Ders 3

Metindeki ilgili bölümler §1.2, 1.3

Spin durumları

Şimdi, spin-1/2 parçacığın durumlarını modelliyoruz. Daha önce olduğu gibi, parçacığın, birim vektör $\mathbf{n}$ yönündeki spin vektörü bileşeninin $\pm\hbar/2$ olduğu bir durumunu $|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\pm\rangle$ ile gösteriyoruz. Durumların Hilbert uzayını şöyle tanımlarız. Seçilen herhangi bir $\mathbf{n}$ için $\mathcal{H}$'ın $|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\pm\rangle$ ile taranacağını ve farklı $\mathbf{n}$ seçimlerinin sadece farklı bazlar vereceğini kabul ederiz. Dolayısıyla, her $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektörü,

$$|\psi\rangle = a_+|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},+\rangle + a_-|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},-\rangle \tag{1}$$

vasıtasıyla açılabilir. Herbir $|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\pm\rangle$ kümesinin *ortonormal bir baz* oluşturduğunu varsayarak $\mathcal{H}$ üzerinde skalar çarpımı tanımlıyoruz :

$$\langle\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\pm|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\pm\rangle = 1, \qquad \langle\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\mp|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\pm\rangle = 0$$

Her vektör bu baz cinsinden açılabildiği için bu, herhangi iki vektörün skaler çarpımını tanımlar (alıştırma). (1)'deki açılım katsayılarının

$$a_\pm = \langle\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\pm|\psi\rangle$$

ile hesaplanabileceğine dikkat edin.

Bu, bir $|\psi\rangle$ vektörünün ortonormal (ON) $|i\rangle$ bazında, $i = 1, 2, \ldots, n$ açılmasına ait genel sonucun sadece bir örneğidir. Burada ON özelliği

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

formunu alır.

Elde

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|i\rangle, \qquad c_i = \langle i|\psi\rangle$$

var (alıştırma). Bundan dolayı,

$$|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\psi\rangle$$

yazabiliriz.

Spin bazlarından birini, mesela $|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n};\pm\rangle$'yi seçtiğimizde, vektörlerin bileşenlerini sütunlar olarak gösteririz. Dolayısıyla, baz

$$\langle\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\pm|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \langle\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\mp|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Daha genel olarak, açılımı

$$|\psi\rangle = a_+|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},+\rangle + a_-|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},-\rangle$$

olan bir vektör,

$$\langle\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\pm|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}$$

kolon vektörü ile temsil edilir.

$|\psi\rangle$'a karşılık gelen $\langle\psi|$ bra'sı satır vektörü oluşturan bileşenlere sahiptir :

$$\langle\psi|\mathbf{S}\cdot\mathbf{n},\pm\rangle = (a_+^* \quad a_-^*)\,.$$

Doğrusal operatörler

Kuantum mekaniği kurallarını kullanarak spin 1/2 sisteminin bir modelini kurmadaki bir sonraki adım, daha önce belirtilen iki boyutlu vektör uzayında, gözlenebilirleri (S_x,S_y,S_z) kendine eşlenik operatörler tarafından temsil etmektir. Bunu yapmak için bra-ket gösterimimizde doğrusal operatörlerle nasıl çalışılacağını açıklamamız gerekiyor. Doğrusal bir A operatörü $\mathcal{H}$'tan kendisine doğrusal bir dönüşümdür. Yani, herbir $|\psi\rangle$ vektörüne bir $A|\psi\rangle$ vektörünü ilişkilendirir. Bu ilişkilendirme ("dönüşüm", "operasyon") doğrusal olmak zorundadır :

$$A(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = aA|\alpha\rangle + bA|\beta\rangle\,.$$

Eğer vektörleri sütunlar olarak düşünürseniz, doğrusal bir operatör kare matris olarak temsil edilir. Bunu birazdan detaylıca açıklayacağım. Bildiğiniz gibi, eğer bir satır vektörünü alıp aynı büyüklükteki bir sütun vektörü ile soldan çarparsanız bir kare matris, yani bir doğrusal operatör elde edersiniz. Daha genel olarak, bir $|\alpha\rangle$ ket'i ve bir $\langle\beta|$ bra'sı verildiğinde doğrusal bir operatörü

$$A = |\alpha\rangle\langle\beta|$$

ile tanımlayabiliriz. Bu

$$A|\psi\rangle = |\alpha\rangle\langle\beta|\psi\rangle$$

anlamına gelir. Bunun doğrusal bir operatör olduğunu bir alıştırma olarak kolayca kontrol edebilirsiniz. Bu operatör "dış operatör" veya "tensör operatör" olarak anılır.

$$(A+B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle$$

ile tanımlanan iki doğrusal operatörün toplamının

$$(cA)|\psi\rangle = cA|\psi\rangle$$

skalar çarpımında olduğu gibi yine doğrusal bir operatör olduğunu kolayca görebilirsiniz. Dolayısıyla, doğrusal operatör kümesi bir vektör uzayı oluşturur. Dahası,

$$(AB)|\psi\rangle = AB|\psi\rangle$$

ile tanımlanan iki operatörün çarpımı doğrusal bir operatördür. Böylece, doğrusal operatör kümesi bir cebir oluşturur.

