Kvantummechanika A – gyakorlat

2. gyakorlat

Hilbert-tér bevezető, Dirac-jelölés és a Bohr–Sommerfeld-kvantálás

Hilbert-tér bevezető

Az előző heti matematikai bevezető folytatásaként röviden és tömören bevezetjük a Hilbert-tér fogalmát, és hangsúlyozzuk az elkövetkező számolásokhoz szükséges részleteit.

A Hilbert-tér

A Hilbert-tér egy **valós vagy komplex vektortér**, amin értelmezünk egy **skalárszorzat**ot. A skalárszorzat segítségével normát tudunk definiálni (a skalárszorzat *indukálja* a normát), amire nézve a tér teljes metrikus teret vagy normált teret alkot. Pl. a már jól ismert háromdimenziós euklideszi tér egy véges dimenziós és valós Hilbert-tér.

A skalárszorzás egy komplex Hilbert-tér esetén két db a Hilbert-térből vett vektorhoz egy komplex számot rendel hozzá, azaz ha $\mathcal{H}$ egy Hilbert-tér, akkor a skalárszorzás

$$\mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C} \ : \quad \langle \alpha | \beta \rangle = c \ , \qquad \text{ahol } \alpha, \beta \in \mathcal{H} \text{ és } c \in \mathbb{C} \ .$$

A skalárszorzatra teljesül, hogy ($\alpha, \beta, \gamma \in \mathcal{H}$, $a, b, c \in \mathbb{C}$)

1. **konjugált szimmetrikus**:
$$\langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* \ ,$$
2. **Anti-lineráis** az első, míg **lineáris** a második komponensében:
$$\langle a\alpha + b\beta | \gamma \rangle = a^* \langle \alpha | \gamma \rangle + b^* \langle \beta | \gamma \rangle \ ,$$
$$\langle \alpha | b\beta + c\gamma \rangle = b \langle \alpha | \beta \rangle + c \langle \alpha | \gamma \rangle \ ,$$
3. **Nem-nemgatív** (egy vektor önmagával vett skalárszorzata esetén):
$$\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0 \ ,$$
és $\langle \alpha | \alpha \rangle = 0$ csak akkor, ha $|\alpha\rangle = |0\rangle$ (nem degenerált a norma, ld. következő bekezdés).

A **norma** a skalárszorzat segítségével definiálható mint

$$\mathcal{H} \to \mathbb{R} \ : \quad ||\alpha||^2 = \langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0 \ .$$

A norma segítségével teljesülni fog az alábbi **háromszög-egyenlőtlenség** is (Cauchy–Schwartz-egyenlőtlenség következménye; ld. az előadást pár hét múlva):

$$||\alpha + \beta|| \leq ||\alpha|| + ||\beta|| \ .$$

Fontos példa: négyzetesen integrálható függvények Hilbert-tere

Legyen $\mathcal{L}_2 \ : \ \{f \mid \int_\Omega \mathrm{d}x \ |f(x)|^2 < \infty\}$ a **négyzetesen integrálható függvények** tere, melyek Ω (nem *nullmértékű*) tartományból képeznek a komplex számokra: $f \ : \ \Omega \to \mathbb{C}$. Ekkor a skalárszorzat

$$\langle f|g\rangle = \int_\Omega \mathrm{d}x \ f^*(x)g(x) \ .$$

Ezen látszik (aki nem hiszi, járjon utána), hogy konjugált szimmetrikus, illetve valóban első komponensében anit-lineáris, míg más odik komponensében lineáris. Mivel Ω nem *nullmértékű*, így csak akkor lehet $||f|| = 0$, ha $|f(x)|^2 = 0$ (azaz, ha $f(x) = 0$). A teljesség bizonyításához ld. a Riesz–Fisher-tételt. Négyzetesen integrálható függvényeket sokat fogunk használni pl. hullámfüggvényeket tartalmazó számolásokban.

