

فضاهای برداری و ریاضیات مکانیک کوانتومی

عملگرهای یکانی در مکانیک کوانتومی

حسین شناور

گروه فیزیک، دانشکده علوم



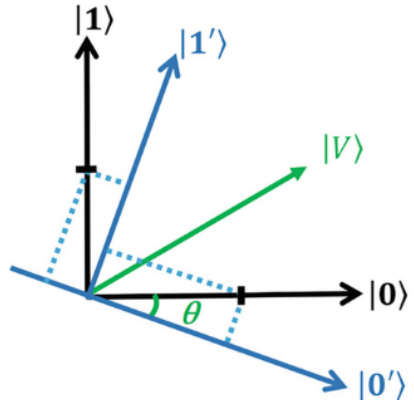
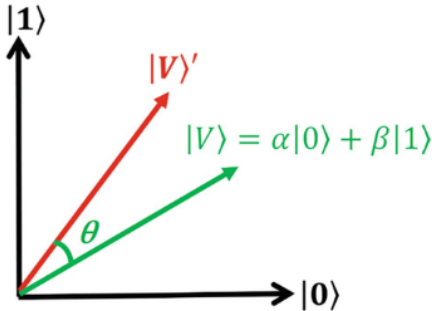
دانشگاه هرمزگان

- خواهشمندم هرگونه اشتباه نوشتاری، مفهومی و یا محاسباتی را به آدرس ایمیل من ارسال کنید تا در ویرایش های بعدی تصحیحات لازم اعمال شوند:
h.shenavar@gmail.com
- از همکاران و دانشجویان محترم در دانشگاه هرمزگان، برای همفکری ها، حمایت ها و گوشزد نمودن نکات مفید سپاسگزارم.
- برای ضبط این درس ها از نرم افزار Camtasia استفاده شده است.

- ۱ عملگرهای یکانی در مکانیک کوانتومی
- تبدیل های یکانی
 - تبدیل های یکانی در عمل

اهداف این جلسه

- در این جلسه می خواهیم درباره ویژگی های تبدیلات یکانی بحث کنیم. همچنین می خواهیم بدانیم چرا این تبدیلات در مکانیک کوانتومی از اهمیت اساسی برخوردار هستند. مثلاً عملگرهای جابجایی و تحول زمانی و چند عملگر بسیار مهم دیگر با استفاده از تبدیلات یکانی توصیف می شوند. همچنین، تقارن های هامیلتونی توسط گروهی از تبدیلات یکانی بیان می شوند.



یادآوری تبدیلات یکانی از ماتریس ها

- یک تبدیل یکانی تبدیلی است که وارون آن با مزدوج هرمیتی اش برابر باشد:

$$U^{-1} = U^{\dagger}$$

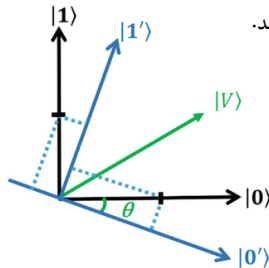
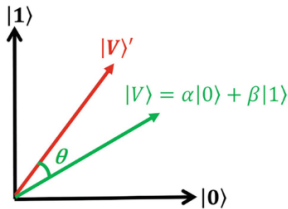
البته گاهی اوقات این تعریف به صورت دیگری هم نوشته می شود. یادآوری می کنیم که وارون یک عملگر، عملگری است که با ضرب آن در عملگر اصلی به عملگر همانی ۱ برسیم:

$$X^{-1}X = XX^{-1} = I$$

حال با توجه به تعریف ابتدایی عملگر یکانی، به تعریف معادلی برای یکانی بودن می رسم:

$$U^{\dagger}U = UU^{\dagger} = I$$

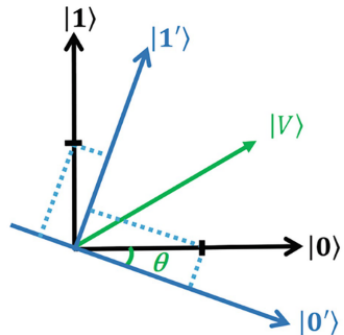
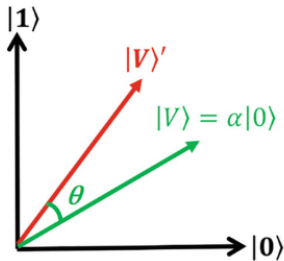
پس این دو تعریف معادل هستند.



