Modern fizika alkalmazásai a mérnöki gyakorlatban

A kvantummechanika matematikai alapjai

Irodalom: Geszti Tamás: Kvantummechanika, Typotex

8. előadás

Operátorok I.

Láttuk (tanultuk):

*** Időfüggetlen Schrödinger egyenlet (1D) ***

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V(x)\cdot\psi(x)=E\cdot\psi(x)$$

Klasszikus mechanika

$$\frac{p^2}{2m}+V(x)=E$$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}(x)\right]\cdot\psi(x)=E\cdot\psi(x)$$

Ahol: $\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ és $\hat{x}=x$ •

Ált.: 3D

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r})+V(\vec{r})\cdot\psi(\vec{r})=E\cdot\psi(\vec{r}) \rightarrow \underbrace{\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}(\vec{r})\right]}_{\hat{H}}\cdot\psi(\vec{r})=E\cdot\psi(\vec{r})$$

$$\hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\qquad \hat{p}_y=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\qquad \hat{p}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$$

$\hat{H}$ ← Hamilton operátor

$$\hat{H}\cdot\psi(\vec{r})=E\cdot\psi(\vec{r})$$

$$\hat{p}^2=\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2$$

Operátorok II.

Klasszikus mech.: $A(x,y,z,p_x,p_y,p_z,\ldots)$

$$\hat{A} = A(\hat{x},\hat{y},\hat{z},\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z,\ldots)$$

Perdület: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

$$L_x = yp_z - zp_y \qquad L_y = zp_x - xp_z \qquad L_z = xp_y - yp_x$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \qquad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \qquad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Időfüggő Schrödinger egyenlet:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\cdot\psi(\vec{r})$$

~~$\hat{E}\cdot\psi(\vec{r}) = \hat{H}\cdot\psi(\vec{r})$~~

Ahol: ~~$\hat{E} = -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dt}$~~ és ~~$\hat{t} = t\,\bullet$~~

Várható érték

Láttuk: $P_{\Delta V} = |\psi|^2 \Delta V$

$$\langle x \rangle = x_1 P_1 + x_2 P_2 + x_3 P_3 + \ldots$$

Ahol: $P_1 = |\psi(x_1)|^2 \Delta x$

$P_2 = |\psi(x_2)|^2 \Delta x$

$\vdots$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x \, \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \, \hat{x} \, \psi(x) dx$$

Általánosítás

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \, \hat{A} \, \psi(x) dx$$

Skalárszorzat $\vec{A} = (a_1, a_2, a_3, \ldots)$ és $\vec{B} = (b_1, b_2, b_3, \ldots)$

Láttuk (tanultuk):

$$\vec{A} \bullet \vec{B} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 + \ldots$$

Két fgv. skalárszorzata:

$$\langle u | v \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u^*(x) v(x) dx \longrightarrow \langle u | v \rangle^* = \int_{-\infty}^{+\infty} v^*(x) u(x) dx = \langle v | u \rangle$$

bra ket

Várható érték:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle \xrightarrow{\text{Általánosítás}} \langle u | \hat{A} v \rangle = ?$$

Bázis

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V(x)\cdot\psi(x)=E\cdot\psi(x)$$

$$P=\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 dV=1$$

Keressük a Schrödinger egyenlet megoldását:

$$\hat{H}\cdot\varphi_i(\vec{r})=E_i\cdot\varphi_i(\vec{r})$$

Bázis:

$\varphi_1 \Rightarrow E_1$

$\varphi_2 \Rightarrow E_2$

$\varphi_3 \Rightarrow E_3$

$\hat{H}$ operátor bázisa: $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \ldots$

Önadjungált operátorok

Operátor adjungáltja: $\hat{A}^+$ ⇒ $\langle \hat{A}^+ u | v \rangle = \langle u | \hat{A} v \rangle$

Egy operátor önadjungáltja, ha: $\hat{A} = \hat{A}^+$

Önadjungált operátor sajátértéke valós:

$$a_n = \langle n | \hat{A} n \rangle = \langle \hat{A} n | n \rangle^* = \langle n | \hat{A} n \rangle^* = a_n^*$$

Önadjungált operátor (TON) bázisa:

$$\langle m | \hat{A} n \rangle = a_n \langle m | n \rangle = \langle \hat{A} m | n \rangle = a_m \Rightarrow (a_m - a_n)\langle m | n \rangle = 0$$

