

درس نامه مکانیک کوانتومی

درس سوم: آشنایی با ساختمان ریاضی مکانیک کوانتومی

۱ مقدمه

در درس گذشته دیدیم که دو فرمول بندی به ظاهر متفاوت از مکانیک جدید یکی توسط هایزنبرگ موسوم به مکانیک ماتریسی و دیگری توسط شرودینگر موسوم به مکانیک موجی، داده شد. خیلی زود معلوم شد که آنچه که هایزنبرگ و شرودینگر به تنهایی دیده بودند، در واقع دو تصویر از دوزاویه متفاوت از یک ساختمان واحد بود که آن را اکنون به نام مکانیک کوانتومی می شناسیم. کسی که توانست با ترکیب این دو تصویر مجزا تصویر کامل ساختمان را بدست آورد، کسی نبود جز پاول دیراک¹. بعد از دیراک نیز کسان دیگری به فهم ما از این ساختمان کمک کردند که مهم ترین آنها جان فون نویمان² ریاضی دان آمریکایی مجارستانی تبار بود.³ امروزه می دانیم که بنای معظم مکانیک کوانتومی بر اساس فضاهای برداری مختلط ساخته می شود.

بنابر اصول مکانیک کوانتومی، به هر حالت فیزیکی از یک دستگاه (خواه این دستگاه یک الکترون در اتم هیدروژن باشد، خواه متشکل از بیلیون ها ذره در یک جامد) یک بردار در یک فضای برداری مختلط نسبت داده می شود. به هر مشاهده پذیر مثل سرعت، مکان، انرژی و نظایر آن نیز یک عملگر روی این فضا نسبت داده می شود. نتایج اندازه گیری مشاهده پذیرها بر روی این دستگاه فیزیکی و هم چنین نحوه تحول دستگاه فیزیکی ما در طول زمان (یعنی همه آنچه که ما از «فهم» یک دستگاه فیزیکی می خواهیم، همه به زبان بردارها و عملگرهای این فضای برداری و روابط بین آنها بیان می شوند. یک بار که اصول موضوع را به دقت بنا کنیم (کاری که در فصل بعد انجام می دهیم) و و آشنایی کافی با مفاهیم و روش های نظریه جبر خطی پیدا کنیم (کاری که در این فصل انجام می دهیم) می توانیم امیدوار باشیم که پس از توسعه مفاهیم و روش های محاسبه (کاری که در بقیه فصل ها انجام خواهیم داد) شناخت کافی از سازوکارهای موجود در دستگاه های فیزیکی گوناگون از ساده ترین اتم یعنی اتم هیدروژن گرفته تا اتم های چند الکترونی، مولکول ها و سیستم های بس ذره ای دیگر پیدا کنیم.

روی واژه «فهم» چنانکه می بینید، تاکید کرده ایم. فیزیکدانان بعد از مکانیک کوانتومی عموماً و نه تماماً توقع خود را از این واژه تعدیل کرده اند. امروزه این واژه را به این معنا به کار می بریم که بتوانیم یک چارچوب نظری بنا کنیم که بتوانیم با استفاده از آن داده های تجربی و نتایج آزمایش های خود را برایشیای دنیای خارج از ذهن پیش بینی کنیم، حتی اگر نتوانیم دریابیم که

¹Paul Adrian Maurice Dirac

²John von Neumann

³فون نویمان علاوه بر نقشی که در تدوین ریاضیات مکانیک کوانتومی داشته است در خیلی جاهای دیگر ریاضیات نیز آثار مهم خلق کرده و به خصوص نقش او در معماری بنیادی کامپیوترهای قابل برنامه ریزی مهم است.



شکل ۱: پاول آدریان موریس دیراک، فیزیکدان انگلیسی که ساختمان نهایی مکانیک کوانتومی را تدوین کرد.

در ژرفای این اشیای فیزیکی نظیر الکترون و پروتون چه می گذرد. مکانیک کوانتومی با استفاده از همین چارچوب کنونی اش ما را قادر می سازد که بتوانیم با دقت بسیار زیاد، دقتی که در بعضی از حوزه های فیزیک به مقدار باورنکردنی ۱ در میلیارد میلیارد نیز می رسد، کمیت های قابل اندازه گیری در آزمایشگاه را به درستی محاسبه و پیش بینی کند. همین فهم که ممکن است به نظر ناقص برسد مبنای تمامی تکنولوژی مدرن و وسیع امروزه است. با این فهم ناقص است که ترانزیستورهای کامپیوتری که من با آن این کلمات را تایپ می کنم رفتار می کنند و صفحه مانیتوری که از بلورهای مایع ساخته شده اند حروف درخشان را نشان می دهند.

این تغییر در تعبیر واژه «فهم» ناشی از تنبلی ذهنی و یا انگیزه های دیگر نیست بلکه ناشی از این است که تا کنون تمام تلاش های پی گیرانه برای رفتن به ژرفای بیشتری از فهم طبیعت ناموفق بوده اند. مسلماً این تلاش در آینده نیز ادامه خواهد یافت. شاید روزی بتوانیم علاوه بر آنکه احتمال حضور الکترون در یک نقطه از درفضا را پیدا می کنیم، مسیری را نیز که الکترون طی کرده تا به آنجا برسد پیدا کنیم. تاریخ علم نشان می دهد که رسیدن به چنین ژرفایی از فهم طبیعت بدون گسترش حوزه مشاهدات مثلاً رفتن به انرژی های بسیار بیشتر، یا کندوکاو فاصله های زمانی و مکانی بسیار بسیار کوچک، امکان ناپذیر است. تا زمانی که حوزه مشاهدات خود را گسترش ندهیم و بخواهیم برای مشاهده ذرات از فوتون ها، الکترون ها و ذرات شناخته شده فعلی استفاده کنیم، اصل عدم قطعیت که در صحت تجربی آن هیچ گونه شک و تردیدی وجود ندارد مانع از مشاهده مسیر الکترون است. اماممکن است که با فرورفتن به اعماق طبیعت، روزی ذراتی را پیدا کنیم که مثلاً خاصیت دوگانه موج و ذره نداشته باشند. در این صورت اصل عدم قطعیت و ساختار کنونی مکانیک کوانتومی نیز تغییر خواهند کرد و چه بسا، نظریه جدید که تصحیحی از مکانیک کوانتومی خواهد بود امکان شناخت دقیق و ژرف تری را مثلاً از مسیر الکترون در درون اتم هیدروژن فراهم کند.

در تاریخ علم نمونه ای وجود ندارد که نشان دهد بدون گسترش حوزه مشاهدات تنها با انتقاد از نظریه های موجود و زیر و رو کردن آنها، نظریه بهتر و درست تری ظهور کرده باشد، مگر این که نظریه جدید ساختاری بسیار ساده تر از نظریه قبلی داشته



شکل ۲: جان فون نویمان، ریاضیدان مجارستانی تبار آمریکایی که سهم بسزایی در توسعه ریاضیات مکانیک کوانتومی داشته‌است.

باشد. حتی در مواقعی که این اتفاق افتاده است مثل آنچه که در جایگزینی مدل خورشید مرکزی کپرنیک و کپلر به جای نظریه زمین مرکزی بطلمیوس رخ داد، بازهم مشاهدات دقیق تر و وسیع تر در همان حوزه منظومه شمسی بسیار موثر بوده‌است. نظریه های رقیب مکانیک کوانتومی مثل نظریه بوهم⁴ که توسط دیوید بوهم⁵ پیشنهاد شده‌اند ساختار بمراتب پیچیده تری دارند و تاکنون نیز نتوانسته‌اند نتیجه‌ای تجربی را توضیح دهند که مکانیک کوانتومی از توضیح آن ناتوان باشد.

در فصل آینده به تفصیل به اصول موضوعه مکانیک کوانتومی و ساختمان این نظریه خواهیم پرداخت. در ادامه سعی می کنیم که نخست خود را با مبانی ریاضیات مورد نیاز یعنی جبرخطی آشنا کنیم. آشنایی ما با این موضوع کوتاه و در حد نیاز است و جایگزین یک آشنایی عمیق که شما می توانید از طریق مطالعه یک کتاب جبر خطی خوب پیدا کنید نخواهد بود. هم چنین این آشنایی دارای دقت و استحکام تعریفی و استدلالی ریاضی، یعنی چیزی که ریاضیدان ها به آن *Mathematical Rigor* می گویند نیست ولی برای فهمیدن مکانیک کوانتومی کافی است. فرض می کنیم که خواننده با مفهوم میدان اعداد آشناست. دو نمونه مهم از میدان ها عبارت اند از میدان اعداد حقیقی و میدان اعداد مختلط. نخست فضاهای برداری با بعد محدود را بررسی می کنیم و سپس به فضاهای برداری بی نهایت بعدی خواهیم پرداخت. تاکید ما به خصوص بر معرفی نمادگذاری دیراک برای بردارها و عملگرهاست که به طور گسترده ای در مکانیک کوانتومی مورد استفاده قرار می گیرد.