اهمیت تبدیلات یکانی در مکانیک کوانتومی

توجه: اهمیت اساسی تبدیلات یکانی در مکانیک کوانتومی در این نکته نهفته است: تبدیلات یکانی مقدار ضرب داخلی را حفظ می کنند. استفاده از تبدیلات یکانی به ما اجازه می دهد که یک حالت مشخص را تحول دهیم، در فضا جابجا کنیم و ... بدون اینکه بهنجاربودن (نرمال بودن) حالت را تغییر دهیم. همین!

یادآوری: تبدیلات متعامد (orthogonal transformation) مقدار ضرب داخلی بردارها در فضای سه بعدی حقیقی را تحت دوران و ... حفظ می کردند. تبدیلات یکانی تعمیم تبدیلات متعامد در فضای مختلط (فضای هیلبرت) هستند.



عملگرهای یکانی

- دلیل دیگر اهمیت تبدیلات یکانی این است که می توان از یکانی ها برای توصیف تبدیل بین پایه های یکامتعامل استفاده کرد. یادآوری می شود که تبدیلات دورانی این کار را در فضای حقیقی بردارها انجام می دهند؛ ولی، تبدیلات یکانی این عملیات را به فضای مختلط گسترش می دهند.
- فرض کنید تابع ψ در پایه های یکامتعامل φ به صورت زیر بسط داده شده است:

$$\psi = \sum_{\mu} c_{\mu} \varphi_{\mu} = \left(\sum_{\mu} |\varphi_{\mu}\rangle \langle \varphi_{\mu}| \right) |\psi\rangle$$

حال می خواهیم این بسط را به پایه های متفاوتی (مانند φ') بسط دهیم. برای اینکار توجه می کنیم که می توان پایه های قدیم φ را بر حسب پایه های جدید φ' به صورت زیر بسط داد:

$$\varphi_{\mu} = \sum_{\nu} u_{\nu\mu} \varphi'_{\nu} = \left(\sum_{\nu} |\varphi'_{\nu}\rangle \langle \varphi'_{\nu}| \right) |\varphi_{\mu}\rangle = \sum_{\nu} \langle \varphi'_{\nu} | \varphi_{\mu} \rangle \varphi'_{\nu}$$

دقت کنید که در عبارت سوم از رابطه به ستار $\sum_{\nu} |\varphi'_{\nu}\rangle \langle \varphi'_{\nu}| = \mathbb{I}$ استفاده کرده ایم. همچنین، ضرایب بسط هستند که تشکیل یک ماتریس به نام U می دهند. با مقایسه عبارت دوم و عبارت چهارم در روابط بالا می بینیم که $u_{\nu\mu}$ در واقع برابر است با

$$u_{\nu\mu} = \langle \varphi'_{\nu} | \varphi_{\mu} \rangle$$

عملگر تبدیل یکانی

- حال با جایگذاری معادله دوم در معادله اول داریم

$$\psi = \sum_{\mu} c_{\mu} \sum_{\nu} u_{\nu\mu} \varphi'_{\nu} = \sum_{\nu} \left(\sum_{\mu} u_{\nu\mu} c_{\mu} \right) \varphi'_{\nu} = c'_{\nu} \varphi'_{\nu}$$

از مقایسه عبارت سوم با عبارت چهارم در روابط بالا می فهمیم که ضرایب بسط c' در دستگاه پرایم دار با ضرایب بسط c در دستگاه قدیم (بدون پرایم) مرتبط هستند و این ارتباط از طریق ماتریس U برقرار می شود. اگر ماتریس ضرایب c' و c را به عنوان بردارهای ستونی در نظر بگیریم، آنگاه داریم

$$c' = U c$$

یادآوری: عناصر ماتریس U همان $u_{\nu\mu}$ هستند.