Her doğrusal operatörün $|i\rangle$ ortonormal bazı (ONB) cinsinden yazılabileceğini görmek zor değildir.

$$A = \sum_{ij} A_{ij}|i\rangle\langle j|$$

burada

$$A_{ij} = \langle i|A|j\rangle$$

$|i\rangle$ ile sağlanan bazda A'nın matris elemanları olarak adlandırılır. * Bunu görmek için, basitçe $|\psi\rangle$ ve $A|\psi\rangle$ vektörlerini ONB'de açın

$$A|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|A|\psi\rangle = \sum_{ij} |i\rangle\langle i|A|j\rangle\langle j|\psi\rangle = \sum_{ij} A_{ij}|i\rangle\langle j|\psi\rangle$$

Bunun çok önemli bir örneği

$$I|\psi\rangle = |\psi\rangle, \qquad \forall|\psi\rangle$$

ile tanımlanan birim (özdeşlik) operatördür. Bu,

$$I = \sum_i |i\rangle\langle i| \tag{2}$$

ayrışımına sahiptir (iyi bir alıştırma!). Çeşitli denklemleri manipule etmek için her zaman bu "birim çözümlemesi" kullanılır. Bunu unutmayın! Basit bir örnek olarak, 2'yi oldukça aşikar bir özellik şeklinde bir baz formülünde kullanabilirsiniz :

$$|\psi\rangle = I|\psi\rangle = \left(\sum_i |i\rangle\langle i|\right)|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\psi\rangle \text{ !}$$

Aslında A_{ij} dizisi, A doğrusal operatörünün verilen bir bazdaki matris temsilidir. Bunun nasıl çalıştığını görmek için, doğrusal bir operatörünün bir vektör üzerindeki etkisini düşünelim ve ortonormal $|i\rangle$ bazında açtığımızda matris çarpımının tanıdık kurallarının ortaya çıkışını görelim. İzleyin,

$$\begin{aligned}
\langle i|A|\psi\rangle &= \langle i|\sum_{jk} A_{jk}|j\rangle\langle k|\psi\rangle \\
&= \sum_{jk} A_{jk}\langle i|j\rangle\langle k|\psi\rangle \\
&= \sum_k A_{ik}\langle k|\psi\rangle.
\end{aligned}$$

*Daha genel olarak, $\langle\alpha|A|\beta\rangle$ formundaki herhangi bir skalar, matris elemanı olarak anılır.

Son satır $A|\psi\rangle$'ın i. bileşeninin – $A|\psi\rangle$'ı temsil eden sütun vektörünün i. elemanı – nasıl A_{ik} dizisi ile $\langle k|\psi\rangle$ sütun vektörünün matris çarpımı tarafından verildiğini gösteriyor. Eşit bir biçimde (mütesaviyen) matris çarpımının, doğrusal operatörlerin çarpımı yoluyla nasıl tanımlandığını görebiliriz. AB operatörünün matris elemanlarını düşünün :

$$\begin{aligned}\langle i|AB|k\rangle &= \sum_j \langle i|A|j\rangle\langle j|B|k\rangle \\ &= \sum_j A_{ij}B_{jk}\end{aligned}$$

Bir A doğrusal operatörü verildiğinde özvektörler ve özdeğerler kavramını hatırlarız. Bunlar,

$$A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

denkleminin λ ve $|\lambda\rangle$ çözümleridir. Sıfır vektörü bir özvektör olarak düşünülmez. Bir λ özdeğerine karşılık gelen $|\lambda\rangle$ özvektörünün tek bir tane olmadığını dikkate alın. Çünkü, bu özvektörün herhangi bir skalar katı da aynı özdeğerli bir özvektördür. Bununla beraber, bu tip özvektörlerin lineer bağımlı olmadığına dikkat edin. Verilen bir özdeğer için birden fazla lineer bağımsız özvektör bulunabilir veya bulunmayabilir. Bulunduğu durumda, özdeğerin *dejenere* olduğu söylenir. Ayrıca, özdeğerlerin sayısının ve özuzayın boyutunun 0'dan Hilbert uzayının (hala sonlu) boyutuna kadar değişebileceğini not edin.

Son olarak, $\mathcal{H}$ üzerindeki A doğrusal operatörünün dual vektör uzayında, yani bra'ların uzayında, da bir doğrusal operasyon tanımladığını not edin. Bu operasyon,

$$\langle\psi| \rightarrow \langle\psi|A$$

ile gösterilir. $\langle\psi|A$'yı tanımlamak için ket'ler üzerine (doğrusal bir fonksiyon olarak) nasıl etkiyeceğini söylemeliyiz; tanım

$$(\langle\psi|A)|\phi\rangle = \langle\psi|A|\phi\rangle$$

dir. Bir alıştırma olarak, tanımlandığı gibi $\langle\psi|A$'ın gerçekten doğrusal bir fonksiyon, yani, bir bra ve A'nın bra'lar üzerine doğrusal bir operasyon olduğunu kontrol edebilirsiniz.

Kendine eşlenik operatörler

Sonlu boyutlu Hilbert uzayında bir A doğrusal operatörü, A'nın eşleniği olarak adlandırılan bir $A^\dagger$ operatörü tanımlar. Bu, bütün ket'ler için

$$\langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|A|\psi\rangle^*$$

sağlanacak şekilde tanımlanır. Bunun, matris elemanları, A'nınkinin kompleks eşlenik-transpozu olan $A^\dagger$ operatörünü tanımlamaya eşdeğer olduğunu not edin.

Eğer

$$A^\dagger = A$$

ise A'nın *kendine eşlenik* veya *Hermityen* olduğunu söyleriz.

Bir Hermityen operatörünün gerçel özdeğerlere sahip olması ve *farklı* özdeğerlere karşılık gelen özvektörlerin ortogonal olması gerektiği, lineer cebirin standart sonucudur. Başlangıç ispatları için ders kitabınıza başvurun. Lineer cebirin son derece önemli bir teoremi, bir Hermityen operatörün her zaman ortonormal özvektör bazı kabul edeceğini söyler. Tipik olarak, özdeğer ve özvektörleri göstermek için

$$A|i\rangle = a_i|i\rangle$$

şeklinde bir notasyon kullanacağız.