24/9-18 Föreläsning 7

Formalism

En mängd, V, med en linjär struktur över en kropp F.

Addition (+) : så att om $a, b \in V$

$\Rightarrow a + b \in V$

Multiplikation (·) : så att om $\alpha \in F$ och $a \in V$

$\Rightarrow \alpha \cdot a \in V$

Addition

Associativitet : $(a+b)+c = a+(b+c) \quad \forall \; a, b, c \in V$

Kommutativitet : $a+b = b+a \quad \forall \; a, b \in V$

Enhetselement : $\exists \; 0 \in V$ så att $0+a = a \quad \forall \; a \in V$

Invers : $\forall a \in V \quad \exists \; \bar{a} \in V$ så att $a + \bar{a} = 0$

Multiplikation

$\alpha, \beta \in F, \; a \in V \Rightarrow \alpha(\beta a) = (\alpha\beta)a \in V$

Distributivitet : $(\alpha+\beta)a = \alpha a + \beta a \quad \forall \; \alpha, \beta \in F, \; a \in V$

$\alpha(a+b) = \alpha a + \alpha b$

Enhetselement : $\exists \; 1 \in F$ så att $1 \cdot a = a \quad \forall a \in V$

Kvantmekaniken är uppbyggd på:

1. Tillstånd (vågfunktioner)
2. Observabler (operatorer)

Tolkning: tillstånd är vektorer i ett vektorrum (funktionsrum).

Observabler, dvs. operatorer, kan ses som linjära transformationer av dessa tillståndsvektorer.

$$\psi \nearrow \quad \xrightarrow[\hat{O}]{\text{Observation}} \quad \uparrow \; \psi' = \hat{O}\psi$$

Mängden av alla kvadratintegrabla funktioner $f(x)$ på intervallet $[a,b]$:

$$\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty$$

är ett vektorrum som kallas för L^2 eller Hilbertrummet.

Våra vågfunktioner är alltså vektorer i ett Hilbertrum

Inre produkten i vårt Hilbertrum:

För varje funktion $f(x)$ i vårt H-rum så svarar en vektor $|f\rangle$ och för varje vektor $|f\rangle$ svarar en "dual" $\langle f|$

$\Rightarrow$ Inre produkten: $\langle f|g\rangle \equiv \int_a^b f^*(x)g(x)dx$

Via Schwarts olikhet:

$$\left| \int_a^b f^* g \, dx \right| \leq \underbrace{\sqrt{\int_a^b |f|^2 dx}} \; \underbrace{\sqrt{\int_a^b |g|^2 dx}}_{\text{kvadrat integrabla}}$$

$\Rightarrow$ $\langle f|g\rangle$ alltid begränsad

$$\left.\begin{array}{ll} f(x) \rightarrow |f\rangle & \text{"ket"} \\ \quad\;\; \langle f| & \text{"bra"} \end{array}\right\} \text{bracketnotation (Dirac)}$$

För varje $f(x)$ finns ett $|f\rangle$ och en dual $\langle f|$ så att om $\alpha|f\rangle \rightarrow \alpha^* \langle f|$

Ändligt vektorrum:

$$|f\rangle \longrightarrow (f_1, f_2, f_3, \dots)$$

$$\langle f| \longrightarrow \begin{bmatrix} f_1^* \\ f_2^* \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Transponatet + komplexkonjugatet $\Rightarrow$ $\boxed{\text{hermitkonjugatet}}$

$$\langle f|f\rangle = |f_1|^2 + |f_2|^2 + \dots$$

Egenskaper hos inre produkt:

$$\langle f|g\rangle^* = \left(\int_a^b f^*(x) g(x)\, dx\right)^* = \int_a^b f(x) g^*(x)\, dx = \int_a^b g^*(x) f(x)\, dx$$

$$= \langle g|f\rangle$$

$$\langle f|f\rangle = \int_a^b f^*(x) f(x)\, dx = \int_a^b |f(x)|^2\, dx \geq 0$$

$$\langle f|f\rangle = 0 = \int_a^b |f(x)|^2 dx \Rightarrow \begin{array}{l} f(x) = 0 \\ |f\rangle = |0\rangle \end{array}$$

Normalisering: $\int f^*(x) f(x)\, dx = 1$, dvs. $\langle f|f\rangle = 1$

Ortogonalitet: $\int f^*(x) g(x)\, dx = 0$, dvs. $\langle f|g\rangle = 0$

Ortonormala tillstånd: $\{f_n\}$ så att $\int f_n^*(x) f_m(x)\, dx = \delta_{mn}$