Ortogonalitás

A Hilbert-téren is tudunk (még végtelen dimenziós komplex tér esetén is) egymásra ortogonális (merőleges) vektorokról beszélni. Legyen $\alpha, \beta \in \mathcal{H}$. Ekkor

1. α és β ortogonális egymásra, ha $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$,
2. α normált, ha $||\alpha|| = 1$,
3. egy $\{\alpha_i\}$ halmaz ortonormált rendszert alkot, ha $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}$,
4. egy $\{\phi_i\}$ halmaz **ortonormált bázis**t alkot $\mathcal{H}$-n, ha $\{\phi_i\}$ ortonormált rendszer alkot (ld. előző pont) és teljes, azaz

   $$\sum_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k| = \mathbf{1} \ .$$

   Ekkor egy tetszőleges $\alpha \in \mathcal{H}$ felírható mint

   $$|\alpha\rangle = \sum_k a_k|\phi_k\rangle \ .$$

   Az a_k együtthatókról meg lehet mutatni, hogy $a_k = \langle\phi_k|\alpha\rangle$ (mondjuk gyakorlásnak ki lehet ezt számolni).

Lineáris altér

Egy $\mathcal{U}$ tér $\mathcal{H}$ térnek lineáris altere ($\mathcal{U} \leq \mathcal{H}$), ha

$$\forall u_1, u_2 \in \mathcal{U} \ , c \in \mathbb{C} \ : \ u_1 + u_2 \in \mathcal{U} \text{ és } cu_1 \in \mathcal{U} \ .$$

Egy zárt és lineáris altere egy Hilbert-térnek szintén Hilbert-tér.

Dirac-jelölés

Láttuk, hogy a Hilbert-tér elemeit jelöltük "α"-val és "$|\alpha\rangle$"-val egyaránt. Az utóbbi az ún. Dirac-jelölés, mely számos esetben lényegesen megkönnyíti a számolásokat. Használata nem vezet más eredményre, de sok esetben egyszerűbb lesz a formalizmus általa (mint pl. az indexes írás esetén a "vektoros-mátrixos" teljes alak használata helyett).

Formálisan azt mondhatjuk, hogy ha $\mathcal{H}$ egy Hilbert-tér, akkor vehetjük az összes olyan lineáris operátor halmazát, mely $\mathcal{H} \to \mathbb{C}$ leképezéshez vezet. Ezt $\mathcal{H}$ duálisának nevezzük, jele gyakran $\mathcal{H}^*$. A Dirac-jelölésben $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$, míg $\langle\alpha| \in \mathcal{H}^*$, az utóbbit szokás *bra*-vektornak, míg az előbbit *ket*-vektornak hívni. Ezáltal skalárszorzáskor (*bra-ket*; angolul zárójel [*bracket*]) a duális tér eleme hat az eredeti Hilbert-tér elemére: $\langle\alpha|\beta\rangle \in \mathbb{C}$, ami egy komplex számot eredményez.

Lineáris operátorok

Egy Hilbert-téren ható lineáris operátor a Hilbert-térből a Hilbert-térre képez: $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$. Legyen $\hat{A}, \hat{B}$ lineáris operátorok, $\alpha, \beta \in \mathcal{H}$ és $a, b \in \mathbb{C}$:

1. **linearitás**: $\hat{A}\big(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle\big) = a\hat{A}|\alpha\rangle + b\hat{A}|\beta\rangle$,

2. operátorok **összeg**e: $(\hat{A} + \hat{B})|\alpha\rangle = \hat{A}|\alpha\rangle + \hat{B}|\alpha\rangle$.

A lineáris operátorok általánosan nem kommutálnak egymással, azaz $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Létezik $\mathbf{1}$ egységoperátor, melyre $\mathbf{1}|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$, és egy $\{\phi_i\}$ ortonormált rendszer által kifeszített altéren egy $\hat{A}$ operátor reprezentációja:

$$\hat{A} = \sum_{i,j} a_{ij} |\phi_i\rangle\langle\phi_j| \ ,$$

ahol $a_{ij} \in \mathbb{C}$.

