

فضاهای برداری و ریاضیات مکانیک کوانتومی

عملگرها در پایه های خاص و نمایش ماتریس آنها

حسین شناور

گروه فیزیک، دانشکده علوم



دانشگاه هرمزگان

- خواهشمندم هرگونه اشتباه نوشتاری، مفهومی و یا محاسباتی را به آدرس ایمیل من ارسال کنید تا در ویرایش های بعدی تصحیحات لازم اعمال شوند:
h.shenavar@gmail.com
- از همکاران و دانشجویان محترم در دانشگاه هرمزگان، برای همفکری ها، حمایت ها و گوشزد نمودن نکات مفید سپاسگزارم.
- برای ضبط این درس ها از نرم افزار Camtasia استفاده شده است.

- ۱ عملگرها در پایه های خاص و نمایش ماتریس آنها
- نوشتن عملگرها در پایه های خاص
 - نمایش ماتریسی عملگرها
 - بسط عملگر الحاقی

نوشتن عملگرها در پایه های خاص

- با توجه به اینکه با عملگرهای خطی سروکار داریم، اگر حاصل عمل چنین عملگری بر همه توابع پایه فضای هیلبرت را بدانیم، آنگاه می توانیم اثر عملگر بر هر تابع دلخواه در فضای هیلبرت (و حتی دیگر عملگرها) را تعیین کنیم.
- فرض کنید که توابع پایه φ_μ فضای هیلبرت $\mathcal{H}$ را بسط می دهند و اثر عملگر A بر روی این پایه ها به صورت زیر نوشته می شود:

$$A\varphi_\mu = \sum_\nu a_{\nu\mu}\varphi_\nu$$

معنی رابطه بالا این است که حاصل اثر A بر پایه های فضا را می توان به صورت ترکیبی از پایه های فضا نوشت. به عبارت دیگر، $A\varphi_\mu$ هم در فضای هیلبرت قرار دارد! ضرایب بسط بالا $a_{\mu\nu}$ را می توان به راحتی به کمک ضرب داخلی به دست آورد:

$$a_{\nu\mu} = \langle \varphi_\nu | A\varphi_\mu \rangle = \langle \varphi_\nu | A | \varphi_\mu \rangle$$

- درباره نمادگذاری: در آخرین عبارت فرمول بالا یک خط عمودی | به ضرب داخلی اضافه شده است. این نوع نوشتن به مراتب بهتر از نوشتار عبارت وسطی است؛ چون علاوه بر زیبایی ظاهری !!! این نوع نوشتن نشان می دهد که عبارت یاد شده با $\langle A^\dagger \varphi_\nu | \varphi_\mu \rangle$ برابر است.

نوشتن عملگرها در پایه های خاص

- حالا فرض کنید تابع دلخواه $|\psi\rangle = \psi$ در فضای هیلبرت $\mathcal{H}$ را بر حسب پایه های فضا φ_μ بسط داده ایم.

$$\psi = \sum_{\mu} c_{\mu} \varphi_{\mu}, \quad c_{\mu} = \langle \varphi_{\mu} | \psi \rangle$$

به تفاوت نمادگذاری کتاب آرکمن با نمادگذاری معمول کتب مکانیک کوانتومی دقت کنید.

- حال اثر عملگر A بر تابع ψ را محاسبه می کنیم:

$$A\psi = \sum_{\mu} c_{\mu} A\varphi_{\mu} = \sum_{\mu} c_{\mu} \sum_{\nu} a_{\nu\mu} \varphi_{\nu} = \sum_{\nu} \left(\sum_{\mu} a_{\nu\mu} c_{\mu} \right) \varphi_{\nu}$$

پس مقدار $\chi \equiv A\psi$ هم در فضای هیلبرت قرار دارد. بسط این تابع را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\chi = \sum_{\nu} b_{\nu} \varphi_{\nu}$$

- پرسش: رابطه زیر را می توان به شکل ماتریسی نوشت و تفسیر کرد. چگونه؟!