۲ فضای برداری

مجموعه V را یک فضای برداری روی میدان اعداد F می گوئیم هرگاه دو عمل زیر تعریف شده

$$+ : V \times V \longrightarrow V \quad \text{و} \quad \cdot : F \times V \longrightarrow V \quad (1)$$

Bohmian Mechanics⁴
David Bohm⁵

ودارای خاصیت های زیر باشند: (دراین روابط اعضای V را با x, y, z, \dots و اعضای F را با α, β, \dots نشان می دهیم.)

$$\begin{aligned}
 A1 : & \quad x + y = y + x \\
 A2 : & \quad (x + y) + z = x + (y + z) \\
 A3 : & \quad \exists 0 \in V \mid 0 + x = x \\
 A4 : & \quad \forall x \in V \quad \exists -x \in V \mid -x + x = 0, \\
 \\
 M1 : & \quad \alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y \\
 M2 : & \quad (\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x \\
 M1 : & \quad \alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x \\
 M1 : & \quad 1x = x.
 \end{aligned} \tag{2}$$

به ازای هر دو بردار u و v و هر عدد $\alpha \in F$ ، $u + v$ جمع دو بردار و αu ضرب اسکالر α در بردار u نامیده می شود. بسته به این که F میدان اعداد حقیقی R یا میدان اعداد مختلط C باشد، فضای برداری V را فضای برداری حقیقی یا مختلط می گوئیم.

مثال ها: مجموعه های زیر هرکدام یک فضای برداری هستند. در اغلب این مثال ها تعریف جمع $+$ و ضرب اسکالر بدیهی هستند و به طور صریح داده نشده اند. خواننده می تواند خود تعریف طبیعی مورد نظر را پیشنهاد کند.

۱ - R^n یا مجموعه n تایی های مرتب حقیقی یک فضای برداری حقیقی است.

۲ - C^n یا مجموعه n تایی مرتب مختلط، یک فضای برداری مختلط است.

۳ - $M_{m \times n}(F)$ یا مجموعه ماتریس های $m \times n$ که درایه های آن عناصر یک میدان F هستند، نیز یک فضای برداری است.

۴ - $P_n([a, b])$ یا مجموعه چند جمله های حقیقی مرتبه n از متغیر x که در فاصله $[a, b]$ تعریف شده اند.

۵ - $C^k[a, b]$ یا مجموعه توابع حقیقی یا مختلط k بار مشتق پذیر در فاصله $[a, b]$. دو تابع f و g به صورت زیر با یکدیگر جمع می شوند:

$$(f + g)(x) := f(x) + g(x), \quad (\alpha f)(x) := \alpha f(x). \tag{3}$$

از این به بعد منحصرأً با فضاهای برداری مختلط کار می‌کنیم.

تعریف: هرگاه V یک فضای برداری و $W \subset V$ زیرمجموعه‌ای از آن باشد، آنگاه W را یک زیرفضای V می‌گوییم اگر W نسبت به جمع بردارها و ضرب اعداد در بردارها بسته باشد.

مثال‌ها:

۱ - در فضای ۳ بعدی معمولی، صفحه xy یک زیرفضا از فضای ۳ بعدی است. به طور کلی تر هر خطی که از مبدأ بگذرد یک زیرفضای یک بعدی و هر صفحه‌ای که از مبدأ بگذرد یک زیرفضای دو بعدی از فضای سه بعدی است.

۲ - در فضای ماتریس‌های مربعی، مجموعه ماتریس‌های بالا مثلثی یک زیرفضاست.

۳ - در فضای توابع پیوسته $C[a, b]$ ، مجموعه $P_n([a, b])$ یک زیرفضاست.

۴ - در فضای توابع پیوسته، مجموعه توابع مشتق پذیر یک زیرفضاست.

۳ ضرب داخلی و اندازه

تعریف: در یک فضای برداری V یک عمل دوتایی $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow C$ را یک ضرب داخلی می‌نامیم هرگاه در شرایط زیر صدق کند:

$$\begin{aligned} \langle x, y + \alpha z \rangle &= \langle x, y \rangle + \alpha \langle x, z \rangle \\ \langle x, y \rangle &= \langle y, x \rangle^* \\ \langle x, x \rangle &\geq 0 \\ \langle x, x \rangle = 0 &\longrightarrow x = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

مثالهایی از ضرب داخلی:

الف - در C^n :

$$\langle x, y \rangle := \sum_{i=1}^n x_i^* y_i \quad (5)$$

ب - در $M_{n,m}(C)$

$$\langle A, B \rangle := \text{tr}(AB^\dagger) \quad (6)$$

ج - در $C^k[a, b]$

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b f^*(x)g(x)dx. \quad (7)$$

فضایی را که به یک ضرب داخلی مجهز شده باشد یک فضای بردای ضرب داخلی یا *Inner product space* می گوئیم.

قضیه کوشی-شوارتز: در یک فضای ضرب داخلی داریم:

$$|\langle x, y \rangle|^2 \leq \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle. \quad (8)$$

اثبات: بردار $v := \alpha x + y$ را در نظر می گیریم. داریم

$$\begin{aligned} f(\alpha, \alpha^*) &:= \langle v, v \rangle \geq 0 \longrightarrow \langle \alpha x + y, \alpha x + y \rangle \geq 0 \\ &\longrightarrow |\alpha|^2 \langle x, x \rangle + \alpha^* \langle x, y \rangle + \alpha \langle y, x \rangle + \langle y, y \rangle \geq 0. \end{aligned} \quad (9)$$

طرف چپ این رابطه یک تابع درجه ۲ از متغیر مختلط α است و به ازای هر مقدار از این متغیر، از جمله $\alpha = \frac{-\langle x, y \rangle}{\langle x, x \rangle}$ ، باز هم بزرگتر از صفر است. هرگاه این مقدار α را در طرف چپ قرار دهیم و عبارت بدست آمده را ساده کنیم به نامساوی کوشی شوارتز می رسیم.

اندازه یک بردار:

در فضای ضرب داخلی می توان اندازه یک بردار را به شکل زیر تعریف کرد:

$$\|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle}. \quad (10)$$

باتوجه به نامساوی کوشی شوارتز می توان نوشت :

$$|\langle x, y \rangle| \leq \|x\| \|y\|. \quad (11)$$

مثال هایی از اندازه یک بردار:

الف - در C^n :

$$|x|^2 := \sum_{i=1}^n x_i^* x_i \quad (12)$$

ب - در $M_{n,m}(C)$

$$|A|^2 := tr(AA^\dagger) \quad (13)$$

ج - در $C^k[a, b]$.

$$|f| := \int_a^b f^*(x)f(x)dx. \quad (14)$$

از نامساوی کوشی شوارتز دو نتیجه مهم حاصل می شود. یکی تعریف زاویه بین دو بردار به صورت

$$\cos \phi := \frac{|\langle x, y \rangle|}{|x||y|} \quad (15)$$

و دیگری نامساوی مثلث:

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|. \quad (16)$$

فضای نُرْم داریا اندازه دار: یک فضای برداری V که در آن نگاشت $\| \cdot \| : V \rightarrow R$ تعریف شده باشد را فضای اندازه دار یا *Normed Space* می گوئیم هرگاه شرایط زیر برقرار باشند:

$$\begin{aligned} \|v\| &\geq 0 \quad \forall v \\ \|v\| &= 0 \rightarrow v = 0 \\ \|\alpha v\| &= |\alpha| \|v\| \\ \|v + w\| &\leq \|v\| + \|w\|. \end{aligned} \quad (17)$$

هرفضای ضرب داخلی باهمان اندازه ای که از روی ضرب داخلی تعریف می شود یک فضای اندازه داراست، ولی یک فضای اندازه دار الزاماً یک فضای ضرب داخلی نیست. به عبارت دیگر یک اندازه لزوماً از روی یک ضرب داخلی تعریف نشده است. مثلاً در R^n می توان اندازه یک بردار $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ را به صورت $\|x\| = \max_i |x_i|$ و یا در فضای توابع $C[a, b]$ می توان اندازه یک تابع یا بردار f را می توان به صورت $\|f\| = \sup_{x \in [a, b]} |f(x)|$ تعریف کرد. هیچ کدام از این دو اندازه از یک ضرب داخلی بدست نیامده اند.

فضای متریک: در یک فضای برداری نرم دار V می توان فاصله بین دو بردار را به شکل زیر تعریف کرد:

$$d(x, y) := \|x - y\|. \quad (18)$$

این فاصله دارای خواص زیر است:

$$\begin{aligned} d(x, y) &\geq 0 \\ d(x, x) &= 0 \quad d(x, y) = 0 \longrightarrow x = y \\ d(x, z) &\leq d(x, y) + d(y, z). \end{aligned} \quad (19)$$

اما می توان در یک مجموعه M که الزاماً فضای برداری نیست، فاصله بین دو نقطه را تعریف کرد به این شکل که هر تابع $d: M \times M \rightarrow R$ را متریک می گوئیم هرگاه در خواص بالا صدق کند. دقت کنید که در خواص بالا هیچ کجا نیازی نیست که چیزی مثل $x + y$ یا αx معنا پیدا کند. به همین دلیل است که تعریف متریک نیازی به خطی بودن فضا ندارد. به عنوان مثال می توان هر مجموعه دلخواهی مثل M را با تعریف زیر تبدیل به یک فضای متریک کرد:

$$d(x, y) = \begin{cases} 1 & x \neq y \\ 0 & x = y \end{cases} \quad (20)$$

۴ پایه

استقلال خطی: در فضای برداری V ، بردارهای v_1, v_2, \dots, v_n مستقل خطی نامیده می شوند اگر تنها حل معادله $\sum_{i=1}^n c_i v_i = 0$ برای اعداد حقیقی یا مختلط c_1, c_2, \dots, c_n آن باشد که $c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0$. یک مجموعه بردار مستقل خطی e_1, e_2, \dots, e_n یک پایه برای فضای برداری V خوانده می شود هرگاه این مجموعه بردارها مستقل خطی باشند و ثانیاً هر بردار متعلق به V را بتوان به صورت خطی برحسب این بردارها بسط داد، یعنی

$$\forall v \in V, \longrightarrow v = \sum_{i=1}^n v_i e_i. \quad (21)$$

v_i ها مولفه های بردار v در پایه فوق خوانده می شوند. بدیهی است که وقتی پایه را عوض کنیم، مولفه های یک بردار نیز عوض می شوند.