- حال فرض کنید که ضرایب تبدیل پایه های فضا از دستگاه بدون پرایم به دستگاه پرایم دار (وارون فرایند بالا) با عناصر $v_{\nu\mu}$ نشان داده می شود. در این صورت داریم

$$\varphi'_{\mu} = \sum_{\nu} v_{\nu\mu} \varphi_{\nu} = \sum_{\nu} \langle \varphi_{\nu} | \varphi'_{\mu} \rangle \varphi_{\nu}$$

برای درک بهتر با رابطه $\varphi_{\mu} = \sum_{\nu} u_{\nu\mu} \varphi'_{\nu}$ مقایسه کنید. عناصر ماتریس V عبارتند از

$$v_{\nu\mu} = \langle \varphi_{\nu} | \varphi'_{\mu} \rangle = (U^*)_{\mu\nu} = (U^{\dagger})_{\nu\mu} \quad \Rightarrow \quad V = U^{\dagger}$$

اثبات یکانی بودن تبدیل

- حال فرض کنید تابع ψ را در پایه های قدیم (بدون پرایم) نوشته ایم که با ماتریس ضرایب $\mathbf{c}$ توصیف می شود. سپس، این پایه ها را به پایه های جدید (پرایم دار) تبدیل می کنیم که با ماتریس ضرایب $\mathbf{c}'$ توصیف می شود. آنگاه پایه ها را دوباره به دستگاه بدون پرایم برمی گردانیم. دلیل اینکار بزودی معلوم می شود!

این دو تبدیل متوالی با رابطه ماتریسی زیر توصیف می شوند:

$$\mathbf{c} = \mathbf{V} \mathbf{U} \mathbf{c} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} \mathbf{c}$$

از برابری عبارت اول و آخر متوجه می شویم که $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{I}$ و بنابراین ماتریس $\mathbf{U}$ باید یک ماتریس یکانی باشد.

- جمع بندی: تبدیلی که بسط یک بردار مانند $\mathbf{c}$ در پایه های یکامتعامل $\{\varphi_\mu\}$ را به برداری دیگر مانند $\mathbf{c}'$ در پایه های یکامتعامل $\{\varphi'_\mu\}$ تبدیل می کند، توسط رابطه $\mathbf{c}' = \mathbf{U} \mathbf{c}$ توصیف می شود که در آن ماتریس $\mathbf{U}$ یکانی است. عناصر این ماتریس یکانی از رابطه $U_{\nu\mu} = \langle \varphi'_\nu | \varphi_\mu \rangle$ به دست می آیند. بنابراین، تبدیل بین پایه های یکامتعامل تبدیل یکانی نامیده می شود.

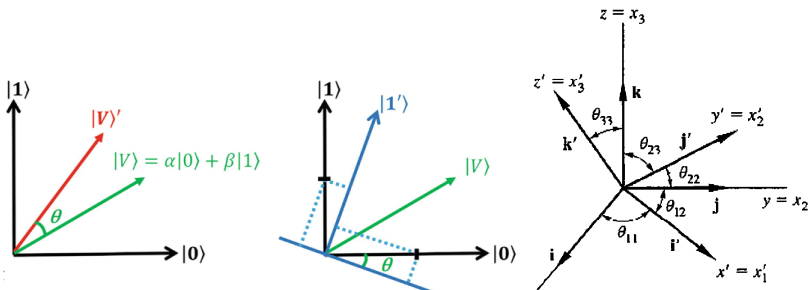
مقایسه تبدیل یکانی با تبدیلات در صفحه

- احتمالا تبدیل بین بردارهای حقیقی در فضای دو بعدی یعنی $A' = SA$ را به یاد دارید. تبدیل یکانی $c' = Uc$ تعمیم این تبدیل به فضای مختلط n بعدی است.

- در زیر ماتریس دوران در دو بعد را با ماتریس تبدیل یکانی در بعد دلخواه مقایسه کنید.

$$S = \begin{pmatrix} \hat{e}'_1 \cdot \hat{e}_1 & \hat{e}'_1 \cdot \hat{e}_2 \\ \hat{e}'_2 \cdot \hat{e}_1 & \hat{e}'_2 \cdot \hat{e}_2 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} \langle \varphi'_1 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi'_1 | \varphi_2 \rangle & \dots \\ \langle \varphi'_2 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi'_2 | \varphi_2 \rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

در واقع در نمادگذاری دیراک ضرب داخلی بین پایه های فضا را به $\hat{e}'_i \cdot \hat{e}_j$ را به صورت $\langle \hat{e}'_i | \hat{e}_j \rangle$ می نویسیم. در نتیجه، عملا هر دو تبدیل شکل یکسانی خواهند داشت.



