Cvičení 2. 3. 2022

Téma: Maticová reprezentace operátorů

∞ Funkce, operátory a lineární algebra

Jako v minulých cvičeních budeme uvažovat funkce $\frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin n\phi$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos n\phi$ a $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ na intervalu $(0, 2\pi)$, s $n \in N$. Už víme, že tvoří ortonormální bázi, tedy jsou na sebe kolmé a normované na 1. Tedy pokud použijeme skalární součin

$$\langle i|j\rangle = \int_0^{2\pi} i^*(\phi) j_(\phi) d\phi\,,$$

kde $i(\phi)$ a $j(\phi)$ jsou nějaké obecné funkce dané báze.

Pro funkce budeme používat krátké značení pomocí ketů a říkat jim stavy

$$|s_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(n\phi) \tag{1}$$

$$|c_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(n\phi) \tag{2}$$

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,. \tag{3}$$

Označení stav je takové obecnější, neboť nepředpokládáme nějakou konkrétní bázi pro vyjádření (reprezentaci), jako je tomu v případě použití funkcí závisejících na ϕ. Navíc je to v kvantové mechanice přirozené, říkáme, že částice se nachází v nějakém stavu. To, že báze je ortonormální vede k tomuto:

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

Opět budeme uvažovat operátory $\hat{A} = i\frac{d}{d\phi}$ a $\hat{B} = \sin\phi$. Z minula víme, jak tyto operátory působí na stavy $|i\rangle$:

$$\hat{A}|0\rangle = 0\,, \quad \hat{A}|s_n\rangle = in|c_n\rangle\,, \quad \hat{A}|c_n\rangle = -in|s_n\rangle\,.$$

Dnes toho využijeme pro vytvoření maticové reprezentace těchto operátorů, ale předtím si ještě více zažijeme nové značení.

Uvažujme nyní funkci $f(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{3i\phi}$.

▷ Ukažte, že je funkce normalizovaná na 1.

▷ Přepište funkci $f(\phi)$ pomocí našich bázových funkcí, které potom přeznačte na stavy.

▷ Ukažte, že funkce $f(\phi)$ vyjádřená pomocí stavů $|i\rangle$ je normalizovaná na 1. (Snažíme se využít $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$.)

Nyní na funkci $f(\phi)$ pustíme operátor $\hat{A}$ třemi způsoby:

▷ Použijte operátor $\hat{A}$ přímo na $f(\phi)$.

▷ Použijte operátor $\hat{A}$ na funkci $f(\phi)$ vyjádřenou pomocí funkcí báze $f_i(\phi)$.

▷ Použijte znalosti akce operátoru $\hat{A}$ na stavy $|i\rangle$.

Výsledky by měly být ekvivalentní a ukazují nám, že funkce $f(\phi)$ je vlastní stav $\hat{A}$. Zároveň bychom měli vidět, že výpočty se stavy jsou rychlejší, tedy aspoň pokud známe bázi vlastních stavů a výsledek akce operátoru na tuto bázi.

Shrňme si to. Když zapůsobíme operátorem $\hat{O}$ na nějaký stav ortonormální báze $|i\rangle$, dostaneme obecně něco, co můžeme napsat jako kombinaci stavů báze $|j\rangle$ vynásobené nějakými koeficienty. (Vzpomeňme na působení operátoru $\hat{B}$.) Tedy takto:

$$\hat{O}|i\rangle = \sum_j o_{ji}|j\rangle\,.$$

Čísla o_{ji} mají dva indexy, neboť záleží, na který stav báze působíme.

V kvantové mechanice nás často zajímají střední hodnoty, ty jsou definovány jako $\langle i|\hat{O}|i\rangle$. Zkusme si to vypočítat obecně.

▷ Použijte relaci pro akci operátoru $\hat{O}$ pro výpočet střední hodnoty pro stav $|i\rangle$. Výsledkem by mělo být číslo o_{ii}.

Zkusme nyní výpočet $\langle i|\hat{O}|i\rangle$ zobecnit a použít jako bra $\langle k|$.

$$\langle k|\hat{O}|i\rangle = \langle k|\sum_j o_{ji}|j\rangle = \sum_j o_{ji}\langle k|j\rangle = \sum_j o_{ji}\delta_{kj} = o_{ki}\,.$$

Tedy opět jsme dostali nějaké číslo, které závisí na bázové funkci, která obloží operátor zleva a zprava. Pokud zavedeme pro bázové funkce nějaké pořadí, můžeme potom čísla o_{ki} uspořádat to tabulky odpovídajícím způsobem. Tím utvoříme maticovou reprezentaci nějakého operátoru.

To samé bez dlouhého povídání: Vypočteme $o_{ij} = \langle i|\hat{O}|j\rangle$ pro všechny dvojice bázových funkcí i a j. Z nich utvoříme matici $\mathbf{O}$.

Co se stavy/funkcemi? Obecný stav $|\psi\rangle$ můžeme napsat jako součet přes stavy báze $|\psi\rangle = \sum_i c_i|i\rangle$. Pokud, stejně jako s maticí, obložíme rovnici zleva $\langle j|$, dostaneme

$$\langle j|\psi\rangle = \sum_i c_i\langle j|i\rangle = \sum_i c_i\delta_{ji} = c_j\,.$$

Použitím všech možných stavů báze $|j\rangle$ dostaneme všechna možná c_j, ta uspořádáme a vznikne nám vektor. Tedy operátory a stavy/funkce můžeme převést na matice a vektory.

▷ Vypočtěte maticovou reprezentaci operátorů $\hat{A}$ a $\hat{B}$ v námi používané bázi. Jsou matice hermitovské?

S maticemi operátorů můžeme provádět věci, které známe z lineární algebry. Například diagonalizaci.

▷ Najděte vlastní čísla matice $\mathbf{A}$.

▷ Najděte vlastní vektory matice $\mathbf{A}$ (včetně normalizace).

▷ Proveďte rotaci do báze nových vlastních stavů pro subprostor definovaný stavy s vlastnímu čísly ± 1.

▷ Převeďte vlastní vektory na vlastní funkce použitím $|\psi\rangle = \sum_i c_i|i\rangle$. Opět jen pro vlastní čísla ± 1. Ověřte normalizaci a ortogonalitu těchto nových stavů.

Pojďme nyní k jinému operátoru, například $\hat{V} = V$, je to tedy konstantní funkce.

▷ Vypočtěte maticovou reprezentaci operátoru $\hat{V}$.

Nyní uvažujme operátor $\hat{A}^2$.

▷ Aplikujte $\hat{A}^2$ na stavy $|s_n\rangle$ a $|c_n\rangle$ pomocí reprezentace funkcemi ϕ.

Nyní uvažujme jen stavy $|s_1\rangle$ a $|c_1\rangle$.

▷ Jak vypadá maticová reprezentace $\hat{A}$ v tomto prostoru?

▷ Aplikujte dvakrát matici $\mathbf{A}$ na ony dva stavy.

▷ Vypočtěte matici $\mathbf{A}^2$, aplikujte na oba stavy a ověřte, že je výsledek shodný.