KAPITTEL 5: MATEMATISK MELLOMSPILL B: LINEÆR ALGEBRA

Sammenkung observerbare ~~størrelser~~ $\leftrightarrow$ operatorer:

$$O\psi = o\psi \qquad (5.1)$$

$$\langle o \rangle = \int \psi^* O \psi \, d^3\vec{r}$$

5.1 Egenskaper til lineære operatorer

Vi krever:

$$O[cf(x)] = cOf(x)$$

$$O[f(x)+g(x)] = Of(x) + Og(x)$$

Videre selvsagte definisjoner;

$$Rf(x) = (P \pm Q)f(x) = Pf(x) \pm Qf(x)$$

Hvis $R = PQ$, komposisjon:

$$R\psi = (PQ)\psi = P(Q\psi) \qquad (5.2)$$

Eksempel 1

X 1D posisjonsoperator, D derivasjonsoperator

$$DX\psi = \frac{d}{dx}(x\psi) = \psi + x\frac{d\psi}{dx} = (1+XD)\psi$$

$$\boxed{DX = 1 + XD} \qquad (5.3)$$

Multiplikasjonen i eksemplet er ikke kommutativ!

$$\boxed{[A,B] \overset{\text{def}}{=} AB - BA}$$

Kommutatoren til to operatorer har sentral betydning i kvantemekanikk!

Eksempel 2

Kommutatoren av H og P:

$$[H,P]\psi = HP\psi - PH\psi$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\left[-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right] - \left[-i\hbar\frac{d}{dx}\right]\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi\right]$$

$$= +i\cancel{\frac{\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}} - \cancel{i\hbar V(x)\frac{\partial\psi}{\partial x}} - i\cancel{\frac{\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}} + i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\psi + \cancel{i\hbar V(x)\frac{\partial\psi}{\partial x}}$$

$$= i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\psi$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{[H,P] = i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}}$$

Viktige egenskaper, lett å vise (oppgave 5.1):

$$[A,B] = -[B,A] \qquad (5.4)$$

$$[A,A] = 0 \qquad (5.5)$$

$$[A+B,C] = [A,C] + [B,C] \qquad (5.6)$$

$$[A,BC] = [A,B]C + B[A,C] \qquad (5.7)$$

Kvantemekanisk problemstilling:

Partikkel, skal måle to observable a og b.
Kan den være samtidig i tilstand med definitt a og definitt b?

Svar:

Ja, men bare dersom $[A,B]=0$

Vist:

Anta $\quad A\psi = a\psi \qquad (5.8)$
og videre at egenfunksjonen er ikke-degenerert.
Anta nå $[A,B]=0$:

$$BA\psi = Ba\psi = aB\psi$$

Skriv om l.h.s.:

$$A(B\psi) = a(B\psi)$$

Ikke-degenerert $\Rightarrow$ A-egenfunksjonen kan bare være multippel av ψ:

$$B\psi = b\psi$$

q.e.d.

Eksempel 3

Fant

$$[H, P] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$

For hvilke potensialer kan ψ være samtidig egenfunksjon for H & P ?

Ja:

$$V = \text{konstant} \; (\to 0)$$

Bare fri-partikkel-løsninger!

*

Berømt kommutator:

$$[P, X]\psi = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x\psi - x\left(-i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)$$
$$= -i\hbar\psi$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{[P, X] = -i\hbar}$$

En partikkel kan aldri være i en tilstand med samtidig definitt impuls og definitt posisjon!

Vi ~~ser~~ tidsuavh. SL, ψ er egenfunksjon for H. Vi ønsker da et operatorsett $A, B, \ldots$ som kommuterer med H og med hverandre:

$$[H, A] = 0 \qquad [A, B] = 0$$
$$[H, B] = 0 \qquad [A, C] = 0$$
$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$

For da eksisterer det en bølgefunksjon hvor

$$H\psi = E\psi$$
$$A\psi = a\psi$$
$$B\psi = b\psi$$
$$\vdots$$

Egenverdiene – de gode kvantetallene – spesifiserer ψ.

