Κβαντική Φυσική Ι

Ενότητα 16: Αναπαράσταση τελεστών με μήτρες

Ανδρέας Τερζής

Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής

Σκοπός ενότητας

- Σκοπός της ενότητας είναι να αναπτύξει την μεθοδολογία εύρεσης ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων με την βοήθεια των μητρών. Η μεθοδολογία θα γίνει εμφανής μέσω μιας απλής εφαρμογής.

Περιεχόμενα ενότητας

- Εφαρμογή με θέμα την εύρεση ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων τελεστή χωρίς την χρήση μητρών.
- Η ίδια εφαρμογή με χρήση μητρών.

Εκφώνηση εφαρμογής

- Θεωρούμε ένα κβαντικό σύστημα δύο επιπέδων, δηλαδή έχουμε δύο ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας,

$\widehat{\mathrm{H}}\Psi_1 = \mathrm{E}_1\Psi_1$ και $\widehat{\mathrm{H}}\Psi_2 = \mathrm{E}_2\Psi_2$. Για τον τελεστή $\widehat{\mathrm{A}}$ γνωρίζουμε τις εξής ιδιότητές του

$$\widehat{\mathrm{A}}\Psi_1 = \alpha\Psi_1 + \mathrm{b}\Psi_2 \quad (1)$$
$$\widehat{\mathrm{A}}\Psi_2 = \mathrm{b}\Psi_1 + \alpha\Psi_2 \quad (2)$$

Ζητάμε να βρούμε τις ιδιοκαταστάσεις του $\widehat{\mathrm{A}}$.

1ος τρόπος λύσης

- Έστω Φ_1, Φ_2 οι ιδιοκαταστάσεις του $\widehat{\mathrm{A}}$. Τότε θα πρέπει $\widehat{\mathrm{A}}\Phi_1 = \alpha_1\Phi_1, \widehat{\mathrm{A}}\Phi_2 = \alpha_2\Phi_2$.
- Προσθέτουμε τις σχέσεις (1) και (2) και βρίσκουμε

$$\widehat{\mathrm{A}}\Psi_1 + \widehat{\mathrm{A}}\Psi_2 = (\alpha\Psi_1 + \mathrm{b}\Psi_2) + (\mathrm{b}\Psi_1 + \alpha\Psi_2)$$
$$= (\alpha + b)\Psi_1 + (\alpha + \mathrm{b})\Psi_2 \Rightarrow$$
$$\widehat{\mathrm{A}}(\Psi_1 + \Psi_2) = (\alpha + b)(\Psi_1 + \Psi_2)$$

- Άρα η $(\Psi_1 + \Psi_2)$ είναι ιδιοκατάσταση του $\widehat{\mathrm{A}}$ με ιδιοτιμή $(\alpha + b)$.

Έλεγχος νορμαλισμού

- Ελέγχουμε αν η $(\Psi_1 + \Psi_2)$ είναι νορμαλισμένη και έχουμε:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_1 + \Psi_2)^* (\Psi_1 + \Psi_2) dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} ({\Psi_1}^* \Psi_1 + {\Psi_1}^* \Psi_2 + {\Psi_2}^* \Psi_1 + {\Psi_2}^* \Psi_2) dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} {\Psi_1}^* \Psi_1 dx + \int_{-\infty}^{\infty} {\Psi_2}^* \Psi_2 dx = 2$$

- Άρα η $(\Psi_1 + \Psi_2)$ δεν είναι νορμαλισμένη. Προφανώς η νορμαλισμένη ιδιοσυνάρτηση θα είναι η $(\Psi_1 + \Psi_2)/\sqrt{2}$ καθώς $\int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_1 + \Psi_2)^* (\Psi_1 + \Psi_2) dx = 2 \Rightarrow$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\Psi_1 + \Psi_2}{\sqrt{2}}\right)^* \left(\frac{\Psi_1 + \Psi_2}{\sqrt{2}}\right) dx = 1.$$