$$A\psi = \sum_{\mu} c_{\mu} A\varphi_{\mu} = \sum_{\mu} c_{\mu} \sum_{\nu} a_{\nu\mu} \varphi_{\nu} = \sum_{\nu} \left(\sum_{\mu} a_{\nu\mu} c_{\mu} \right) \varphi_{\nu}$$

نوشتن عملگرها در پایه های خاص

پرسش: رابطه زیر را می توان به شکل ماتریسی نوشت و تفسیر کرد. چگونه؟!

$$A\psi = \sum_{\mu} c_{\mu} A\varphi_{\mu} = \sum_{\mu} c_{\mu} \sum_{\nu} a_{\nu\mu} \varphi_{\nu} = \sum_{\nu} \left(\sum_{\mu} a_{\nu\mu} c_{\mu} \right) \varphi_{\nu}$$

پاسخ: اگر $\mathbf{c}$ را برداری ستونی با مولفه های c_i فرض کنیم که نشان دهنده ψ است.

اگر $\mathbf{b}$ را برداری ستونی با مولفه های b_i فرض کنیم که نشان دهنده χ است.

اگر A را یک ماتریس با درایه های a_{ij} فرض کنیم که نشان دهنده عملگر A است.

آنگاه رابطه عملگری $\chi = A\psi$ معادل است با رابطه ماتریسی $\mathbf{b} = A\mathbf{c}$.

معنی تناظر $\mathbf{b} = A\mathbf{c} \Leftrightarrow \chi = A\psi$ این است که عملگرها را می توان به صورت ماتریس و توابع را می توان به صورت بردار در نظر گرفت.

در واقع اگر از نمادگذاری دیراک استفاده کنیم، آنگاه می توان نوشت:

$$A\psi = \sum_{\nu\mu} |\varphi_{\nu}\rangle \langle \varphi_{\nu}| A | \varphi_{\mu}\rangle \langle \varphi_{\mu}| \psi\rangle$$

$$A = \sum_{\nu\mu} |\varphi_{\nu}\rangle \langle \varphi_{\nu}| A | \varphi_{\mu}\rangle \langle \varphi_{\mu}| \quad \text{و یا}$$

نوشتار ماتریسی عملگرها

رابطه زیر

$$A = \sum_{\nu\mu} |\varphi_\nu\rangle \langle \varphi_\nu| A |\varphi_\mu\rangle \langle \varphi_\mu|$$

همان عملگر A است که دو بار از سمت چپ و راست در عملگر همانی $I = \sum_\mu |\varphi_\mu\rangle \langle \varphi_\mu|$ ضرب شده است.

همچنین با توجه به اینکه داریم $a_{\nu\mu} = \langle \varphi_\nu| A |\varphi_\mu\rangle$ می توان عملگر A را به صورت زیر نیز بازنویسی کرد:

$$A = \sum_{\nu\mu} |\varphi_\nu\rangle a_{\nu\mu} \langle \varphi_\mu|$$

در رابطه بالا شکل کلی ماتریسی یک عملگر را داریم. مثلاً عملگر همانی I عملگری است که درایه های آن با $a_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$ نشان داده می شوند.

$$I_1 = [1], I_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, I_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, I_n = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

مثالی از نمایش ماتریسی عملگرها

• مثالی که در ادامه خواهد آمد، بخشی از حل مساله نوسانگر ساده در مکانیک کوانتومی است. راه حل های ساده تر نیز وجود دارند، ولی ما در اینجا می خواهیم تناظر عملگر-ماتریس در فضای برداری را با یک مثال فیزیکی نشان دهیم.

• فیزیک نوسانگر هارمونیک ساده در مکانیک کوانتومی را می توان توسط چندجمله های هرمیت

$$\varphi_n(x) = C_n H_n(x) e^{-x^2/2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

توصیف کرد در حالی که ضرب داخلی توسط رابطه

$$\langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) g(x) dx$$

محاسبه می شود. می توان نشان داد که φ_n ها متعامد هستند. همچنین اگر ضرایب را به صورت $C_n = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2}$ انتخاب کنیم؛ این توابع بهنجار هم هستند.

عملگر موقعیت در مکانیک کوانتومی

• می خواهیم شکل ماتریسی عملگر موقعیت x را به دست آوریم؛ یعنی می خواهیم مولفه های $x_{\mu\nu}$ را محاسبه کنیم.