یک پایه متعامد یکه یا بهنجار خوانده می شود هرگاه شرط زیر را برآورده کند:

$$\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{i,j}, \quad (22)$$

که به این معناست که بردارهای پایه دو به دو برهم عمودند و اندازه هرکدام از آنها برابر با یک است.

پایه بهنجار $\{e_i, i = 1, \dots, N\}$ را برای فضای V در نظر می گیریم. $x \in V$ را می توان برحسب این بردارهای پایه بسط داد و نوشت:

$$x = \sum_{i=1}^N x_i e_i. \quad (23)$$

بدیهی است که

$$x_i = \langle e_i, x \rangle. \quad (24)$$

روش گرام اشمیت⁶ برای ساختن پایه بهنجار

در یک فضای ضرب داخلی، از یک پایه دلخواه مثل $\{v_1, v_2, \dots, v_N\}$ می توان به روش زیر که به روش گرام اشمیت موسوم است یک پایه بهنجار ساخت: قرار می دهیم:

$$e_1 := \frac{v_1}{|v_1|}, \quad e_2 := \frac{v_2 - \langle e_1, v_2 \rangle e_1}{|v_2 - \langle e_1, v_2 \rangle e_1|}, \quad e_3 := \frac{v_3 - \langle e_1, v_3 \rangle e_1 - \langle e_2, v_3 \rangle e_2}{|v_3 - \langle e_1, v_3 \rangle e_1 - \langle e_2, v_3 \rangle e_2|}, \dots \quad (25)$$

خواننده می تواند براحتی تحقیق کند که پایه جدید بهنجار است. تعبیر هندسی روش بالا نیز روشن و ساده است.

مثالهایی از پایه های بهنجار:

الف - در R^n و C^n :

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad e_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

ب - در $M_{m \times n}(C), M_{m \times n}(R)$:

$$E_{ij}, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n, \quad (27)$$

Gram-Schmidt⁶

که در آن E_{ij} ماتریسی است که درایه (i, j) آن برابر با ۱ و بقیه درایه های آن برابر با صفر است. به عبارت دیگر داریم

$$[E_{ij}]_{k,l} = \delta_{ik}\delta_{jl}. \quad (28)$$

این پایه ها متعامد یکه هستند.

ج - در $C^k[a, b]$ ، مجموعه $\{e_n(x), f_n(x), n = 0 \dots \infty\}$ با تعریف

$$e_n(x) := \sqrt{\frac{2}{b-a}} \sin\left(\frac{n\pi}{b-a}x\right), \quad f_n := \sqrt{\frac{2}{b-a}} \cos\left(\frac{n\pi}{b-a}x\right). \quad (29)$$

د - در $P_n[a, b]$ ، می توان یک پایه مثل $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ در نظر گرفت و آن را با فرایند گرام-اشمیت بهنجار کرد. تکمیل این تمرین را به خواننده واگذار می کنیم.

تغییر پایه فرض کنید که $\{e_i, i = 1 \dots n\}$ و $\{e'_i, i = 1 \dots n\}$ دو پایه بهنجار برای یک فضای برداری V باشند. در این صورت می توان نوشت

$$e'_i = S_{ij}e_j \quad (30)$$

که در نوشتن این رابطه از قرارداد جمع استفاده کرده ایم یعنی روی شاخص های تکراری جمع زده ایم. در این صورت چون هر دو پایه بهنجار هستند داریم

$$\delta_{ij} \equiv \langle e'_i, e'_j \rangle = \langle S_{ik}e_k, S_{jl}e_l \rangle = S_{ik}^* S_{jl} \langle e_k, e_l \rangle = S_{ik}^* S_{jl} \delta_{kl} = S_{il}^* S_{jl}. \quad (31)$$

هرگاه این رابطه را به شکل ماتریسی بنویسیم خواهیم داشت:

$$S^\dagger S = I, \quad (32)$$

که در آن الحاقی یک ماتریس به شکل زیر تعریف شده است: $(S^\dagger)_{ij} = S_{ji}^*$. ماتریس هایی که دارای خاصیت فوق باشند، یعنی الحاقی آنها با وارون آنها برابر باشد، ماتریس های یکانی خوانده می شوند. تحت تغییر پایه مولفه های یک بردار تغییر می کنند. داریم

$$x = \sum_{i=1}^n x_i e_i = \sum_{j=1}^n x'_j e'_j. \quad (33)$$

می خواهیم ببینیم مولفه های این بردار در دو پایه چه ربطی به هم دارند. می نویسیم

$$x'_i = \langle e'_i, x \rangle = \langle S_{ij}e_j, x \rangle = S_{ij}^* \langle e_j, x \rangle = S_{ij}^* x_j. \quad (34)$$

۵ تبدیلات خطی

در یک فضای برداری V ، نگاشت $\hat{T} : V \rightarrow V$ را یک تبدیل خطی یا عملگر خطی *Linear operator* می‌گوییم هرگاه دارای خاصیت زیر باشد:

$$\hat{T}(x + \alpha y) = \hat{T}(x) + \alpha \hat{T}(y) \quad \forall \alpha \in F, \quad x, y \in V. \quad (35)$$

بدلیل خطی بودن، یک عملگر خطی تنها با اثرش روی بردارهای پایه مشخص می‌شود، زیرا

$$\hat{T}x = \hat{T}\left(\sum_{i=1}^N x_i e_i\right) = \sum_{i=1}^N x_i \hat{T}e_i. \quad (36)$$

از آنجا که $\hat{T}e_i$ برداری از فضای V است، می‌توانیم آن را برحسب بردارهای پایه بسط دهیم. می‌نویسیم:

$$\hat{T}e_i = \sum_{j=1}^N T_{ji} e_j \quad (37)$$

ماتریس T با درایه‌های T_{mn} را ماتریس مربوط به تبدیل خطی \hat{T} در پایه $\{e_i\}$ می‌گوییم. هرگاه پایه فوق بهنجار باشد می‌توانیم بنویسیم

$$\langle e_j, \hat{T}e_i \rangle = T_{ji}. \quad (38)$$

اثر تبدیل خطی \hat{T} روی یک بردار x عبارت خواهد بود از:

$$\hat{T}x = \hat{T}x_i e_i = x_i (\hat{T}e_i) = x_i T_{ji} e_j = (T_{ji} x_i) e_j = (Tx)_j e_j \quad (39)$$

بنابراین اثر تبدیل خطی \hat{T} روی x آن است که ماتریس تبدیل خطی T از چپ در ماتریس ستونی x ضرب می‌شود، به این معنا که اگر برای بردارها داشته باشیم $x' = \hat{T}x$ ، آنگاه برای مولفه‌های این بردارها در یک پایه خواهیم داشت:

$$[x'] = T[x] \quad (40)$$

که در آن T ماتریس عملگر \hat{T} و $[x]$ و $[x']$ نیز به ترتیب ماتریس‌های ستونی‌ای هستند که مولفه‌های بردارهای x و x' را در یک پایه مشخص نشان می‌دهند.

هرگاه پایه را عوض کنیم ماتریس تبدیل خطی نیز عوض خواهد شد. اگر به جای پایه $\{e_i\}$ پایه $\{e'_i\}$ را در نظر بگیریم که در آن $e'_i = S_{li}e_l$ آنگاه خواهیم داشت

$$T'_{ij} = \langle e'_i, \hat{T}e'_j \rangle = \langle S_{li}e_l, \hat{T}S_{mj}e_m \rangle = S_{li}^* T_{lm} S_{mj}, \quad (41)$$

که به صورت فشرده زیر قابل بازنویسی است:

$$T' = S^\dagger T S, \quad (42)$$

که در آن S^\dagger با الحاقی ماتریس S خوانده می شود و چنین تعریف می شود:

$$S^\dagger = (S^*)^T, \quad \text{یا} \quad S^\dagger_{ij} = (S^*)_{ji}. \quad (43)$$

تذکر: تبدیل خطی لزومی ندارد که از یک فضای برداری به همان فضا تعریف شود. در حالت کلی تبدیل خطی یک نگاشت $\hat{T}: V \rightarrow W$ از یک فضای برداری به یک فضای برداری دیگر، تبدیل خطی است اگر در شرط $\hat{T}(\alpha x + y) = \alpha \hat{T}x + \hat{T}y \quad \forall \alpha, x, y$ صدق کند. با این شرط معلوم می شود که میدانی که هر دو فضای برداری روی آن تعریف می شوند می بایست یکی باشد تا تبدیل خطی قابل تعریف باشد.