Ολοκλήρωση διαδικασίας

- Αν αφαιρέσουμε τις σχέσεις (1) και (2) βρίσκουμε
$$\widehat{\mathrm{A}}(\Psi_1 - \Psi_2) = (\alpha - b)(\Psi_1 - \Psi_2)$$
- Δηλαδή η $(\Psi_1 - \Psi_2)$ είναι ιδιοκατάσταση του Α με ιδιοτιμή $(\alpha - b)$.
- Με την ίδια διαδικασία βλέπουμε ότι η νορμαλισμένη ιδιοσυνάρτηση είναι η $(\Psi_1 - \Psi_2)/\sqrt{2}$

Αναπαράσταση τελεστή με μορφή μήτρας

- Φυσικά τα πράγματα δεν είναι πάντοτε τόσο απλά, γι' αυτό θα υϊοθετήσουμε μια πιο γενική μεθοδολογία για την εύρεση των ιδιοσυναρτήσεων.
- Πριν την αναπτύξουμε θα δούμε πώς αναπαρίσταται ένας τελεστής με μήτρα. Και ας πάρουμε τον τελεστή του παραδείγματός μας.
- Τα στοιχεία της μήτρας που του αντιστοιχεί θα δίνονται από την σχέση $\mathrm{A}_{nm} = \left(\Psi_n, \hat{A}\Psi_m\right)$, αν τον αναπαραστήσουμε χρησιμοποιώντας τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας ή $\mathrm{A}_{nm} = \left(\Phi_n, \hat{A}\Phi_m\right)$,αν χρησιμοποιήσουμε τις δικές του ιδιοκαταστάσεις.

Μορφές αναπαράστασης του $\hat{A}$

- Με βάση τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας ξεκινάμε και έχουμε:

$$A_{11} = \left(\Psi_1, \hat{A}\Psi_1\right) = (\Psi_1, \alpha\Psi_1 + b\Psi_2) =$$
$$\alpha(\Psi_1, \Psi_1) + b(\Psi_1, \Psi_2) = \alpha$$
$$A_{12} = \left(\Psi_1, \hat{A}\Psi_2\right) = (\Psi_1, b\Psi_1 + \alpha\Psi_2) = b$$

Συνεχίζοντας με τον ίδιο τρόπο και για τα υπόλοιπα στοιχεία βρίσκουμε ότι η αντίστοιχη μήτρα είναι

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & b \\ b & a \end{pmatrix}$$

- Αν τώρα γνωρίζουμε τις ιδιοκαταστάσεις του $\hat{A}$ και τον αναπαραστήσουμε με βάση αυτές θα είναι

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 \\ 0 & \alpha_2 \end{pmatrix}$$

με α_1, α_2 να είναι οι ιδιοτιμές.

$2^{ος}$ τρόπος επίλυσης

❖ Παρατήρηση: Όταν ο τελεστής αναπαρίσταται στην βάση των ιδιοκαταστάσεών του η αντίστοιχη μήτρα θα είναι διαγώνια. Η διαγώνιος θα αποτελείται από τις ιδιοτιμές του τελεστή.

- Στην περίπτωσή μας οι ιδιοσυναρτήσεις τις ενέργειας είναι το δεδομένο άρα ο τελεστής μας έχει την μορφή $\mathrm{A} = \begin{pmatrix} \alpha & b \\ b & a \end{pmatrix}$.

Διαγωνοποίηση

- Εφ’ όσον είπαμε ότι αν η μήτρα είναι διαγώνια, στην διαγώνιο βρίσκονται οι ιδιοτιμές, τότε για να βρεθούν, αρκεί να διαγωνοποιήσουμε τον πίνακα.
- Η συνθήκη διαγωνοποίησης είναι $\det(A-\lambda\mathrm{I})=0$. Οι ιδιοτιμές είναι οι λ και I είναι ο μοναδιαίος πίνακας, δηλ. $\mathrm{I}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$.
- Θα έχουμε $A-\lambda\mathrm{I}=\begin{pmatrix}\alpha & b\\ b & a\end{pmatrix}-\lambda\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha-\lambda & b\\ b & a-\lambda\end{pmatrix}$.
- Άρα $\det(A-\lambda\mathrm{I})=0 \Rightarrow (\alpha-\lambda)^2-b^2=0$
- Λύνοντας ως προς λ βρίσκουμε ότι οι ιδιοτιμές είναι

