

Kvantummechanika gyorstalpaló

2017. december 13.

1. Bevezetés

A kvantummechanika formalizmusának az alapja a \mathcal{H} komplex Hilbert tér. A kvantummechanikai állapotok a \mathcal{H} Hilbert tér elemei, vektorai.

1.1. Dirac-jelölés

A \mathcal{H} Hilbert tér elemei a $|\psi\rangle$ vektorok. A \mathcal{H}^* duális térben a vektorokat $\langle\phi|$ -vel jelöljük. A vektorok skalárszorzására a következő igaz:

- $\langle\phi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$
- $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$
- $\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle \geq 0$

További azonosságok:

- $(c|\psi\rangle)^* = c^* \langle\psi|$

Ortonormált bázisról beszélünk, ha $\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$

1.1.1. Reprezentáció

Számolások során a Hilbert-tér általában az \mathcal{L}^2 -tér.

$$\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \in \mathcal{L}^2 \iff \|\psi\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty$$

1.2. Kvantumállapot és Born-féle értelmezés

A kvantummechanikában minden állapothoz rendelhető egy $|\psi\rangle$ vektor. Az ilyen állapotok 1-re normált állapotok kell hogy legyenek, vagyis $\|\psi\| = \langle\psi|\psi\rangle = 1$. Abban az esetben ha adott egy $|k\rangle$ bázis, és $|\psi\rangle$ felírható ezen a bázison:

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^n c_k |k\rangle$$

ahol $c_k = \langle k|\psi\rangle$ és ez alapján

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^n \langle k|\psi\rangle |k\rangle$$

Ekkor a normálásból következik, hogy

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{k=0}^n c_k^* \sum_{j=0}^n c_j \langle k|j\rangle = \sum_{k=0}^n |c_k|^2 = 1$$

továbbá

$$\sum_{k=0}^n |k\rangle \langle k| = \hat{1}$$

Fent $|c_k|^2$ annak a valószínűsége, hogy a $|\psi\rangle$ állapotban levő rendszer éppen $|k\rangle$ állapotban található. Ez a valószínűség nem feltétlenül 0, mert a $|\psi\rangle$ egy szuperponált állapot.

Tehát ha egy rendszer a $|a\rangle$ állapotban van preparálva és arra vagyok kíváncsi, hogy mi a valószínűsége annak, hogy $|b\rangle$ állapotban találom, akkor a $p = |\langle b|a\rangle|^2$ értéket kell kiszámolni.

1.3. Fiziaki mennyiségek és operátorok

A \mathcal{H} Hilbert téren értelmezhetők az $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ típusú operátorok. Értelmezhető az \hat{A} operátor hermitikus adjungáltja a következő képpen :

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle$$

Itt \hat{A}^\dagger -ot az \hat{A} hermitikus adjungáltjának nevezzük és igaz, hogy ha

$$|w\rangle = \hat{A}|v\rangle \implies \langle w| = \langle v|\hat{A}^\dagger$$

Definíció. A \hat{H} operátort hermitikusnak nevezzük ha $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$.

Tétel. A kvantummechanikában minden fizikai állapothoz rendelhető egy hermitikus operátor.

Példa. Az impulzus operátora $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, az energia operátora $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$.

Definíció. Egy \hat{U} operátort unitérnek nevezünk, ha $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$.

Példa. Az időfejlődés operátora $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ unitér operátor.

A hermitikus operátorok sajátértékei mindig valósak. Ha egy operátor sajátvektorai ortonormált bázist alkotnak, akkor:

$$\hat{A} = \sum_n a_n |n\rangle \langle n|, \text{ ahol } \hat{A}|n\rangle = a_n |n\rangle$$

Tétel. Egy hermitikus operátor sajátvektorai mindig ortogonálisak.

Illetve, ha egy \hat{A} operátor sajátvektorai ortonormált bázist alkotnak, akkor egy tetszőleges $|\psi\rangle$ vektor kifejezhető ezen a bázison:

$$\hat{A}|n\rangle = a_n |n\rangle, \text{ és } \langle n|m\rangle = \delta_{mn} \implies |\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle \equiv \sum_n c_n |n\rangle$$

Legyen most \hat{A} hermitikus, $|\psi\rangle$ egy állapot, úgy, hogy $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$ és $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$. Ekkor az $\hat{A}|\psi\rangle$ vektor b_m együtthatói az $|n\rangle$ bázison:

$$b_m = \langle m|\hat{A}\psi\rangle = \sum_n \langle m|\hat{A}|n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_n A_{mn}c_n$$

Ezért

$$A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$$

$|\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle|^2$ az minnek a valószínűsége?