Vagyis: $a_m = a_n$ vagy: $\langle m | n \rangle = 0$ így: $\langle m | n \rangle = \delta_{nm}$

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{nm}$$

Vektorok és mátrixok I.

$$\psi(\vec{r}) = \sum_j c_j \psi_j \qquad \langle \psi(\vec{r},t) | \psi(\vec{r},t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$$

$$\langle \psi(\vec{r},t) | \psi(\vec{r},t) \rangle = \sum_{i,j} c_i^* c_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \sum_i |c_i|^2 = 1 \quad \text{és} \quad c_i = \langle \varphi_i | \psi \rangle$$

Mérés: $\psi(\vec{r}) = \sum_j c_j \varphi_j \longrightarrow P_i = |c_i|^2$

$$\hat{A}\psi(\vec{r}) = \sum_j c_j \hat{A}\varphi_j = \sum_j c_j a_j \varphi_j = ?$$

1 mérés $\Longrightarrow P_i = |c_i|^2$ → a_i és φ_i

Sok mérés:
(mérés a sokaságon) $\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A}\psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n$

Vektorok és mátrixok II.

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n \varphi_n = \sum_n c_n |n\rangle$$

$$c_m = \langle m|\psi\rangle$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$$ egységoperátor

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

$$b_m = \sum_n A_{mn} c_n$$

Vektorok és mátrixok III.

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}\,) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}\,) + V(\vec{r}\,)\cdot\psi(\vec{r}\,)$$

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_n c_n(t)\varphi_n = \sum_n c_n(t)\left|n\right\rangle$$

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}) = \hat{H}\psi(\vec{r})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi(\vec{r})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\sum_n c_n\left|n\right\rangle$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_n c_n(t)\varphi_n\right) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\sum_n c_n\left|n\right\rangle \quad \Big/ \left|m\right\rangle\bullet$$

Schrödinger egyenlet

$$\frac{d}{dt}c_m = -\frac{i}{\hbar}\sum_n H_{mn}c_n$$

Kommutátor

$\hat{A}$ és $\hat{B}$ operátorok kommutátora: $\left[\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right]$

$$\left[\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x\right] = ? \longrightarrow \left[\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x\right]\psi(x) = ?$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \quad \text{és} \quad \hat{x} = x\,\bullet$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\big(x\psi(x)\big) - x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\left[\psi(x) + x\psi'(x) - x\psi'(x)\right] = \frac{\hbar}{i}\psi(x)$$

$$\left[\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x\right] = \frac{\hbar}{i}\hat{1}$$

Hasonlóan: $\left[\hat{E}\hat{t} - \hat{t}\hat{E}\right] = -\frac{\hbar}{i}\hat{1}$

Határozatlansági reláció I.

Schwarz egyenlőtlenség: $\vec{a} \bullet \vec{b} \le |\vec{a}| \cdot |\vec{b}| \longrightarrow |\vec{a} \bullet \vec{b}| \le |\vec{a}| \cdot |\vec{b}|$

$$|\langle a|b\rangle|^2 \le \langle a|a\rangle\langle b|b\rangle$$

Legyen: $(\Delta\hat{A}) = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$ és $(\Delta\hat{B}) = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle$

$$[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$$

$$\langle\Delta\hat{A}\psi|\Delta\hat{A}\psi\rangle\langle\Delta\hat{B}\psi|\Delta\hat{B}\psi\rangle \ge |\langle\Delta\hat{A}\psi|\Delta\hat{B}\psi\rangle|^2$$

Az operátorok önadjungáltak: $\underline{\langle\psi|(\Delta\hat{A})^2\psi\rangle\langle\psi|(\Delta\hat{B})^2\psi\rangle} \ge |\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\psi\rangle|^2 =$

$$= \left|\underbrace{\frac{1}{2}\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\psi\rangle}_{\text{Im}} + \underbrace{\frac{1}{2}\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\psi\rangle}_{\text{Re}}\right|^2 =$$

$$= \underline{\frac{1}{4}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|^2} + \frac{1}{4}|\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\psi\rangle|^2 \quad *$$

Határozatlansági reláció II.

