintetlenül hagyja a skalárszorzatot: $\langle\varphi|\eta\rangle = \langle\varphi|\hat I|\eta\rangle =$ $\langle\varphi|\hat U^+\hat U|\eta\rangle = \langle\varphi'|\eta'\rangle$