5.2 Vektorrom

Vektorer i n dimensjoner:

$$\vec{r} = (r_1, r_2, \ldots, r_n)$$
$$\vec{s} = (s_1, s_2, \ldots, s_n)$$

$$\vec{r}\cdot\vec{s} = r_1 s_1 + \ldots + r_n s_n$$
$$\vec{r}+\vec{s} = (r_1+s_1, \ldots, r_n+s_n)$$

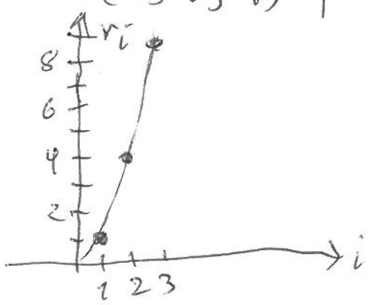
Vektorrom:
Samling av objekter (vektorer) som generelt oppfører seg som vanlige 3D vektorer:

$$\vec{r}+\vec{s} = \vec{t} \tag{5.9}$$
$$c\vec{r} = \vec{u} \tag{5.10}$$

To slags vektorrom:
- c reell (som vi er vant med)
- c kompleks

UTELUKKENDE KOMPLEKSE VEKTORROM i QM!

Eksempel, $\vec{r} = (1, 4, 9)$ plotta som funksjon av i:



Settet av alle punkter på tallinja blir en ∞-dimensjonal vektor.

Summen av to funksjoner $f(x)$ og $g(x)$ blir også en funksjon:

$$f(x) + g(x) = h(x)$$

SETTET AV ALLE FUNKSJONER OPPFØRER SEG SOM ET ∞-DIMENSJONALT VEKTORROM

Indre produkt

For vanlige 3D vektorer:

$$\vec{r}\cdot\vec{s} = r_1 s_1 + r_2 s_2 + r_3 s_3$$

Ved generalisering til ∞-dimensjonalt vektorrom:
Vektorer ψ og ϕ som input gir komplekst tall ut:

$$(\psi|\phi) = c$$

Det er analogi til prikk-produkt:
Egenskaper:

$$\boxed{\begin{aligned} (\psi+\phi|\theta) &= (\psi|\theta) + (\phi|\theta) \\ (\psi|c\phi) &= c(\psi|\phi) \\ (\psi|\phi) &= (\phi|\psi)^* \\ (\psi|\psi) &\geq 0 \end{aligned}}$$

(5.11)
(5.12)
(5.13)
(5.14)

$$(5.12) + (5.13) \Rightarrow (\psi|c\phi)^* = c^*(\psi|\phi)^*$$

$$(c\psi|\phi) = c^*(\psi|\phi) \quad \text{(omløp)} \qquad (5.15)$$

Vanlige 3D vektorer oppfyller disse likningene.
Fra analogi med prikkprodukt, i kontinuumsgrensen:
Indre produkter for reelle funksjoner

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} r_i s_i = \int f(x)g(x)$$

men for komplekse funksjoner:

$$\boxed{(f|g) = \int f(\vec{r})^* g(\vec{r})\, d^3\vec{r}} \qquad (5.16)$$

eller

$$\boxed{(f|g) = \int f(x)^* g(x)\, dx} \qquad (5.17)$$

Eksempel 5.4

$\psi(x) = e^{-x^2/2}$, $\phi(x) = x e^{-x^2/2}$.

$$(\psi|\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\phi(x)\,dx$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2}\,dx$$
$$= \underline{0}$$

pga. integrandens odde-egenskap $\underline{f(-x) = -f(x)}$.

Mer kompakt notasjon for tidligere resultater:

$$(\psi|\psi) = 1 \qquad \text{(normalisering)}$$
$$\langle O \rangle = (\psi|O\psi) \quad \text{(forventningsverdi)}$$

Adjungerte og hermiteske operatorer

Med A en operator, er dens adjungerte, $A^\dagger$, definert ved:

$$\boxed{(\phi|A\psi) = (A^\dagger\phi|\psi)} \qquad (5.18)$$

Eksempel 5.5

Derivasjonsoperatorens adjungerte

$$(\phi|D\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)^* \frac{d\psi}{dx}\,dx$$
$$= \left[\phi(x)^*\psi(x)\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\phi^*}{dx}\psi(x)\,dx \qquad (5.19)$$

(fysiske partikler) $\rightarrow$ $= -\int_{-\infty}^{\infty} (D\phi)^*\psi\,dx$

eller

$$\boxed{D^\dagger = -D}$$

Greit utledet:

$$(cP)^\dagger = c^* P^\dagger \qquad (5.20)$$

$$(P+Q)^\dagger = P^\dagger + Q^\dagger$$

$$(PQ)^\dagger = Q^\dagger P^\dagger \qquad (5.21)$$

$$(P^\dagger)^\dagger = P$$

(5.21) fordi:

$$(\phi \mid P[Q\psi]) = (P^\dagger\phi \mid Q\psi)$$
$$= (Q^\dagger[P^\dagger\phi] \mid \psi)$$

(5.20) $\Rightarrow$ (hvis $P = 1$:)

$$c^\dagger = c^* \qquad \text{(komplekst tall)}$$

Hvis en operator har egenskapen

$$O^\dagger = O$$

så kalles den <u>selvadjungert</u> eller <u>hermitesk</u>.