Következmények:

$$\Delta A = \sqrt{\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle}$$

* $$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right\rangle \right|$$

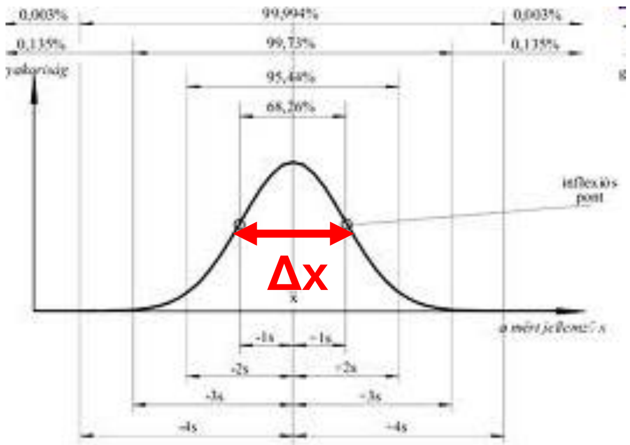
Láttuk: $$\left[\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x \right] = \frac{\hbar}{i} \hat{1}$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

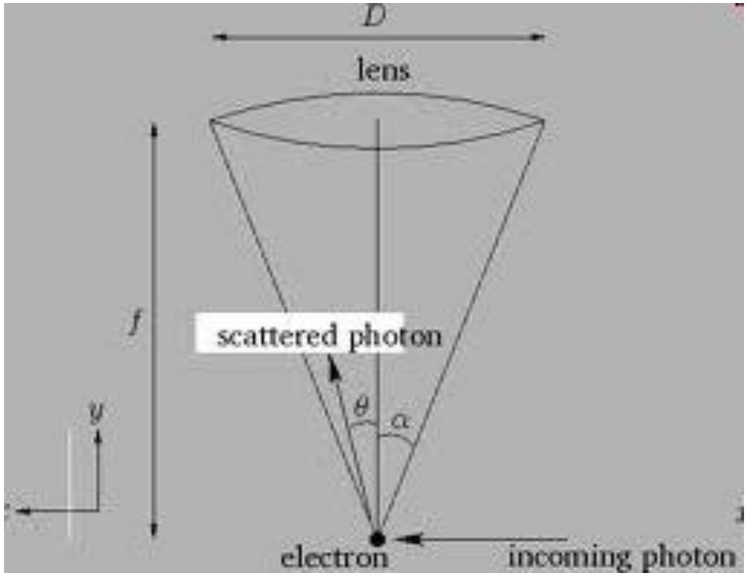
Mi a jelentése?

Határozatlansági reláció III.

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$



$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$



Mikroszkóp felbontása:

$$\Delta x = \frac{0.61\lambda}{\sin\alpha}$$

A foton által meglökött elektron impulzusbizonytalansága:

$$\Delta p = p\sin\alpha = \frac{h}{\lambda}\sin\alpha$$

Csak szemléltetés, nem bizonyítás!!!

Isten nem kockázik…

De igen…!!!

Ehrenfest tételei

$$\langle A\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{A}\psi \right\rangle = \langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

Dinamika:

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{A} \neq 0 \quad \textbf{és/vagy} \quad \langle A\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\,\hat{A}\,\psi(x)dx = \left\langle \psi \middle| \hat{A}\psi \right\rangle \neq \text{const.}$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \langle\dot{\psi}|\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\dot{\hat{A}}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{A}|\dot{\psi}\rangle =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}|\psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\left[\hat{H},\hat{A}\right]|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}|\psi\rangle$$

Az A mozgásállandó, ha: $\left[\hat{H},\hat{A}\right] = 0$ **vagy** $\frac{\partial}{\partial t}\hat{A} = 0$

Alkalmazás:

Korrespodencia:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\left[V(\hat{x}),\hat{p}\right]|\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, V(\hat{x})\right]|\psi\rangle = \left\langle -\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right\rangle = \langle F(x)\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \frac{i}{2m\hbar}\langle\psi|\left[\hat{p}^2,\hat{x}\right]|\psi\rangle = \left\langle\frac{\hat{p}}{m}\right\rangle$$

Felhasználtuk:

$$\left[\hat{p}_x^2,\hat{x}\right] = \hat{p}_x\left[\hat{p}_x,\hat{x}\right] + \left[\hat{p}_x,\hat{x}\right]\hat{p}_x = \frac{2\hbar}{i}\hat{p}_x$$