تمرین: با استفاده از رابطه زیر مولفه های $x_{\mu\nu}$ را محاسبه کنید.

$$x_{\nu\mu} = \langle \varphi_\nu | x | \varphi_\mu \rangle = C_\nu C_\mu \int_{-\infty}^{\infty} H_\nu(x) x H_\mu(x) e^{-x^2} dx$$

توجه کنید که چند مورد اول از چندجمله ای های هرمیت در زیر آمده اند:

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2x, \quad H_2 = 4x^2 - 2, \quad H_3 = 8x^3 - 12x, \quad \dots,$$

همچنین، از انتگرال زیر استفاده کنید.

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-x^2} dx = \frac{(2n-1)!! \sqrt{\pi}}{2^n}$$

عملگر موقعیت در مکانیک کوانتومی

• می خواهیم شکل ماتریسی عملگر موقعیت x را به دست آوریم؛ یعنی می خواهیم مولفه های $x_{\mu\nu}$ را محاسبه کنیم.

تمرین: با استفاده از رابطه زیر مولفه های $x_{\mu\nu}$ را محاسبه کنید.

$$x_{\nu\mu} = \langle \varphi_\nu | x | \varphi_\mu \rangle = C_\nu C_\mu \int_{-\infty}^{\infty} H_\nu(x) x H_\mu(x) e^{-x^2} dx$$

با توجه به تقارن زوج و فرد چندجمله ای های هرمیت می توان دید که بسیاری از عناصر $x_{\mu\nu}$ صفرند. ولی برخی از عناصر هم غیر صفرند. مثلاً

$$\begin{aligned} x_{12} &= C_1 C_2 \int_{-\infty}^{\infty} (2x)x(4x^2 - 2)e^{-x^2} dx = C_1 C_2 \int_{-\infty}^{\infty} (8x^4 - 4x^2)e^{-x^2} dx \\ &= C_1 C_2 [8I_2 - 4I_1] = 1. \end{aligned}$$

دقت کنید که سطرها و ستون ها به صورت $0, 1, 2, \dots$ شماره گذاری می شوند. و یا

$$x_{01} = C_0 C_1 \int_{-\infty}^{+\infty} H_0(x) x H_1(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{2}/2$$