هرگاه \hat{A} و \hat{B} دو تبدیل خطی دلخواه روی V و α عددی دلخواه متعلق به میدان F باشد، آنگاه $\alpha \hat{A} + \hat{B}$ نیز یک تبدیل خطی روی V است. بنابراین مجموعه تبدیلات خطی روی V تشکیل یک فضای برداری می دهد که آن را با $L(V)$ نمایش می دهیم. هم چنین ضرب دو تبدیل خطی با تعریف

$$(\hat{A}\hat{B})x := \hat{A}(\hat{B}x) \quad (44)$$

نیز یک تبدیل خطی است. خواننده باید نشان دهد که ماتریس مربوط به تبدیل خطی $\hat{A}\hat{B}$ عبارت است از حاصل ضرب ماتریس های مربوط به تبدیل های خطی \hat{A} و \hat{B} . یعنی اگر $\hat{T} = \hat{A}\hat{B}$ ، آنگاه $T_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}$. از آنجا که مجموعه تبدیلات خطی نسبت به ضرب نیز بسته است نتیجه می گیریم که $L(V)$ نه تنها یک فضای برداری است بلکه یک جبر است به این معنا که یک فضای برداری است که در آن یک عمل ضرب شرکت پذیر $(\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C})$ تعریف شده است. این جبر جابجایی نیست ($\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$) اما یکه دار یا یونیتال ($Unital$) است به این معنا که در آن عنصریکه وجود دارد (در اینجا عملگر همانی) با خاصیت زیر $\hat{A}\hat{I} = \hat{I}\hat{A} = \hat{A}$.

دیدیم که به یک عملگر خطی می توان یک ماتریس نسبت داد. وقتی که پایه فضا را معین می کنیم بین فضای تبدیلات خطی یعنی $L(V)$ و فضای ماتریس های $M_{n \times n}(C)$ یک یکسانی بوجود می آید. بنابراین می توان از یک تبدیل خطی و یا ماتریس آن بسته به راحتی سخن گفت. می توان با تعریف زیر، فضای تبدیلات خطی روی V را به یک فضای ضرب داخلی تبدیل کرد:

$$\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle = \text{tr}(AB^\dagger) \quad (45)$$

خواننده می تواند نشان دهد که این تعریف مستقل از پایه ای است که برای فضای برداری در نظر می گیریم.

مثال هایی از تبدیلات خطی:

الف - در C^n ، هر تبدیل به صورت $x \rightarrow x' = Ax$ که در آن $A \in M_{n \times n}(C)$ یک تبدیل خطی تعریف می کند. بالعکس هر تبدیل خطی در C^n چیزی نیست جز ضرب یک ماتریس مربعی $n \times n$ در یک بردار ستونی n بعدی.

ب - در $M_{m \times n}(C)$ ، هر تبدیلی که $x \in M_{m \times n}(C)$ را به صورت زیر تبدیل می کند

$$x \rightarrow x' = AxB^T, \quad (46)$$

که در آن $A \in M_{m,m}(C)$ و $B \in M_{n,n}(C)$ یک تبدیل خطی است. خواننده با الهام از مثال الف و اینکه هر ماتریس $m \times n$ را می توان به صورت یک بردار mn بعدی در نظر گرفت می تواند ثابت کند که کلی ترین تبدیل خطی روی چنین فضایی عبارت است از جمعی از تبدیلات فوق. یعنی کلی ترین تبدیل روی ماتریس های $M_{m \times n}(C)$ عبارت است از:

$$x \rightarrow x' := \sum_i A_i x B_i. \quad (47)$$

ج - در $C^k[a, b]$ ، با الهام از مثال الف می توانیم بگوییم که کلی ترین تبدیل خطی روی چنین فضایی، تبدیلی است که $f \in C^k(a, b)$ را به صورت زیر تبدیل می کند:

$$f(x) \rightarrow f'(x) := \int_a^b K(x, y) f(y) \quad (48)$$

که در آن $K(x, y)$ تابعی است که نسبت به هر دو مختصه خود k بار مشتق پذیر است. این تبدیل را یک تبدیل انتگرال و $K(x, y)$ را هسته آن می خوانند. در بعضی از موارد می توان تبدیل خطی را به صورت یک عملگر دیفرانسیل نیز نوشت: به عنوان مثال در فضای $C^\infty[a, b]$ یعنی فضای توابع بی نهایت مشتق پذیر تبدیلات از نوع

$$f(x) \rightarrow \frac{d^r}{dx^r} f(x) \quad \text{یا} \quad f(x) \rightarrow x^r f(x) \quad (49)$$

و هر ترکیب خطی از آنها یک عملگر خطی است مثل تبدیل زیر:

$$f(x) \rightarrow \left(x^2 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d}{dx} + 1\right) f(x). \quad (50)$$

۶ یکسانی دو فضای برداری

تعریف: یک نگاشت خطی $\phi: V \rightarrow W$ را یک یکسانی⁷ بین دو فضای برداری می‌گوییم هرگاه ϕ وارون پذیر باشد. در این حالت دو فضای برداری را یکسان⁸ می‌خوانیم. به عنوان مثال فضای C^4 با فضای $M_{2,2}(C)$ یکسان است. یکسانی دو فضای برداری دو فضای برداری V و W یکسان خوانده می‌شوند هرگاه بتوان بین آنها یک نگاشت خطی وارون پذیر تعریف کرد. به عنوان مثال فضای برداری ماتریس های $m \times n$ با فضای برداری C^{mn} یکسان است. هم چنین فضای برداری چند جمله ای های مختلط مرتبه n با فضای C^n یکسان است. هم چنین فضای توابع $C^k(-1, 1)$ با فضای توابع $C^k(-\infty, \infty)$ یکسان است. یکسانی های اول و دوم بدیهی هستند و اثبات آنها آسان است. اثبات یکسانی سوم را خواننده می‌تواند با استفاده مناسب از تغییر متغیر $y = \tan \frac{\pi}{2}x$ نشان دهد. خواننده خود می‌تواند مثال های بیشتری از یکسانی بین فضاهای برداری پیدا کند.

۷ فضای کامل، باناخ و هیلبرت

دنباله کوشی: در یک فضای برداری دنباله ای از بردارها مثل $\{x_1, x_2, \dots, x_n, \dots\}$ در نظر می‌گیریم. این دنباله یک دنباله کوشی نامیده می‌شود هرگاه فاصله بین بردارها به تدریج کم شود. به عبارت دقیقتر هرگاه به ازای هر $\epsilon > 0$ عددی مثل N یافت شود به قسمی که

$$\forall m, n > N \rightarrow |x_n - x_m| \leq \epsilon. \quad (51)$$

در یک فضای برداری حد یک دنباله کوشی لزوماً در خود فضا قرار ندارد. به عنوان مثال هرگاه میدان اعداد گویا را به عنوان یک فضای برداری روی خودش در نظر بگیریم دنباله $\{(1 + \frac{1}{n})^n\}$ اگرچه یک دنباله کوشی است، ولی حد آن در داخل میدان اعداد گویا قرار ندارد. با افزودن اعداد گنگ به اعداد گویا میدان اعداد حقیقی بدست می‌آید که کامل است یعنی حد دنباله های کوشی را در خود دارد.

فضای برداری کامل: یک فضای برداری را فضای برداری کامل می‌گوییم هرگاه حد دنباله های کوشی رادر خود داشته باشد.

فضای باناخ: یک فضای برداری نرم دار را که کامل باشد فضای باناخ می‌نامیم.

فضای هیلبرت: یک فضای ضرب داخلی را که کامل باشد فضای هیلبرت می‌نامیم. از آنجا که میدان اعداد حقیقی و مختلط کامل هستند، می‌توان ثابت کرد که هر فضای محدود بعدی که روی این میدان ها ساخته می‌شود نیز کامل بوده

Isomorphism⁷
Isomorphic⁸

و بنابراین یک فضای هیلبرت است.

مثال: فضای توابع حقیقی $C[-1, 1]$ را با ضرب داخلی استاندارد $\langle f, g \rangle = \int_{-1}^2 f(x)g(x)dx$ در نظر می گیریم. در این فضا دنباله توابع زیر را تعریف می کنیم:

$$f_n(x) := \begin{cases} 0 & x \leq -\frac{1}{n} \\ \frac{1}{2}(nx + 1) & -\frac{1}{n} \leq x \leq \frac{1}{n} \\ 1 & \frac{1}{n} \leq x \end{cases} \quad (52)$$

خواننده می تواند براحتی نشان دهد که این دنباله یک دنباله کوشی است. اما حد این دنباله تابع ناپیوسته پله است که در فضای $C[-1, 1]$ قرار ندارد. بنابراین $C[-1, 1]$ یک فضای هیلبرت نیست.

فضای $L_w^2[a, b]$: فضای توابع مختلط با ضرب داخلی $\langle f, g \rangle = \int_a^b w(x)f^*(x)g(x)dx$ که در آن w یک تابع دلخواه مثبت است با شرط $\|f\| < \infty$ ، فضای توابع انتگرال مجذور پذیر خوانده می شود. هیلبرت ثابت کرده است که این فضا کامل است و به همین مناسبت این فضا یک فضای هیلبرت نامیده می شود. اهمیت این نوع فضاها در استفاده وسیع آنها در مکانیک کوانتومی است. برای اثبات این قضیه و قضیه زیر، خواننده می بایست به کتاب های آنالیز یا آنالیز تابعی مراجعه کند.

قضیه: هر فضای هیلبرت که محدود بعد نباشد، با فضای $L_w^2[a, b]$ یکسان است.