A lineáris operátorok közül gyakran előfordulnak a fizikában az alábbi speciális esetek:

1. **adjungált operátor**: ha van egy $\hat{A} \ : \ \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ lineáris operátorunk, akkor ennek adjungáltja a $\hat{A}^\dagger \ : \ \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$ operátor lesz úgy, hogy $(\forall\alpha \in \mathcal{H}_2, \forall\beta \in \mathcal{H}_1)$:

$$\langle\alpha|\hat{A}\beta\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\alpha|\beta\rangle \ ,$$

2. **hermitikus** (önadjungált) operátor: $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$,

3. **projektor** operátor: $\hat{P} = \hat{P}^2 = \hat{P}^\dagger$,

4. **unitér** operátor: $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$, azaz $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \mathbf{1}$,

5. **normális** operátor: $[\hat{N}, \hat{N}^\dagger] = 0$, azaz minden hermitikus operátor normális,

6. **pozítv (szemidefinit)** operátor: $\langle\alpha|\hat{O}\alpha\rangle > 0$ (szemidefinit ha: $\langle\alpha|\hat{O}\alpha\rangle \geq 0$),

7. **statisztikus** operátor: $\hat{\varrho}$ operátor statisztikus, ha pozitív szemidefinit és $\mathrm{Tr}\hat{\varrho} = 1$.

Dirac-jelölés – feladatok

1. feladat

Lássuk be, hogy ha egy operátor statisztikus, akkor felírható az alábbi alakban:

$$\hat{\varrho} = \sum_k \lambda_k |\alpha_k\rangle\langle\alpha_k| \ ,$$

ahol $\lambda_k \geq 0$ ($\forall k$-ra) és $\sum_k \lambda_k = 1$!

Egy statisztikus operátor pozitív szemidefinit, illetve teljesül rá, hogy $\mathrm{Tr}\hat{\varrho} = 1$. Kezdjük az előbbi tulajdonsággal. Egy operátor pozitív szemidefinit, ha $\langle\beta|\hat{\varrho}\beta\rangle \geq 0$, ahol $\beta \in \mathcal{H}$. Helyettesítsünk be a fenti képlettel:

$$\langle\beta|\hat{\varrho}\beta\rangle = \left\langle \beta \middle| \sum_k \lambda_k |\alpha_k\rangle\langle\alpha_k| \middle| \beta \right\rangle = \sum_k \lambda_k \langle\beta|\alpha_k\rangle\langle\alpha_k|\beta\rangle = \sum_k \lambda_k |\langle\beta|\alpha_k\rangle|^2 \ ,$$

ahol kiemeltük az összegzést és a λ_k szorzókat a skalárszorzatból, valamint kihasználtuk, hogy a skalárszorzat konjugált szimmetrikus. Mivel $\lambda_k \geq 0$ és egy komplex szám abszolútértékének négyzete is pozitív, azaz csak pozitív (vagy 0) számokat adunk össze, így beláttuk, hogy $\langle\beta|\hat{\varrho}\beta\rangle \geq 0$. Ebben az alakban $\hat{\varrho}$ valóban pozitív szemidefinit.

A $\mathrm{Tr}\hat{\varrho} = 1$ tulajdonság megmutatásához helyettesítsünk be a operátor nyomának definíciójába:

$$\mathrm{Tr}\hat{\varrho} = \sum_i \left\langle \phi_i \middle| \sum_k \lambda_k |\alpha_k\rangle\langle\alpha_k| \middle| \phi_i \right\rangle \ ,$$

ahol $\{\phi_i\}$ legyen valamilyen ortonormált bázis. Kiemelve újra a k-ra való összegzést és a λ_k szorzókat:

$$\sum_k \lambda_k \sum_i \langle\phi_i|\alpha_k\rangle\langle\alpha_k|\phi_i\rangle = \sum_k \lambda_k \sum_i \langle\alpha_k|\phi_i\rangle\langle\phi_i|\alpha_k\rangle = \sum_k \lambda_k \left\langle \alpha_k \middle| \underbrace{\sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|}_{\mathbf{1}} \middle| \alpha_k \right\rangle \ .$$

Vegyük észre, hogy megjelent egy teljes rendszer a skalárszorzatban, mely által a képlet egyszerűsödik:

$$\mathrm{Tr}\hat{\varrho} = \sum_k \lambda_k \underbrace{\langle\alpha_k|\alpha_k\rangle}_{1} = \sum_k \lambda_k = 1 \ .$$

Ennélfogva valóban fel lehet írni egy statisztikus operátort a feladatban szereplő alakban.