عملگر موقعیت در مکانیک کوانتومی

$$x = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}/2 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{2}/2 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{6}/2 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{6}/2 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

```
In[1]:= c = Table[1/Sqrt[(2^n) n! Sqrt[Pi]], {n, 0, 7}];
```

```
In[2]:= x1 =
```

```
MatrixForm[
```

```
Quiet@
```

```
Chop[
```

```
Table[c[[i]]*c[[j]]
```

```
NIntegrate[HermiteH[i-1,x]*x*HermiteH[j-1,x] Exp[-x^2],
```

```
{x,-Infinity,Infinity}, AccuracyGoal->25], {i,1,Length[c]},
```

```
{j,1,Length[c]}]]]
```

```
Out[2]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 0 & 0.707107 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.707107 & 0 & 1. & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1. & 0 & 1.22474 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1.22474 & 0 & 1.41421 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.41421 & 0 & 1.58114 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1.58114 & 0 & 1.73205 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1.73205 & 0 & 1.87083 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1.87083 & 0 \end{pmatrix}$$

اگر کمی محاسبات را
ادامه دهیم، شکل مقابل
را برای نمایش ماتریسی
عملگر موقعیت در مکانیک
کوانتومی می یابیم:

کد متمتیکا برای محاسبه
ماتریس موقعیت را در زیر
می بینید.

نوشتن عملگر الحاقی در پایه های فضا

• حالا می خواهیم عملگر الحاقی را در پایه های فضای هیلبرت $\mathcal{H}$ بنویسیم. توجه کنید که رابطه زیر بین یک عملگر و عملگر الحاقی آن وجود دارد.

$$\langle \psi | A | \chi \rangle = \langle A^\dagger \psi | \chi \rangle = \langle \chi | A^\dagger | \psi \rangle^*,$$

تمرین: نشان دهید که عبارت آخر در رابطه بالا درست است. راهنمایی: از ویژگی مزدوج مختلط مربوط به ضرب داخلی استفاده کنید.

• فرض کنید که توابع پایه φ_μ فضای هیلبرت $\mathcal{H}$ را بسط می دهند. حال با توجه به رابطه اخیر می توان نوشت:

$$\langle \chi | A^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | A | \chi \rangle^* = \left[\langle \psi | \left(\sum_{v\mu} |\varphi_v\rangle a_{v\mu} \langle \varphi_\mu| \right) | \chi \rangle \right]^*$$

$$= \sum_{v\mu} \langle \psi | \varphi_v \rangle^* a_{v\mu}^* \langle \varphi_\mu | \chi \rangle^*$$

$$= \sum_{v\mu} \langle \chi | \varphi_\mu \rangle a_{v\mu}^* \langle \varphi_v | \psi \rangle,$$

در خط آخر مجدداً از ویژگی مزدوج مختلط مربوط به ضرب داخلی استفاده کرده و جملات را

$$A^\dagger = \sum_{v\mu} |\varphi_v\rangle a_{\mu v}^* \langle \varphi_\mu|$$

جابجا نوشته ایم. پس می توان نوشت:

نوشتن عملگر الحاقی در پایه های فضا

• دو رابطه زیر را با هم مقایسه کنید.

$$A = \sum_{\nu\mu} |\varphi_\nu\rangle a_{\nu\mu} \langle\varphi_\mu|$$

$$A^\dagger = \sum_{\nu\mu} |\varphi_\nu\rangle a_{\mu\nu}^* \langle\varphi_\mu|$$

دقت کنید که ضریب $a_{\nu\mu}$ با ضریب $a_{\mu\nu}^*$ جایگزین شده که جای شمارنده ها در آن تعویض شده و عمل مزدوج مختلط نیز وارد شده است. این دو عملیات همیشه به ما کمک می کنند که الحاقی یک عملگر را در پایه های مورد نظرمان بنویسیم. پس به این نتیجه می رسیم که رابطه بین یک عملگر مانند A با الحاقی اش $A^\dagger$ دقیقا همان رابطه ای است که یک ماتریس با الحاقی اش دارد. بنابراین

• اگر نمایش ماتریسی یک عملگر را با A نشان دهیم، آنگاه الحاقی آن عملگر در نمایش ماتریسی همان ماتریس الحاقی یعنی $A^\dagger$ می باشد.

نمایش ماتریسی اسپین ها

فرض کنید فضای اسپینی را با دو تابع پایه α و β نمایش می دهیم. همچنین ضرب داخلی بین این دو تابع توسط روابط زیر تعریف می شود.

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \beta | \beta \rangle = 1, \quad \langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle = 0,$$