۸ مسئله ویژه مقدار

عمگنر $\hat{T}: V \rightarrow V$ را در نظر می گیریم. مسئله ویژه مقدار عبارت است از یافتن بردارهای غیر صفری است که تحت اثر \hat{T} به ضربی از خود تبدیل شوند، یعنی

$$\hat{T}x = \lambda x \quad (53)$$

بردار x غیر صفر خواهد بود هرگاه ماتریس $T - \lambda I$ وارون پذیر نباشد یعنی اینکه

$$\det(T - \lambda I) = 0. \quad (54)$$

این معادله یک معادله درجه N است که درحوزه اعداد مختلط حتماً N تا جواب دارد که آنها را با $\{\lambda_i, i = 1, \dots, N\}$ نشان می دهیم و آن ها را ویژه مقدارهای تبدیل \hat{T} می گوئیم. این جواب ها لزوماً همه باهم متفاوت نیستند. بردار مربوط به λ_i را که در معادله $\hat{T}v_i = \lambda_i v_i$ صدق می کند ویژه بردار مربوط به آن ویژه مقادری گوئیم. هرگاه که یک ویژه مقدار مثل λ_i, g_i بار تکرار شود گوئیم درجه واگنی آن g_i است. هرگاه x و y ویژه بردار مربوط به λ باشند بدیهی است که هر ترکیب خطی آنها نیز ویژه بردار مربوط به λ است. بنابراین مجموعه بردارهای متعلق به یک ویژه مقدار تشکیل یک زیرفضای دهند که آن را ویژه فضای مربوط به آن ویژه مقادری گویند.

۹ عملگرهای هرمیتی، یکانی و بهنجار

هم در ریاضیات و هم در فیزیک عملگرهای هرمیتی، پادهرمیتی و یکانی و هم چنین عملگرهای بهنجار اهمیت ویژه دارند. نقطه شروع برای تعریف این عملگرها تعریف چیزی است که آن را الحاقی یک عملگر می نامیم.

تعریف: در یک فضای ضرب داخلی، الحاقی یا *Adjoint* یک عملگر T عملگری مثل \hat{T}^\dagger است که در شرط زیر صدق کند:

$$\langle v, \hat{T}w \rangle = \langle \hat{T}^\dagger v, w \rangle \quad \forall v, w \in V. \quad (55)$$

با استفاده از این تعریف می توان براحتی خواص زیر را ثابت کرد.
قضیه:

$$\begin{aligned} (\hat{A}^\dagger)^\dagger &= \hat{A} \\ (c\hat{A})^\dagger &= c^* \hat{A}^\dagger \\ (\hat{A} + \hat{B})^\dagger &= \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger \\ (\hat{A}\hat{B})^\dagger &= \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \end{aligned} \quad (56)$$

اثبات: فقط رابطه آخر را ثابت می کنیم. اثبات بقیه روابط مشابه است. داریم

$$\langle x, \hat{A}\hat{B}y \rangle = \langle (\hat{A}\hat{B})^\dagger x, y \rangle \quad (57)$$

از طرفی

$$\langle x, \hat{A}\hat{B}y \rangle = \langle \hat{A}^\dagger, \hat{B}y \rangle = \langle \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger x, y \rangle. \quad (58)$$

با مقایسه این دو رابطه بدست می آوریم

$$\langle [(\hat{A}\hat{B})^\dagger - \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger]x, y \rangle = 0, \quad \forall x, y. \quad (59)$$

از آنجا که این رابطه برای هر بردار y درست است نتیجه می گیریم

$$[(\hat{A}\hat{B})^\dagger - \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger]x = 0 \quad \forall x, \quad \longrightarrow (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger. \quad (60)$$

تعریف: عملگر هرمیتی: در یک فضای ضرب داخلی عملگر هرمیتی به عملگری گفته می شود که در شرط $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$ صدق کند. عملگر پاد هرمیتی به عملگری گفته می شود که در شرط $\hat{T}^\dagger = -\hat{T}$ صدق کند.

تمرین: نشان دهید که هرگاه A یک عملگر هرمیتی باشد، آنگاه iA یک عملگر پاد هرمیتی است. هم چنین نشان دهید که یک عملگر دلخواه مثل Z را می توان به صورت $Z = X + iY$ نوشت که در آن X و Y هر دو هرمیتی هستند. به این ترتیب می شود گفت که عملگرهای هرمیتی مثل اعداد حقیقی هستند. به یک معنا که بعداً خواهیم دید این تعبیر صحیح است.

مثال: در فضای $C^\infty[a, b]$ عملگر $\hat{D} := \frac{d}{dx}$ را در نظر می گیریم. این عملگر در زیر فضایی که از توابع تناوبی تشکیل می شود (با شرط $f(a) = f(b)$) پاد هرمیتی است. در نتیجه عملگر $\hat{P} := -i\hat{D}$ در این زیرفضا هرمیتی خواهد بود. هم چنین این تابع در فضای هیلبرت $L^2[-\infty, \infty]$ هرمیتی است.

عملگریکانی: در یک فضای ضرب داخلی، عملگریکانی⁹ به عملگری گفته می شود که در شرط $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ صدق کند. یک عملگریکانی ضرب داخلی بردارها را حفظ می کند، یعنی

$$\langle \hat{U}v, \hat{U}w \rangle = \langle v, w \rangle. \quad (61)$$

بنابراین عملگریکانی در شرط $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = I$ صدق می کند. واضح است که یک عملگریکانی را وقتی در یک پایه بهنجار نمایش دهیم متناظر با یک ماتریس یکانی خواهد بود.

تمرین: نشان دهید که یک عملگریکانی را همواره می توان به شکل e^{iH} نوشت که در آن H یک عملگر هرمیتی است. به این معنا یک عملگریکانی شبیه یک عدد مختلط با اندازه یک است. این تعبیر هم به ترتیبی که بعداً خواهیم دید صحیح است.

تعریف: عملگر بهنجار یا نرمال¹⁰ به عملگری گفته می شود که خودش با الحاقی اش جابجا شود یعنی N نرمال است اگر

$$.N^\dagger N = N N^\dagger$$

Unitary⁹
Normal¹⁰

واضح است که عملگرهای هرمیتی و یکانی حتماً نرمال هستند ولی عکس آن درست نیست. یعنی عملگرهای نرمالی وجود دارند که نه یکانی اند و نه هرمیتی. با توجه به این که دیدیم هر عملگر دلخواه را می توان به صورت $Z = X + iY$ نوشت که در آن X و Y هرمیتی باشند، نتیجه می گیریم که عملگری نرمال است که قسمت های حقیقی و موهومی آن یعنی X و Y آن باهم جابجا شوند. برای چنین عملگری خواهیم داشت

$$Z^\dagger Z = ZZ^\dagger = X^2 + Y^2. \quad (62)$$

تمرین: مثالی از یک ماتریس نرمال ارائه دهید که نه یکانی باشد و نه هرمیتی.

در مورد عملگرهای هرمیتی، یکانی و نرمال قضایای جالبی وجود دارد. این قضیه ها را در زیر بیان می کنیم.

قبلا دیدیم که عملگر یکانی اندازه بردارها را حفظ می کند. سوال این است که آیا اگر عملگری اندازه همه بردارها را حفظ کند، آیا این عملگر یکانی است؟ پاسخ این سوال مثبت است.

قضیه: عملگری \hat{U} یکانی است اگر و فقط اگر اندازه همه بردارها را حفظ کند.

اثبات: اگر \hat{U} یکانی باشد با استفاده از 61 معلوم می شود که اندازه بردارها را حفظ می کند. حال فرض کنید که \hat{U} اندازه همه بردارها را حفظ کند. به ازای هر دو بردار دلخواه x, y می دانیم که

$$\|\hat{U}x\| = \|x\|, \quad \|\hat{U}y\| = \|y\|, \quad \|\hat{U}(x+y)\| = \|x+y\|, \quad \|\hat{U}(x+iy)\| = \|x+iy\|. \quad (63)$$

از این روابط نتیجه می گیریم که $\langle \hat{U}x, \hat{U}y \rangle = \langle x, y \rangle$.

قضیه: عملگر \hat{N} بهنجار است اگر و فقط اگر به ازای هر بردار x داشته باشیم

$$\|\hat{N}x\| = \|\hat{N}^\dagger x\|. \quad (64)$$

اثبات: اثبات جهت اول: اگر N بهنجار باشد داریم $\hat{N}\hat{N}^\dagger = \hat{N}^\dagger\hat{N}$. بنابراین

$$\langle \hat{N}x, \hat{N}x \rangle = \langle \hat{N}^\dagger \hat{N}x, x \rangle = \langle \hat{N}\hat{N}^\dagger x, x \rangle = \langle \hat{N}^\dagger x, \hat{N}^\dagger x \rangle. \quad (65)$$

اثبات جهت دوم: از تساوی (??) برای $x+y$ و x, y و $x+iy$ که در آن x و y دو بردار دلخواه هستند نتیجه می گیریم

$$\langle \hat{N}x, \hat{N}y \rangle = \langle \hat{N}^\dagger x, \hat{N}^\dagger y \rangle, \quad \forall x, y. \quad (66)$$

در نتیجه

$$\langle \hat{N}^\dagger \hat{N}x, y \rangle = \langle \hat{N} \hat{N}^\dagger x, y \rangle, \quad (67)$$

و یا

$$\langle (\hat{N}^\dagger \hat{N} - \hat{N} \hat{N}^\dagger)x, y \rangle = 0. \quad (68)$$

چون x و y دلخواه هستند نتیجه می گیریم که $\hat{N}^\dagger \hat{N} = \hat{N} \hat{N}^\dagger$ و بنابراین \hat{N} یک عملگر بهنجار است.