مثال

- فرض کنید یک فضای هیلبرت با پنج پایه یکامتعاملد زیر بر روی یک کره تعریف می شود.

$$\chi_1 = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi, \quad \chi_2 = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin \theta \cos \theta \sin \varphi,$$

$$\chi_3 = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi, \quad \chi_4 = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi)$$

$$\chi_5 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1).$$

در اینجا θ و φ مختصات قطبی کروی هستند. فرض کنید ضرب داخلی در این فضا به صورت زیر تعریف شده است.

$$\langle f | g \rangle = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi f^*(\theta, \varphi) g(\theta, \varphi)$$

تمرین: نشان دهید که این پایه ها یکامتعاملد هستند. مثلاً حاصلضرب $\langle \chi_1 | \chi_2 \rangle$ ، $\langle \chi_1 | \chi_3 \rangle$ و $\langle \chi_2 | \chi_5 \rangle$ را محاسبه کنید.

مثال

این فضا را می توان با استفاده از پایه های یکامتعامل زیر نیز بسط داد.

$$\chi'_1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}, \quad \chi'_2 = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi},$$

$$\chi'_3 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}, \quad \chi'_4 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi},$$

$$\chi'_5 = \chi_5.$$

تمرین: ماتریس تبدیل U را بیابید. برای اینکار باید مولفه های $u_{\nu\mu} = \langle \chi'_\nu | \chi_\mu \rangle$ را بیابیم.
مثلا داریم:

$$u_{22} = \langle \chi'_2 | \chi_2 \rangle = \frac{15}{4\pi\sqrt{2}} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin^2 \theta \cos^2 \theta e^{+i\varphi} \sin \varphi$$

$$= \frac{15}{4\pi\sqrt{2}} \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{+i\varphi} \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}$$

از رابطه زیر نیز استفاده شده

$$\int_0^{2\pi} e^{in\varphi} d\varphi = 2\pi \delta_{n0}$$

$$= \frac{15}{4\pi\sqrt{2}} \left(\frac{4}{15} \right) \frac{-2\pi}{2i} = \frac{i}{\sqrt{2}}.$$

مثال

• یک مولفه دیگر از ماتریس تبدیل یکانی

$$u_{21} = \langle \chi_2' | \chi_1 \rangle = \frac{15}{4\pi\sqrt{2}} \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{+i\varphi} \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2}$$

$$= \frac{15}{4\pi\sqrt{2}} \left(\frac{4}{15} \right) \frac{2\pi}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

پس از محاسبات مفصل می توان ماتریس تبدیل U را به صورت زیر یافت:

$$U = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & -i/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

دقت کنید که i آمین ستون ماتریس U مولفه های χ_i در دستگاه پرایم دار را به ما خواهد داد.
مثلا برای χ_1 داریم:

$$\sqrt{\frac{15}{4\pi}} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi} \right)$$

تبدیل های یکانی متعامد

همانطور که تبدیل های دوران متوالی بر روی یک بردار ممکن است، می توان تبدیل های یکانی متوالی را نیز بر روی بردارها در فضای هیلبرت اعمال کرد و نتیجه نهایی را یافت. البته باید توجه کنیم که تبدیلات از راست به چپ عمل می کنند. مثلاً در تبدیل زیر

$$\mathbf{c}' = U_3 U_2 U_1 \mathbf{c}$$

در ابتدا تبدیل یکانی U_1 بر روی بردار $\mathbf{c}$ اثر می کند. سپس تبدیل یکانی U_2 بر روی بردار $U_1 \mathbf{c}$ اثر کرده و در انتها نیز تبدیل یکانی U_3 بر روی بردار $U_2 U_1 \mathbf{c}$ عمل می کند تا بردار نهایی $\mathbf{c}'$ ساخته شود. به مثال زیر برای دوران ها توجه کنید.