A gondolatmenet visszafelé is működik. Egy ilyen alakú és az adott tulajdonságokkal bíró operátorról meg lehet mutatni, hogy statisztikus operátor lesz.

Közjáték a 2. házi feladathoz

2. feladat

Lássuk be az alábbi azonosságot!

$$[A, B^n] = n[A, B]B^{n-1} \ ,$$

ahol $n \in \mathbb{Z}^+$ és A, B pedig operátorok (az egyszerűség kedvéért ebben a feladatban a "kalap" jelölést elhagyjuk). Ezen felül tegyük fel, hogy $\big[A, [A, B]\big] = \big[B, [A, B]\big] = 0$.

Induljunk ki az azonosság bal oldalából, és emeljünk ki B^n-ből B-t:

$$[A, B^n] = [A, BB^{n-1}] = [A, B]B^{n-1} + B[A, B^{n-1}] \ ,$$

ahol felhasználtuk az előző gyakorlaton belátott azonosságot az $[A, BC]$ alakú kommutátorokra. Az első tag, amit kaptunk egy n szorzótól eltekintve már olyan alakú, mint amit szeretnénk. A második tagra ismételjük meg az előbbi lépést: emeljünk ki B-t a B^{n-1}-ből, és bontsuk ki a kommutátort!

$$B[A, B^{n-1}] = B[A, BB^{n-2}] = B[A, B]B^{n-2} + B[A, B^{n-2}] = [A, B]B^{n-1} + B[A, B^{n-2}] \ ,$$

ahol a második egyenlőségjel után kihasználtuk, hogy B kommutál az $[A, B]$ kommutátorral. Az első tag újra olyan alakú lesz, mint amilyen a belátni kívánt azonosságban megjelenik egy n-szorzó erejéig, a második tagot pedig ismételten kibonthatjuk:

$$B[A, B^{n-2}] = \cdots = [A, B]B^{n-1} + B^2[A, B^{n-2}] \ ,$$

és így tovább...

Összefoglalva az eddigieket és összeszedve a tagot:

$$\begin{aligned}
[A, B^n] &= [A, B]B^{n-1} + B[A, B^{n-1}] = 2[A, B]B^{n-1} + B^2[A, B^{n-2}] \\
&= 3[A, B]B^{n-1} + B^3[A, B^{n-3}] = \cdots = (n-1)[A, B]B^{n-1} + B^{n-1}[A, B^{n-(n-1)}] \\
&= n[A, B]B^{n-1} \ .
\end{aligned}$$

Bohr–Sommerfeld-kvantálás

3. feladat

Számítsuk ki az elektron lehetséges energiáit egy hidrogén(szerű)-atomban a Bohr–Sommerfeld-kvantálás segítségével! Legyen az elektron fix körpályán a rögzített atommag körül!

A modellünkben egy $q_e = -e$ elektromos töltésű elektron kering fix R sugarú körpályán egy $q_{\text{mag}} = Ze$ töltésű atommag körül ($Z \in \mathbb{Z}^+$). Az atommag helye rögzített, és töltésének hatására az elektron a jól ismert $V = -Z\alpha/r$ alakú Coulomb-potenciálban mozog, ahol $r = R$ az elektron és az atommag távolsága ($\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0)$).