در مورد طیف عملگرهای هرمیتی، یکانی و بهنجار فضایی بسیار جالب و مهمی وجود دارد. قضیه: فرض کنید که \hat{N} یک عملگر بهنجار است. در این صورت اگر $\hat{N}x = \lambda x$ آنگاه $\hat{N}^\dagger x = \lambda^* x$. اثبات: اگر \hat{N} بهنجار باشد آنگاه $\hat{N} - \lambda I$ نیز بهنجار است. حال از قضیه قبل استفاده می کنیم:

$$\|(\hat{N} - \lambda I)x\| = 0 \longrightarrow \|(\hat{N} - \lambda I)^\dagger x\| = 0 \longrightarrow \|(\hat{N}^\dagger - \lambda^* I)x\| = 0 \longrightarrow \hat{N}^\dagger x = \lambda^* x. \quad (69)$$

از این قضیه دو نتیجه ساده بدست می آید:

نتیجه اول: ویژه مقادیر یک عملگر هرمیتی حقیقی هستند.

نتیجه دوم؛ ویژه مقادیر یک عملگر یکانی فاز خالص هستند.

قضیه: ویژه بردارهای یک عملگر نرمال که متناظر با ویژه مقادیرهای متمایز هستند برهم عمودند.

اثبات: فرض کنیم $\hat{A}x = \lambda x$ و $\hat{A}y = \mu y$. در این صورت

$$\langle x, \mu y \rangle = \langle x, \hat{A}y \rangle = \langle \hat{A}^\dagger x, y \rangle = \langle \lambda^* x, y \rangle, \quad (70)$$

و از آنجا

$$\longrightarrow (\mu - \lambda)\langle x, y \rangle = 0 \longrightarrow \langle x, y \rangle = 0. \quad (71)$$

از این قضیه نیز نتیجه می شود که این خاصیت برای عملگرهای هرمیتی و یکانی نیز برقرار است.

۱۰ تجزیه طیفی

پیدا کردن ویژه مقادیر و ویژه بردارهای یک عملگر بهنجار را پیدا کردن طیف¹¹ آن عملگر یا به اصطلاح تجزیه طیفی¹² آن عملگر می گویند.

قضیه: در یک فضای برداری محدود بعد ویژه بردارهای یک عملگر بهنجار یک پایه برای فضا تشکیل می دهند.

اثبات: عملگر نرمال \hat{A} را روی فضای n بعدی V در نظر می گیریم. می دانیم که هر عملگر حتماً یک ویژه مقدار و یک ویژه بردار دارد. این ویژه مقدار و ویژه بردار مربوطه را با λ_1 و e_1 نشان می دهیم:

$$\hat{A}e_1 = \lambda_1 e_1. \quad (72)$$

یک پایه متعامد بهنجار برای فضا انتخاب می کنیم که e_1 اولین عضو آن باشد. بقیه بردارهای این پایه اگر چه بر e_1 عمود هستند ولی لزوماً ویژه بردارهای A نیستند. در این صورت خواهیم داشت $\langle e_j | A | e_1 \rangle = 0$ و در نتیجه ماتریس عملگر A به شکل زیر درمی آید:

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & b_{n-1} \\ 0 & A_{n-1} \end{pmatrix} \quad (73)$$

که در آن A_{n-1} یک ماتریس $n-1$ بعدی و b_{n-1} یک بردار سطر $n-1$ بعدی است. اما از قضیه های قبل می دانیم که اگر $Ae_1 = \lambda_1 e_1$ آنگاه $A^\dagger e_1 = \lambda_1^* e_1$. در این جا از بهنجاری بودن عملگر A استفاده کرده ایم. بنابراین ماتریس A^\dagger نیز می بایست به فرم بالامثلی باشد و در نتیجه می بایست $b_{n-1} = 0$. پس A به شکل بلوکه قطری زیر درمی آید:

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & A_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (74)$$

(یک راه ساده تر آن است که مستقیماً از تساوی $AA^\dagger = A^\dagger A$ استفاده کنیم.) حال A_{n-1} به نوبه خود یک عملگر نرمال است و حداقل یک ویژه مقدار و یک ویژه بردار دارد. همین استدلال را در مورد آن تکرار می کنیم و می بینیم که در پایه ای که اولین و دومین عنصر آن e_1 و e_2 هستند ماتریس عملگر A به شکل زیر درمی آید:

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & A_{n-2} \end{pmatrix}. \quad (75)$$

با تکرار این عمل می بینیم که در پایه ویژه بردارهای A یعنی پایه $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ ، A به طور کامل قطری می شود.

Spectrum¹¹
Spectral Decomposition¹²

این موضوع برای عملگرهای ماتریس های نابهنجار صادق نیست. به عنوان مثال، ماتریس زیر را در نظر می گیریم

$$B = \begin{pmatrix} 1 & c \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad c \neq 0. \quad (76)$$

ویژه مقدارهای این ماتریس هر دو برابر یک هستند. اما تنها یک ویژه بردار برای این ماتریس وجود دارد که به شکل $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ است. بنابراین ویژه بردارهای این ماتریس نمی توانند یک پایه برای فضا تشکیل دهند.

۱.۱۰ قطری کردن

دیدیم که یک عملگر نرمال در پایه ویژه بردارهای خود قطری است. این امر به این معناست که یک تبدیل یکانی وجود دارد که ماتریس عملگر A را قطری می کند. برای پیدا کردن فرم صریح این تبدیل یکانی به ترتیب زیر عمل می کنیم. ویژه مقدارها و ویژه بردارهای A را پیدا می کنیم:

$$Ae_i = \lambda_i e_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (77)$$

می دانیم که ویژه بردارهای متناظر با ویژه مقدارهای متمایز برهم عمود هستند. ویژه بردارهای مربوط به یک ویژه مقدار واگن را نیز با روش گرام اشمیت برهم عمود می کنیم. در نتیجه این ویژه بردارها در شرایط $\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$ صدق می کنند. اگر e_i ها را به صورت بردارهای ستونی در نظر بگیریم، e_i^\dagger ها به صورت بردارهای سطری درخواهند آمد و رابطه بهنجار بودن آنها به شکل زیر بیان می شود $e_i^\dagger e_j = \delta_{ij}$. حال ماتریس S را به شکل زیر می نویسیم:

$$S = (e_1 \quad e_2 \quad \dots \quad e_n) \quad (78)$$

که در آن e_i ها به عنوان بردارهای ستونی در S قرار گرفته اند. در نتیجه خواهیم داشت

$$S^\dagger = \begin{pmatrix} e_1^\dagger \\ e_2^\dagger \\ \cdot \\ \cdot \\ e_N^\dagger \end{pmatrix}. \quad (79)$$

بدلیل شرط $e_i^\dagger e_j = \delta_{ij}$ نتیجه می گیریم که

$$S^\dagger S = \begin{pmatrix} e_1^\dagger \\ e_2^\dagger \\ \cdot \\ \cdot \\ e_N^\dagger \end{pmatrix} (e_1 \quad e_2 \quad \dots \quad e_n) = I, \quad (80)$$

یعنی S یکانی است.

از آنجا که $Ae_i = \lambda_i e_i$ بدست می آوریم

$$AS = A \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 e_1 & \lambda_2 e_2 & \cdots & \lambda_n e_n \end{pmatrix} \quad (81)$$

و در نتیجه

$$S^\dagger AS = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}. \quad (82)$$

بنابراین A بایک تبدیل یکانی قطری شده است. به مجموعه ویژه بردارها و ویژه مقدرهای یک عملگر نرمال اصطلاحاً طیف یا *spectrum* آن عملگر می گویند. به همین جهت است که قطری کردن یک عملگر تجزیه طیفی نیز نامیده می شود.

قضیه: دو عملگر نرمال A و B بایکدیگر جابجایی شوند اگر و فقط اگر بتوان برای آنها یک مجموعه کامل از ویژه بردارهای مشترک یافت.

این قضیه را به شکل دیگری نیز می توان بیان کرد و آن اینکه اگر دو عملگر نرمال بایکدیگر جابجاشوند حتماً می توان پایه ای یافت که در آن هر دو عملگر قطری باشند. باید تاکید کنیم که این خاصیت برای هر پایه دلخواهی برقرار نیست و قضیه تنهایی گوید که می توان پایه ای یافت که در آن این خاصیت برقرار باشد.

این قضیه هم از نظر مفهومی و هم از نظر کاربردی اهمیت زیادی در مکانیک کوانتومی دارد و خواننده می بایست به دقت اثبات آنرا فرا بگیرد.

اثبات: فرض کنیم که A و B دو عملگر باشند که یک مجموعه ویژه بردار مشترک مثل $\{e_1, e_2, \dots, e_N\}$ داشته باشند. از آنجا که این دو عملگر هرمیتی هستند این مجموعه را می توان به عنوان پایه فضا انتخاب کرد. در این پایه داریم

$$Ae_i = \lambda_i e_i, \quad Be_i = \mu_i e_i \quad (83)$$

که از آن نتیجه می گیریم

$$ABe_i = B A e_i \longrightarrow AB = BA \longrightarrow [A, B] = 0. \quad (84)$$

برعکس فرض کنیم که $[A, B] = 0$.

ویژه بردارهای عملگر A را پیدا می کنیم. واگنی ویژه مقدار λ_i را g_i می نامیم. در پایه ویژه بردارهایش، A شکل زیر را پیدا می کند.