$$R = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_x(\gamma) = \begin{bmatrix} \overset{\text{yaw}}{\cos \alpha} & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overset{\text{pitch}}{\cos \beta} & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overset{\text{roll}}{1} & 0 & 0 \\ 0 & \cos \gamma & -\sin \gamma \\ 0 & \sin \gamma & \cos \gamma \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \cos \alpha \cos \beta & \cos \alpha \sin \beta \sin \gamma - \sin \alpha \cos \gamma & \cos \alpha \sin \beta \cos \gamma + \sin \alpha \sin \gamma \\ \sin \alpha \cos \beta & \sin \alpha \sin \beta \sin \gamma + \cos \alpha \cos \gamma & \sin \alpha \sin \beta \cos \gamma - \cos \alpha \sin \gamma \\ -\sin \beta & \cos \beta \sin \gamma & \cos \beta \cos \gamma \end{bmatrix}$$

توجه: ماتریس های تبدیل در حالت کلی جابجا پذیر نیستند. بنابراین، ترتیب اعمال آنها را رعایت کنید.

نکات مهم این درس

انتظار این است که در انتهای این درس شما بتوانید عملگرهای یکانی در مکانیک کوانتومی و مهم ترین نتایج و کاربرد آنها را به درستی توضیح دهید. به ویژه انتظار می رود که بتوانید پرسش های زیر را پاسخ دهید:

۱ درباره اهمیت تبدیلات یکانی در بخش های مختلف فیزیک تحقیق کنید.

۲ تفاوت و شباهت تبدیل یکانی و تبدیل متعامد در چیست؟

۳ تعریف تبدیل یکانی را بنویسید.

۴ توضیح دهید که چطور می توان از عملگرهای یکانی برای تبدیل بین بردارهای پایه متفاوت در فضا استفاده کرد.

۵ ستون های ماتریس تبدیل یکانی بین دو مجموعه از پایه های مختلف چه کمیت هایی را نشان می دهند؟

۶ آیا تبدیل های یکانی جابجا پذیرند؟ آیا ترتیب تاثیر تبدیلات یکانی اهمیت دارد؟

اگر درباره هر کدام از مفاهیم یاد شده بالا مشکلی احساس می کنید، لطفا درس را یک بار دیگر مرور کنید.

فراموش نکنیم که بهترین راه برای درک و ”درونی سازی“ مفاهیم ریاضی و فیزیک، حل مساله است. به همین دلیل سعی کنید دانسته های خود را با حل سوالات محک زده و تقویت کنید. این مساله ها در انتهای هر درس ارائه می شوند.



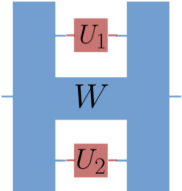
تمرین

- تمرین های بخش پنجم از فصل پنجم کتاب آرفکن و همکاران (ویرایش هفتم) را حل کنید.

مبحث بعدی: تبدیل عملگرها

- در جلسه بعد با تبدیلات عملگری و از جمله تبدیلات غیریکانی آشنا خواهیم شد.

If

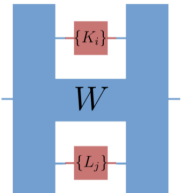


$$\forall U_1, U_2$$

$$= \text{---} \boxed{U} \text{---}$$

$$U := |0\rangle\langle 0| \otimes U_2 U_1 + |1\rangle\langle 1| \otimes U_1 U_2$$

Then



$$\forall \{K_i\}, \{L_j\}$$

$$= \text{---} \boxed{\{W_{ij}\}} \text{---}$$

$$W_{ij} := |0\rangle\langle 0| \otimes L_j K_i + |1\rangle\langle 1| \otimes K_i L_j$$

منابع

- ➊ Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide (7th Edition) by George B. Arfken, Hans J. Weber, Frank E. Harris, Academic Press (2012)
- ➋ Mathematical Methods for Physicists (6th Edition) by George B. Arfken, Hans J. Weber, Academic Press (2012)
- ➌ Mathematical Methods for Physics and Engineering, 3rd Edition, by K. F. Riley, M. P. Hobson, S. J. Bence , Cambridge University Press (2006)
- ➍ Mathematical Physics: A Modern Introduction to Its Foundations, 2nd ed, by Sadri Hassani (2013)
- ➎ Methods of Theoretical Physics I, II, Morse, Philip M. and Feshbach, Herman, McGraw-Hill (1953)
- ➏ <https://math.libretexts.org/>
- ➐ <https://www.youtube.com/@eigenchris>

با سپاس از توجه شما