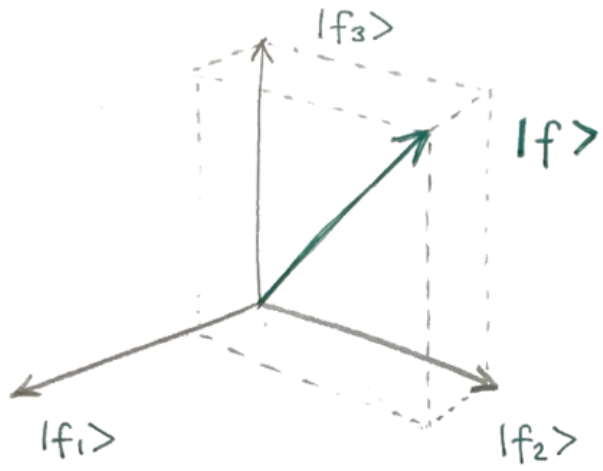
dvs. $\langle f_n | f_m\rangle = \delta_{mn}$

$\{f_n\}$ kallas <u>fullständig</u> om alla andra funktioner i Hilbertrummet kan skrivas som en linjärkomb. av dessa:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x) \quad \text{dvs.} \quad |f\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |f\rangle$$

där $c_n = \langle f_n | f \rangle$

Ex.



$c_1 = \langle f_1 | f \rangle$

Hur kopplar detta till observabler?

Väntevärdet av en observabel $O(x, P)$

$$\langle O \rangle = \int \Psi^* (\hat{O} \Psi) \, dx = \langle \Psi | \hat{O} \Psi \rangle$$

(i vissa böcker skrivs det $\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$)

Observabel: $\langle O \rangle = \langle O \rangle^*$ (fysikalisk storhet $\in \mathbb{R}$)

$$\langle O \rangle = \int \Psi^* (\hat{O} \Psi) \, dx$$

$$\langle O \rangle^* = \left(\int \Psi^* (\hat{O} \Psi) \, dx \right)^* = \int \Psi (\hat{O} \Psi)^* \, dx = \int (\hat{O} \Psi)^* \Psi \, dx =$$

$$= \langle \hat{O} \Psi | \Psi \rangle$$

Observabler uppfyller villkoret $\langle \Psi | \hat{O} \Psi \rangle = \langle \hat{O} \Psi | \Psi \rangle$

Mer allmänt:

$$\langle f | \hat{O} g \rangle = \langle \hat{O} f | g \rangle$$

Operatorer som uppfyller detta kallas <u>hermitska</u>

Observabler $\longleftrightarrow$ hermitska operatorer

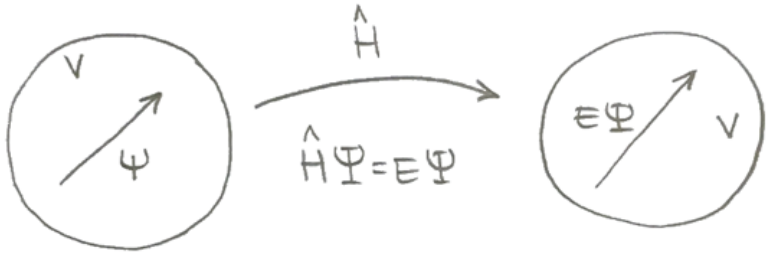
Utvikning:

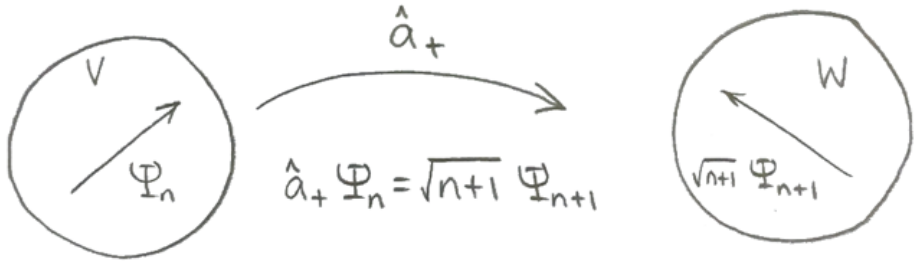
operatorer i kvantmekanik: linjära avbildningar mellan två vektorrum: $T: V \longrightarrow W$

så att $T(v_1 + v_2) = T(v_1) + T(v_2)$

$T(\alpha v) = \alpha T(v)$ där $v \in V$, $T(v) \in W$

Ex.