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 I_{g_1 \times g_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_k I_{g_k \times g_k} \end{pmatrix} \quad (85)$$

حال به ترتیب زیر عمل می کنیم: به ازای هر e_i

$$A(Be_i) = B(Ae_i) = B(\lambda_i e_i) = \lambda_i(Be_i), \quad (86)$$

که در آن از جابجاشدن A و B استفاده کرده ایم. رابطه فوق نشان می دهد که بردار Be_i نیز یک ویژه بردار عملگر A با ویژه مقدار λ_i است. بنابراین Be_i نیز برحسب بردارهای پایه ویژه فضای λ_i قابل بسط است. این امر به این معناست که در این پایه (همان پایه ای که A در آن قطری است) عملگر B به شکل زیر است:

$$B = \begin{pmatrix} B_{1g_1 \times g_1} & & \\ & \ddots & \\ & & B_{kg_k \times g_k} \end{pmatrix}. \quad (87)$$

به عبارت دیگر در پایه فوق عملگر A قطری و عملگر B بلوکه قطری شده است. حال می توان با تبدیل

$$S = \begin{pmatrix} S_{1g_1 \times g_1} & & \\ & \ddots & \\ & & S_{kg_k \times g_k} \end{pmatrix}. \quad (88)$$

که در آن S_i قطری کننده ماتریس B_i است کل ماتریس B را قطری کرد. این تبدیل قطری بودن A را دست نمی زند زیرا $S_i I_i S_i^\dagger = I_i$. پایه جدید پایه ای است که در آن هر دو عملگر قطری هستند.

۲.۱۰ نمادگذاری دیراک

پاول دیراک در ابداع نمادگذاری های جدید و ساده کننده ذوق و مهارت ویژه ای داشت. وی هم چنین بدون ترس از نارضایتی ریاضیدانان تابعی تعریف کرد که در همه نقاط خط اعداد حقیقی برابر با صفر بود و فقط در یک نقطه مقدار داشت آن هم مقدار بی نهایت! بعدها هر دوی این ابداعات دیراک در کنار ابداعات بسیار مهم او در فیزیک، مبنای محکمی در ریاضیات پیدا کردند. می توان از آن پایه های محکم ریاضی شروع کرد و سرانجام به این ابداعات رسید ولی ما ترجیح می دهیم که تقریباً گام های دیراک را در این موارد دوباره طی کنیم و روشنی و سادگی مفاهیم و قابلیت کاربرد آنها را فدای استحکام ریاضی کنیم. این کاری است که تا کنون فیزیکدان ها انجام داده اند و توانسته اند در فیزیک و هم چنین ریاضیات گام های شجاعانه ای بردارند

که نهایتاً هم به پیشرفت فیزیک ریاضیات منجر شده است و هم به پیشرفت ریاضیات. با این مقدمه در آینده این فصل ما نمادگذاری دیراک، و ضرب تانسوری فضاهای برداری را به روشی که برای محاسبه و کاربرد در مکانیک کوانتومی مفید باشد بیان خواهیم کرد. خواننده علاقمند به دقت ریاضی می تواند به کتاب های جبرخطی رجوع کند.

یک فضای برداری N_V بعدی با پایه بهنجار $\{e_1, e_2, \dots, e_N\}$ در نظر می گیریم. هر بردار $v \in V$ بسطی از بردارهای پایه به شکل زیر است:

$$v = \sum_{i=1}^N v_i e_i = \sum_{i=1}^N e_i v_i. \quad (89)$$

هرگاه از رابطه $v_i = \langle e_i, v \rangle$ استفاده کنیم می توانیم رابطه بالا را به شکل زیر بنویسیم:

$$v = \sum_{i=1}^N e_i \langle e_i, v \rangle. \quad (90)$$

از آنجا که این رابطه برای هر بردار دلخواه v درست است می توان گفت که عبارت $\sum_{i=1}^N e_i \langle e_i, \cdot \rangle$ مثل عملگر واحد عمل می کند. البته این گزاره همراه با این قیداضافه است که وقتی این عملگر روی هر برداری مثل v اثر می کند، جمله $\langle e_i, v \rangle$ ضرب داخلی را حساب کرده و مولفه v_i مشخص می شود که پس از قرارگرفتن در کنار e_i و جمع بستن روی همه i ها، بردار v را تولید می کند. بنابراین می توانیم بنویسیم

$$\sum_i e_i \langle e_i, \cdot \rangle = I. \quad (91)$$

این رابطه و بیان فوق را می توان به شکل بهتری نوشت اگر از این به بعد بردارها را به جای نماد ساده v با $|v\rangle$ نشان دهیم و همچنین ضرب داخلی دو بردار را به جای $\langle v, w \rangle$ با $\langle v|w\rangle$ نشان دهیم. در این صورت رابطه بالا به شکل زیر در می آید:

$$\sum_i |e_i\rangle \langle e_i| = I. \quad (92)$$

حال می توان پرسید که اگر $|v\rangle$ یک بردار است $\langle w|$ (در رابطه فوق $\langle e_i|$) چگونه چیزی است؟ پاسخ این است که $\langle w|$ می بایست چیزی باشد که در رابطه یا قرارداد زیر صدق کند:

$$\langle w|v\rangle = \langle w, v \rangle. \quad (93)$$

اگر یک پایه متعامد بهنجار برای فضا انتخاب کرده باشیم و در این پایه $|v\rangle$ را معادل یک بردار ستونی

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ v_n \end{pmatrix} \quad (94)$$

بگیریم آنگاه رابطه‌ی بالا نشان می‌دهد که می‌توان $\langle w|$ را معادل یک بردار سطری به صورت

$$\langle w| = (w_1^* \quad w_2^* \quad \cdot \quad \cdot \quad w_n^*) \quad (95)$$

بگیریم. بردار $|v\rangle$ را یک بردار *ket* و بردار $\langle w|$ را یک بردار *Bra* نام می‌نهیم.

می‌توان یک بردار *bra* مثل $\langle w|$ را در یک بردار *ket* مثل $|v\rangle$ ضرب کرد و یک عدد بدست آورد که همان ضرب داخلی بین دو بردار است،

$$\langle w|v\rangle = (w_1^*, w_2^*, \cdot, \cdot, w_n^*) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ v_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n w_i^* v_i. \quad (96)$$

هم چنین می‌توان یک بردار *ket* را در یک بردار *bra* ضرب کرد و یک ماتریس بدست آورد:

$$|v\rangle\langle w| = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ v_n \end{pmatrix} (w_1^*, w_2^* \quad \cdot \quad \cdot \quad w_n^*) = \begin{pmatrix} v_1 w_1^* & v_1 w_2^* & v_1 w_3^* & \cdot & v_1 w_n^* \\ v_2 w_1^* & v_2 w_2^* & v_2 w_3^* & \cdot & v_2 w_n^* \\ v_3 w_1^* & v_3 w_2^* & v_3 w_3^* & \cdot & v_3 w_n^* \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ v_n w_1^* & v_n w_2^* & v_n w_3^* & \cdot & v_n w_n^* \end{pmatrix} \quad (97)$$

رابطه‌ی $\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = I$ که به ازای هر پایه متعامد بهنجاری برقرار است رابطه بسیار مفیدی است و کاربرد آن معمولاً باعث می‌شود که بسیاری از قضایای جبر خطی تبدیل به اتحادهای بدیهی شوند. به عنوان مثال هرگاه این عبارت را در طرف چپ یک کت $|v\rangle$ به رابطه زیر می‌رسیم:

$$|v\rangle = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|v\rangle, \quad (98)$$

که در واقع بیان می‌کند که ضرایب بسط یک بردار $|v\rangle$ عبارتند از $v_i := \langle e_i|v\rangle$. هرگاه آن را در طرف راست یک برای $\langle v|$ قرار دهیم به رابطه زیر می‌رسیم

$$\langle v| = \sum_i \langle v|e_i\rangle\langle e_i|, \quad (99)$$

که بیان می کند ضرایب بسط برای $\langle v |$ برحسب پایه $|e_i\rangle$ ها برابرند با $v_i^* := \langle v | e_i \rangle$. می توانیم آن را هم در طرف راست و هم در طرف چپ یک عملگر مثل \hat{T} قرار دهیم و به رابطه ی زیر برسیم:

$$\hat{T} = \sum_{i,j} |e_i\rangle \langle e_i | \hat{T} | e_j \rangle \langle e_j | = \sum_{i,j} T_{ij} |e_i\rangle \langle e_j|, \quad (100)$$

که نشان می دهد ماتریس وابسته به یک عملگر \hat{T} برابر است با T که درایه های آن از رابطه ی $T_{ij} := \langle e_i | \hat{T} | e_j \rangle$ بدست می آیند.