Először felejtsük el (a gyakorlás kedvéért), hogy az elektron adott sugarú körpályán kering, azaz $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ is változhat. A rendszerünk Lagrange-függvénye:

$$L = K - V = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + \frac{Z\alpha}{r} \ ,$$

ahol m az elektron tömege, és mivel az elektron mozgása síkmozgásnak tekinthető, így elegendő csak az x, y koordinátákkal dolgoznunk. Az $\dot{x}, \dot{y}$ a szokásos módon az idő szerint deriválást jelöli. Célszerű azonban áttérni polárkoordináta-rendszerbe: $(x, y) \to (r, \varphi)$ (az áttérés gyakorlófeladat annak, aki nem emlékszik arra, hogy hogyan kell, vagy nem írta le a gyakorlaton), és ekkor a Lagrange-függvény új alakja:

$$L = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\right) + \frac{Z\alpha}{r} \ .$$

A mozgásegyenleteket megkapjuk az Euler–Lagrange-egyenletek alakjában:

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ ,$$

azaz, ha $q_i = r$:

$$-\frac{Z\alpha}{r^2} + mr\dot{\varphi}^2 = m\ddot{r} \ ,$$

és, ha $q_i = \varphi$:

$$0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(mr^2\dot{\varphi}) = 2mr\dot{r}\dot{\varphi} + mr^2\ddot{\varphi} \ .$$

Most már eszünkbe juthat, hogy az elektron pályája rögzített, azaz $r = R$, ennélfogva $\dot{r} = 0$. Az ezáltal leegyszerűsödött a $q_i = \varphi$ mozgásegyenlet:

$$mR^2\ddot{\varphi} = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \dot{\varphi} = \omega = \text{állandó} \ .$$

Visszahelyettesítve a $q_i = r$ mozgáegyenletbe:

$$-\frac{Z\alpha}{R^2} + mR\omega^2 = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \omega^2 = \frac{Z\alpha}{mR^3} \ .$$

Az (r, φ) koordinátákhoz tartozó konjugált impulzusok:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \begin{cases} mR^2\omega & \text{ha } q_i = \varphi \\ 0 & \text{ha } q_i = r \end{cases}$$

A Bohr–Sommerfeld-kvantálás szerint:

$$\oint\limits_{\text{periódus}} \mathrm{d}q_i \, p_i = n_i h \ ,$$

ahol az integrál a mozgás egy periódusára vonatokzik, $n_i = 1, 2, \ldots$ és $h \approx 6.63 \cdot 10^{-34}$ Js a Planck-állandó. Most csak $p_\varphi \neq 0$, és a rá vonatkozó kvantálási szabály:

$$\int\limits_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \, mR^2\omega = 2\pi mR^2\omega = n_\varphi h \ ,$$

ahol, mivel egy periódusban egy kört járunk be, az integrál φ-ben 0-tól 2π-ig történik. Ez – mivel az integrandus nem függ φ-től – csak egy 2π szorzót fog eredményezni. Ekkor ($\hbar = h/(2\pi)$)

$$\omega^2 = \frac{n_\varphi^2 h^2}{(2\pi)^2 m^2 R^4} = \frac{n_\varphi^2 \hbar^2}{m^2 R^4} \stackrel{!}{=} \frac{Z\alpha}{mR^3} ,$$

ahonnan a keringés sugarára n_φ^2 szerint kvantált eredményt kapunk:

$$R = \frac{n_\varphi^2 \hbar^2}{mZ\alpha} ,$$

ami a $Z = 1$ és $n_\varphi = 1$ esetben a már eladásról ismerős Bohr-sugárt adja: $a_0 = \hbar^2/(m\alpha)$. Az elektron lehetséges energiaszintjei pedig:

$$\boxed{E = K + V = \frac{mR^2\omega^2}{2} - \frac{Z\alpha}{R} = -\frac{mZ^2\alpha^2}{2n_\varphi^2\hbar^2}} .$$

Érdekes módon megkaptuk azt az eredményt, amit majd a félév során az előadáson fogunk kapni a hidrogénatom energiaszintjeire egy lényegesen bonyolultabb számolás végén.