Basvektorer i Hilbertrummet: $\{e_i\} \longrightarrow \{|e_i\rangle\}$

Bilda matriselement av våra operatorer $\hat{A}$:

$A_{ij} \equiv \langle e_i | \hat{A} e_j \rangle \quad \Rightarrow$ Matrismekanik!

<u>Egenvärden</u>:

$\hat{A}\Psi = a\Psi$

$\Rightarrow \langle e_i | \hat{A}\Psi \rangle = \langle e_i | a\Psi \rangle = a \langle e_i | \Psi \rangle = a\Psi_i$

$\Rightarrow |\Psi\rangle = \sum_i \Psi_i |e_i\rangle \quad \Rightarrow \sum_j A_{ij}\Psi_j = a\Psi_i$

Hermitkonjugatet på en operator:

$$\boxed{\langle f | \hat{O} g \rangle \equiv \langle \hat{O}^{\dagger} f | g \rangle} \qquad \forall\ f, g$$

hermitkonjugatet av $\hat{O}$

En hermitsk operator har därför
$\hat{O} = \hat{O}^{\dagger}$

$$\begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} & \cdots \\ O_{21} & \ddots & \\ \vdots & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} O_{11}^{*} & O_{21}^{*} & \cdots \\ O_{12}^{*} & \ddots & \\ \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

Problem 3.4 a)

Summan av två hermitska operatorer är hermitsk:

$$\langle f | (\hat{O}_1 + \hat{O}_2) g \rangle = \int f^*(x) (\hat{O}_1 + \hat{O}_2) g(x) dx =$$

$$= \int f^*(x) \hat{O}_1 g(x) dx + \int f^*(x) \hat{O}_2 g(x) dx =$$

$$= \int (\hat{O}_1^{\dagger} f)^* g\, dx + \int (\hat{O}_2^{\dagger} f)^* g\, dx =$$

$$= \int (\hat{O}_1 f)^* g\, dx + \int (\hat{O}_2 f)^* g\, dx = \int ((\hat{O}_1 + \hat{O}_2) f)^* g\, dx = \langle \hat{O}_1 + \hat{O}_2 f | g \rangle$$

b) $\hat{O}$ hermitsk, $\alpha \in \mathbb{C}$. När är $\alpha \hat{O}$ hermitsk?

$$\langle f | \hat{O} g \rangle = \langle \hat{O} f | g \rangle$$

$$\langle f | \alpha \hat{O} g \rangle = \int f^* (\alpha \hat{O} g) dx = \int (\alpha^* \hat{O} f)^* g\, dx =$$

$= \langle \alpha^* \hat{O} f | g \rangle \Rightarrow \alpha \hat{O}$ är hermitsk endast då

$\alpha^* = \alpha \Rightarrow \alpha \in \mathbb{R}$

c) När är produkten av två hermitska operatorer $\hat{O}_1$, $\hat{O}_2$ också hermitsk?

$$\langle f|\hat{O}_1\hat{O}_2 g\rangle = \langle f|\hat{O}_1(\hat{O}_2 g)\rangle = \langle \hat{O}_1 f|\hat{O}_2 g\rangle = \langle \hat{O}_2\hat{O}_1 f|g\rangle$$

$\Rightarrow \hat{O}_2\hat{O}_1 = \hat{O}_1\hat{O}_2$ dvs. $[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = 0$, (jämför $[x, \hat{p}] = i\hbar$)

(Ordningen på komponenterna är väldigt viktig här, ex. $\langle \hat{O}_1 f|\hat{O}_2 g\rangle$ $\hat{O}_2$ hoppar in <u>FRAMFÖR</u>)

Bestämda tillstånd

Tillstånd sådana att varje mätning av observabeln $\hat{O}$ ger värdet Ω

$\hat{O}\Psi = \Omega\Psi$ ← egenvärdesekvation

Alla mätningar ger värdet Ω $\Rightarrow$ $\langle O\rangle = \Omega$

$\Rightarrow \sigma^2 = \langle(\hat{O} - \langle O\rangle)^2\rangle = 0$

variansen