$$\lambda_1=\alpha+b, \lambda_2=\alpha-b.$$

Άρα ο πίνακας A στην βάση των ιδιοκαταστάσεών του θα είναι

$$\mathrm{A}=\begin{pmatrix}\alpha+\mathrm{b} & 0\\ 0 & a-b\end{pmatrix}$$

Αναπαράσταση ιδιοσυναρτήσεων

- Τις ιδιοσυναρτήσεις Φ_1 και Φ_2 μπορούμε να τις εκφράσουμε σαν ένα γραμμικό συνδυασμό των ιδιοσυναρτήσεων της ενέργειας που είναι ένα γνωστό δεδομένο. Δηλαδή θα έχουμε

$$\Phi_1 = d_{11}\Psi_1 + d_{12}\Psi_2,$$
$$\Phi_2 = d_{21}\Psi_1 + d_{22}\Psi_2$$

- Το μόνο που μένει να προσδιορίσουμε είναι οι συντελεστές.
- Υπό μορφή στήλης τα ζητούμενα ιδιοδιανύσματα αναπαρίστανται ως $\Phi_1 = \begin{pmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{pmatrix}, \Phi_2 = \begin{pmatrix} \mathrm{d}_{21} \\ d_{22} \end{pmatrix}$

Εύρεση ιδιοδιανυσμάτων

- Για να υπολογίσουμε το πρώτο ιδιοδιάνυσμα χρειάζεται να λύσουμε το αλγεβρικό σύστημα

$$\begin{pmatrix} \alpha - \lambda_1 & b \\ b & a - \lambda_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow$$

$$\begin{pmatrix} -b & b \\ b & -b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{11} \\ d_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- Για να υπολογίσουμε το δεύτερο ιδιοδιάνυσμα χρειάζεται να λύσουμε το αλγεβρικό σύτημα

$$\begin{pmatrix} \alpha - \lambda_2 & b \\ b & a - \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{21} \\ d_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow$$

$$\begin{pmatrix} b & b \\ b & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{21} \\ d_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Τελική μορφή ιδιοσυναρτήσεων

- Κάνοντας τον πολλαπλασιασμό πινάκων στην πρώτη περίπτωση βλέπουμε ότι $-bd_{11} + bd_{12} = 0$ και

$bd_{11} - bd_{12} = 0$. Άρα καταλαβαίνουμε ότι $d_{11} = d_{12}$.

- Όμως θέλουμε οι συναρτήσεις μας να είναι και ορθοκανονικές, δηλαδή $(\Phi_1, \Phi_1) = 1 \Longrightarrow$

$$(d_{11}\Psi_1 + d_{12}\Psi_2, d_{11}\Psi_1 + d_{12}\Psi_2) = 1 \Longrightarrow$$
$$\mathrm{d}_{11}{}^2 + d_{12}{}^2 = 1$$

- Από τις δύο τελευταίες σχέσεις συμπεραίνουμε ότι

$$d_{11} = d_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

- Επομένως $\Phi_1 = \frac{\Psi_1 + \Psi_2}{\sqrt{2}}$.
- Με τον ίδιο ακριβώς τρόπο βρίσκουμε ότι $\Phi_2 = \frac{\Psi_1 - \Psi_2}{\sqrt{2}}$.

Τέλος Ενότητας

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών,Ανδρέας Τερζής ,2014. Ανδρέας Τερζής . «Κβαντική Φυσική Ι. Αναπαράσταση τελεστών με μήτρες». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2014. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/PHY1957/

Σημείωμα Αδειοδότησης