<u>Eksempel 5.6</u>

Posisjonsoperatoren i 1D, X:

$$(\phi \mid X\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)^* \, x \, \psi(x) \, dx$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} [x\,\phi(x)]^* \psi(x)\, dx$$
$$= (X\phi \mid \psi)$$

dvs. $X^\dagger = X$, <u>posisjonsoperatoren er selvadjungert!</u>

I QM er ~~fysisk~~ observerbare ~~størrelser~~ alltid reelle; ~~[illegible]~~

$$\boxed{\text{VI KREVER DERFOR AT OPERATORER SOM TILSVARER FYSISKE OBSERVABLE ER } \underline{\text{HERMITESKE}}}$$

~~Til~~ dette fordi både forventningsverdier og egenverdier til slike er reelle.

Se på salsa:
Med Q hermitesk,

$$\langle q \rangle = (\Psi | Q\Psi)$$

~~[illegible]~~ $\langle q \rangle^* = (Q\Psi | \Psi)$ fra (5.13)

Pga. adjungeringsdefinisjonen:

$$\langle q \rangle^* = \langle \Psi | Q^\dagger \Psi \rangle$$
$$= \langle \Psi | Q\Psi \rangle$$
$$= \langle q \rangle$$

– $\langle q \rangle$ er altså reell !

Tilsvarende, med Ψ en egenfunksjon med hermitesk operator Q og egenverdi q:

$$(\Psi | Q\Psi) = (Q\Psi | \Psi)$$

$$\Rightarrow \quad (\Psi | q\Psi) = (q\Psi | \Psi)$$
$$q(\Psi|\Psi) = q^*(\Psi|\Psi)$$
$$q = q^*$$

egenverdien er reell !

Basis-sett

(i) Vanlige vektorer kan skrives som lineærkombinasjoner av $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$:

$$\vec{r} = c_1\hat{x} + c_2\hat{y} + c_2\hat{z} \quad (5.22)$$

(ii) uten overtallighet. ~~[illegible]~~

I et abstrakt vektorrom med tilsvarende egenskaper:

Alle vektorer kan skrives som lineærkombinasjoner av vektorer i et sub-sett, kalt en basis.

Generelt, n distinkte basisvektorer i et n-dimensjonalt vektorrom.

Basis-settet $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ er <u>ortonormalt</u>.

Basis-settet i et vilkårlig vektorrom vil ikke være entydig.

Også ∞-dimensjonale vektorrom har basis-sett, som ~~ikke~~ vil være ∞ sett. ~~...~~

<u>Eksempel</u>:

Rommet som er funksjonssettet periodisk med periode 2π:

$$f(x+2\pi) = f(x)$$

indre produkt def. ved int fra 0 til 2π

Velkjent:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A_n}{\sqrt{\pi}} \sin(nx) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{\sqrt{\pi}} \cos(nx) \qquad (5.24)$$

Ortonormal basis:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin mx \middle| \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin nx\right) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos mx \middle| \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos nx\right) = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ 1 & m = n \end{cases}$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin mx \middle| \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos nx\right) = 0$$

Bestemmelse av A_n og B_n? Helt analogt med ~~...~~ kartesiske vektorer som man projiserer inn på basisvektorene etter tur:

$$\vec{r} = (\vec{r} \cdot \hat{x})\hat{x} + (\vec{r} \cdot \hat{y})\hat{y} + (\vec{r} \cdot \hat{z})\hat{z} \qquad (5.26)$$

Analogt:

$$A_n = \left(f \middle| \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin nx\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{2\pi} f(x) \sin nx \, dx$$

$$B_n = \left(f \middle| \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos nx\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{2\pi} f(x) \cos nx \, dx$$

Heller ikke her entydighet:
Det finnes andre basis-sett, f.eks. løsningssett $\psi_n(x)$ for vilkårlig potensial $V(x)$.
Det vil være et basis-sett, slik at for en vilkårlig funksjon:

$$f(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$