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 skalar 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 işlemciler

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 işlemciler tarafından temsil etmektir. Bunu yapmak için bra-ket gösterimimizde doğrusal işlemcilerle nasıl çalışılacağını açıklamamız gerekiyor. Doğrusal bir A işlemcisi $\mathcal{H}$'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 işlemci 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 işlemci elde edersiniz. Daha genel olarak, bir $|\alpha\rangle$ ket'i ve bir $\langle\beta|$ bra'sı verildiğinde doğrusal bir işlemciyi

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

ile tanımlayabiliriz. Bu

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

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

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

ile tanımlanan iki doğrusal işlemcinin toplamının

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

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

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

ile tanımlanan iki işlemcinin çarpımı doğrusal bir işlemcidir. Böylece, doğrusal işlemci kümesi bir cebir oluşturur.

Her doğrusal işlemcinin $|i\rangle$ 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) işlemcisidir. 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 :

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

Aslında A_{ij} dizisi, A doğrusal işlemcisinin verilen bir bazdaki matris temsilidir. Bunun nasıl çalıştığını görmek için, doğrusal bir işlemcinin 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 işlemcilerin çarpımı yoluyla nasıl tanımlandığını görebiliriz. AB işlemcisinin 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 işlemcisi 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 işlemcisinin 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 işlemciler

Sonlu boyutlu Hilbert uzayında bir A doğrusal işlemcisi, A'nın eşleniği olarak adlandırılan bir $A^\dagger$ işlemcisi 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 $A^\dagger$ işlemcisini tanımlamaya eşdeğer olduğunu not edin.

Eğer

$$A^\dagger = A$$

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

Bir Hermitesel işlemcinin 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 Hermitesel işlemcinin 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.