همچنین عملگر B به صورت زیر تعریف شده است.

$$B\alpha = 0, \quad B\beta = \alpha$$

با محاسبه همه ضرب های داخلی ممکن از روابط بالا داریم

$$\langle \alpha | B\alpha \rangle = 0, \quad \langle \beta | B\alpha \rangle = 0, \quad \langle \alpha | B\beta \rangle = 1, \quad \langle \beta | B\beta \rangle = 0.$$

البته چهار رابطه بالا با چهار رابطه زیر معادل اند (چرا؟!)

$$\langle B^\dagger \alpha | \alpha \rangle = 0, \quad \langle B^\dagger \beta | \alpha \rangle = 0, \quad \langle B^\dagger \alpha | \beta \rangle = 1, \quad \langle B^\dagger \beta | \beta \rangle = 0,$$

بنابراین الحاقی عملگر B یعنی $B^\dagger$ برابر است با

$$B^\dagger \alpha = \beta, \quad B^\dagger \beta = 0.$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad \text{و یا}$$

پس این دو عملگر در نمایش ماتریسی الحاقی همدیگرند (که البته قابل انتظار بود).

توابع عملگرها - توابع ماتریس ها

پیشتر یاد گرفته ایم که می توان چندجمله ای هایی را تعریف کرد که تابعی از یک و یا چند ماتریس باشند. همچنین می توان سری های توانی از ماتریس ها را تعریف کرد، به شرطی که سری مذکور برای هر درایه ماتریس همگرا شود. برای مثال اگر A یک ماتریس با ابعاد $n \times n$ باشد، آنگاه سری های زیر هم ماتریس هایی $n \times n$ هستند:

$$\exp(A) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} A^j,$$

$$\sin(A) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j+1)!} A^{2j+1},$$

$$\cos(A) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j)!} A^{2j}$$

مثلا برای ماتریس های پائولی σ_k که پیشتر معرفی شده اند، می توان اتحاد اویلر را به صورت زیر به دست آورد:

$$\exp(i\sigma_k\theta) = \mathbf{1}_2 \cos \theta + i\sigma_k \sin \theta,$$

تناظر بین عملگرها و ماتریس ها به ما می گوید که توابع عملگری را نیز می توان مانند توابع ماتریسی حساب کرد و به کار برد. این موضوع اهمیت نظری و کاربردی اساسی دارد.

نکات مهم این درس

انتظار این است که در انتهای این درس شما بتوانید عملگرها در پایه های خاص و نمایش ماتریس آنها و مهم ترین نتایج و کاربرد آنها را به درستی توضیح دهید. به ویژه انتظار می رود که بتوانید پرسش های زیر را پاسخ دهید:

- ۱ چطور می توان یک عملگر را در پایه های مشخصی نوشت؟
- ۲ چطور می توان شکل ماتریسی یک عملگر را یافت؟
- ۳ تناظر بین شکل عملگری و شکل ماتریسی را توضیح دهید.
- ۴ درباره شکل ماتریسی عملگر تکانه در مکانیک کوانتومی تحقیق کنید.
- ۵ رابطه بین یک عملگر و الحاقی آن در صورت بندی ماتریسی چگونه است؟

اگر درباره هر کدام از مفاهیم یاد شده بالا مشکلی احساس می کنید، لطفا درس را یک بار دیگر مرور کنید.

فراموش نکنیم که بهترین راه برای درک و ”درونی سازی“ مفاهیم ریاضی و فیزیک، حل مساله است. به همین دلیل سعی کنید دانسته های خود را با حل سوالات محک زده و تقویت کنید. این مساله ها در انتهای هر درس ارائه می شوند.

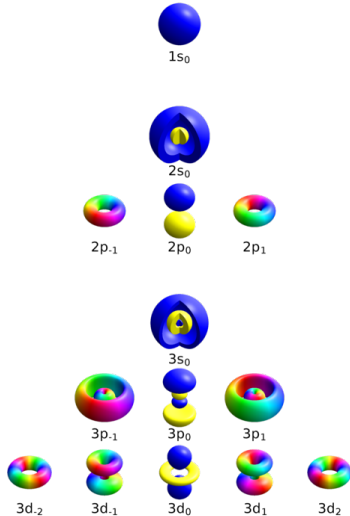


تمرین

- تمرین های بخش سوم از فصل پنجم کتاب آرفکن و همکاران (ویرایش هفتم) را حل کنید.

مبحث بعدی: عملگرهای هرمیتی و یا خودالحاق

- در جلسه بعد با عملگرهای هرمیتی و یا خودالحاق بیشتر آشنا خواهیم شد.



منابع

- ❶ Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide (7th Edition) by George B. Arfken, Hans J. Weber, Frank E. Harris, Academic Press (2012)
- ❷ Mathematical Methods for Physicists (6th Edition) by George B. Arfken, Hans J. Weber, Academic Press (2012)
- ❸ Mathematical Methods for Physics and Engineering, 3rd Edition, by K. F. Riley, M. P. Hobson, S. J. Bence , Cambridge University Press (2006)
- ❹ Mathematical Physics: A Modern Introduction to Its Foundations, 2nd ed, by Sadri Hassani (2013)
- ❺ Methods of Theoretical Physics I, II, Morse, Philip M. and Feshbach, Herman, McGraw-Hill (1953)
- ❻ <https://math.libretexts.org/>
- ❼ <https://www.youtube.com/@eigenchris>

با سپاس از توجه شما