1.4. Kommutátorok

Tétel. Az \hat{A} és \hat{B} kommutátora $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

- $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$
- $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$
- $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$
- $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$
- $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$
- $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k$
- $[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = [\hat{S}^2, \hat{S}_i] = [\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$
- $[\hat{L}_i, \hat{S}_j] = 0$
- $[\hat{x}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{x}_k$
- $[\hat{p}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k$
- Ha \hat{A} hermitikus $\implies \hat{A}^\dagger = \hat{A} \implies [\hat{A}^\dagger, \hat{A}] = 0$

2. Harmonikus oszcillátor

3. Impulzusmomentumok

3.1. Pálya-impulzusmomentum

A kvantummechanikai impulzusmomentum operátora $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar(\vec{r} \times \nabla)$.
Gömbi koordinátarendszerben felírva:

- $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$
- $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$
- $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$
- $\hat{L}_+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$
- $\hat{L}_- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$
- $[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_z$
- $\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z$

Az \hat{L} operátor sajátállapotait két kvantumszám határozza meg, l és m_l , a sajátvektorokat ezért $|l, m_l\rangle$ jelöli. A sajátértékek a következők lehetnek: $l \in \{0, 1, 2, \dots\}$, $m_l \in \{-l, \dots, 0, \dots, l\}$.

Ezzel a jelöléssel igazak a következő azonosságok:

- $\hat{L}^2 |l, m_l\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m_l\rangle$
- $\hat{L}_z |l, m_l\rangle = \hbar m_l |l, m_l\rangle$
- $\hat{L}_{\pm} |l, m_l\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)} |l, m_l \pm 1\rangle$
- $\hat{L}_+ |l, m_l = l\rangle = 0$ és $\hat{L}_- |l, m_l = -l\rangle = 0$

Ha $|l, m_l\rangle$ -eket az \mathcal{L}^2 téren akarjuk ábrázolni, akkor:

$$\langle \theta, \varphi | l, m_l \rangle = Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$$

$$\langle l', m'_l | l, m_l \rangle = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi (Y_{l'}^{m'_l})^* Y_l^{m_l} = \delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l}$$

Az $Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$ függvények a [gömbi harmonikusok](#)

3.2. Spin

A spin-operátort \hat{S} jelöli, sajátállapotait két kvantumszám adja meg, s és m_s , úgy, hogy $s \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\}$ és $m_s \in \{-s, \dots, 0, \dots, s\}$

3.2.1. Az $s = \frac{1}{2}$ spin és a Pauli-mátrixok

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

3.3. Teljes impulzusmomentum

3.4. Impulzusmomentumok összeadása és Clebsch–Gordan együtthatók

Az pálya-impulzusmomentum és a spin különböző Hilbert-tér elemei, ezért ha össze akarom adni őket, akkor a Hilbert-terek direkt szorzatát kell képezni. Legyen egy rendszer (pl. H-atom elektronja) ami spinnel és pálya-impulzusmomentummal is rendelkezik. Legyenek a spin sajátállapotok $|s, m_s\rangle$ illetve a pálya-impulzusmomentum sajátállapotok $|l, m_l\rangle$. Ekkor a teljes impulzusmomentum sajátállapotai a két tér elemeinek direkt szorzata:

$$|j, m\rangle = |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle \equiv |l, m_l\rangle |s, m_s\rangle \equiv |l, m_l, s, m_s\rangle$$

Ezen a szorzattéren hat a $\hat{\vec{J}}$ operátor, amit így definiálunk:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

Ez a jelölés pongyola, mert a $\hat{\vec{J}}$ -nek a szorzattéren vagyis $\mathcal{H}_L \otimes \mathcal{H}_S$ -en kell hatnia, ezért korrektül:

$$\hat{J}_k = \hat{L}_k \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{S}_k$$

Ez a következő képpen hat a sajátállapotokra:

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

Szintén be lehet vezetni a léptető operátorokat:

- $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$
- $\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z$
- $\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z$
- $[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_z$
- $[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm \hbar \hat{J}_\pm$
- $\hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$

4. Hidrogén-atom

Megjegyzés. Ha a főkvantumszám n , akkor $l_{max} = n - 1$ vagyis $l \in \{0, 1, \dots, n - 1\}$

5. Perturbációszámítás