در بسیاری از موارد وقتی که ابهامی پیش نمی آید، به جای نماد $|e_i\rangle$ از نماد ساده تر $|i\rangle$ برای نشان دادن یک بردار پایه استفاده می کنیم. در این صورت نتیجه بالا در مورد ماتریس مربوط به یک عملگر به صورت زیر در می آید:

$$T = \begin{pmatrix} \langle 1 | \hat{T} | 1 \rangle & \langle 1 | \hat{T} | 2 \rangle & \dots & \langle 1 | \hat{T} | n \rangle \\ \langle 2 | \hat{T} | 1 \rangle & \langle 2 | \hat{T} | 2 \rangle & \dots & \langle 2 | \hat{T} | n \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle n | \hat{T} | 1 \rangle & \langle n | \hat{T} | 2 \rangle & \dots & \langle n | \hat{T} | n \rangle \end{pmatrix}. \quad (101)$$

۱۱ نگاشت بین فضای کت ها و فضای برا ها

می توان گفت که با دو فضای برداری مواجه هستیم که یکی از آنها فضای کت ها و دیگری فضای برا ها است. با توجه به رابطه ی 95 داریم

$$\begin{aligned} |w\rangle = |v\rangle &\longrightarrow \langle w| = \langle v|, \\ |w\rangle = c|v\rangle &\longrightarrow \langle w| = c^* \langle v|, \\ |w\rangle = |u\rangle + |v\rangle &\longrightarrow \langle w| = \langle u| + \langle v|, \\ |w\rangle = \hat{T}|v\rangle &\longrightarrow \langle w| = \langle v| \hat{T}^\dagger. \end{aligned} \quad (102)$$

۱۲ عملگرهای تصویرگر

فضای برداری V و یک زیرفضای آن مثل W در نظر می گیریم. برای W یک پایه مثل $\{|i\rangle, i = 1, \dots, m\}$ در نظر می گیریم. در این صورت عملگر

$$P_W := \sum_{i=1}^m |i\rangle\langle i| \quad (103)$$

عملگر تصویر¹³ روی V خوانده می شود. این عملگر بردارهای فضا را بروی W تصویر می کند. این عملگر هرمیتی است و در شرط $P^2 = P$ صدق می کند. اگر دو زیرفضای W_1 و W_2 داشته باشیم که برهم عمود باشند (یعنی بردارهای آنها برهم عمود باشند) آنگاه بدیهی است که عملگرهای تصویرگر آنها با هم رابطه زیر را دارند:

$$P_1^2 = P_1, \quad P_2^2 = P_2, \quad P_1 P_2 = 0, \quad P_2 P_1 = 0. \quad (104)$$

۱.۱۲ تجزیه طیفی و عملگرهای تصویری

فرض کنید که A یک عملگر بهنجار باشد. اگر a_1 یک ویژه مقدار این عملگر با درجه واگنی K باشد، و ویژه بردارهای متعامد و یکه‌ی متناظر با این عملگر را با $|e_1^{(1)}\rangle, |e_1^{(2)}\rangle, \dots, |e_1^{(K)}\rangle$ نشان دهیم در این صورت ویژه فضای مربوط به a_1 با بردارهای یکه و متعامد فوق جاروب می شود و عملگر

$$P_1 = \sum_{i=1}^K |e_1^{(i)}\rangle\langle e_1^{(i)}|, \quad (105)$$

عملگر تصویر روی این ویژه فضا است. طیف عملگر A را به صورت زیر در نظر می گیریم:

$$\hat{A}|e_n^{(i)}\rangle = \lambda_n |e_n^{(i)}\rangle, \quad i = 1, 2, \dots, g_n, \quad (106)$$

که در آن g_n درجه واگنی ویژه مقدار λ_n است و بردارهای $|e_n^{(i)}\rangle$ یک پایه متعامد بهنجار تشکیل می دهند. عملگر واحد به شکل زیر نوشته می شود:

$$I = \sum_{n,i} |e_n^{(i)}\rangle\langle e_n^{(i)}|, \quad (107)$$

با قرار دادن عملگر واحد در دو طرف \hat{A} و توجه به رابطه‌ی 106 بدست می آوریم

$$\hat{A} = \sum_{n,i} \lambda_n |e_n^{(i)}\rangle\langle e_n^{(i)}| = \sum_n \lambda_n \left(\sum_{i=1}^{g_n} |e_n^{(i)}\rangle\langle e_n^{(i)}| \right) = \sum_n \lambda_n P_n, \quad (108)$$

که در آن P_n عملگر تصویر روی ویژه فضای مربوط به ویژه مقدار λ_n است.

¹³Projection Operator

۲.۱۲ توابع عملگرهای نرمال

در مکانیک کوانتومی اغلب نیاز داریم که توابعی از عملگرهای هرمیتی را تعریف کنیم. فرض کنید که T یک عملگر دلخواه و $f: C \rightarrow C$ تابعی بابت زیر باشد:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n \quad (109)$$

در این صورت تابع $f(T)$ نیز با همین بسط تعریف می شود.

$$f(T) := \sum_{n=0}^{\infty} f_n T^n. \quad (110)$$

از آنجا که عملگر T نرمال و در نتیجه قطری پذیر است می توان نوشت $T = \Omega D \Omega^{-1}$ که در آن D قطری شده T و Ω ماتریس قطری کننده T است. هرگاه به این نکته توجه کنیم که $T^n = \Omega D^n \Omega^{-1}$ آنگاه رابطه بالا به شکل زیر درمی آید:

$$f(T) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \Omega D^n \Omega^{-1} = \Omega \sum_{n=0}^{\infty} f_n D^n \Omega^{-1} = \Omega f(D) \Omega^{-1}, \quad (111)$$

که در آن

$$f(D) := \sum_{n=0}^{\infty} f_n D^n. \quad (112)$$

دقت کنید که ماتریس $f(D)$ براحتی محاسبه می شود. فرض کنید که T یک ماتریس N بعدی با مقادیر ویژه $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ باشد. در این صورت

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \lambda_N \end{pmatrix} \quad (113)$$

و با توجه به تعریف 112

$$f(D) = \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & & & & \\ & f(\lambda_2) & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & f(\lambda_N) \end{pmatrix}. \quad (114)$$

رابطه 111 در واقع تعریف کلی تری از تابع یک عملگر بدست می دهد که برای وقتی که تابع بسط تایلور نیز ندارد بکار می رود. این تعریف عبارت است از:

$$f(T) := \Omega f(D) \Omega^{-1}. \quad (115)$$

مثال: هرگاه $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ باشد، $\sqrt{\sigma_x}$ را پیدا کنید.

حل: پس از قطری کردن σ_x می فهمیم که

$$\sigma_x = H \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} H^\dagger \quad (116)$$

که در آن ماتریس قطری کننده برابر است با

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (117)$$

در این جا ماتریس قطری شده یعنی D دارای ۴ تا ریشه‌ی دوم متفاوت است. یکی از آنها مثلاً $\sqrt{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$ را در نظر می گیریم و بدست می آوریم

$$\sqrt{\sigma_x} = H \sqrt{D} H^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+i & 1-i \\ 1+i & 1-i \end{pmatrix}. \quad (118)$$

مثال: با همین شیوه می توان نشان داد که اگر A یک عملگر نرمال باشد با خاصیت $A^2 = I_-$ ، آنگاه

$$e^{i\theta A} = \cos \theta + iA \sin \theta. \quad (119)$$

برای اثبات این رابطه کافی است به این نکته توجه کنیم که ویژه مقادیرهای A برابرند با ± 1 . اگر یک ویژه مقدار را با λ نشان دهیم براحتی معلوم می شود که

$$e^{i\theta \lambda} = \cos \theta + i\lambda \sin \theta. \quad (120)$$

هرگاه ماتریس قطری شده را با D نشان دهیم از این رابطه بدست می آوریم

$$e^{i\theta D} = \cos \theta + iD \sin \theta. \quad (121)$$

که در نتیجه رابطه‌ی 119 اثبات می شود.

۱۳ جمع مستقیم دو فضا

تعریف: فرض کنید که V و W دو فضای به ترتیب m بعدی و n بعدی باشند جمع مستقیم این دو فضا به شکل زیر تعریف می شود

$$V \oplus W := \left\{ \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}, | v \in V, w \in W \right\}. \quad (122)$$

جمع دو بردار و ضرب یک بردار در یک اسکالر به شکل زیر تعریف می شود:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v' \\ w' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} v + v' \\ w + w' \end{pmatrix}, \\ \alpha \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \alpha v \\ \alpha w \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (123)$$

خواننده براحتمی می تواند تحقیق کند که $V \oplus W$ با جمع و ضرب تعریف شده در بالا واقعاً یک فضای برداری است. فرض کنید که $\{e_i\}_{i=1, \dots, m}$ یک پایه برای V و $\{f_j\}_{j=1, \dots, n}$ پایه ای برای W باشد. در این صورت

$$\left\{ \begin{pmatrix} e_i \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ f_j \end{pmatrix} \right\}_{i=1, \dots, m, j=1, \dots, n} \quad (124)$$

یک پایه برای $V \oplus W$ است. اثبات این امر به عهده خواننده است. به این ترتیب معلوم می شود که فضای برداری $V \oplus W$ دارای بعد $m+n$ است. دقت کنید که فضای $V \oplus W$ دارای دو زیرفضا به شکل زیر است:

$$\left\{ \begin{pmatrix} v \\ 0 \end{pmatrix}, | v \in V \right\}, \quad \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ w \end{pmatrix}, | w \in W \right\}, \quad (125)$$

این دو زیرفضا به ترتیب از چپ به راست با فضاهای V و W یکسان هستند. با توجه به این یکسانی و هم چنین با توجه به این که می توانیم بنویسیم

$$\begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ w \end{pmatrix} \quad (126)$$

می توانیم بگوییم که هر بردار از فضای $V \oplus W$ مجموعی از بردارهای فضای V و W است. دقت کنید که مجموعه بردارهای از نوع $\left\{ \begin{pmatrix} v \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$ و مجموعه ای بردارهای $\left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ w \end{pmatrix} \right\}$ هیچ اشتراکی ندارند.

هرگاه فضای V مجهز به ضرب داخلی $\langle \cdot, \cdot \rangle_V$ و فضای W مجهز به ضرب داخلی $\langle \cdot, \cdot \rangle_W$ باشند، می توان فضای برداری $V \oplus W$ را به یک ضرب داخلی مجهز کرد:

$$\left\langle \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} v' \\ w' \end{pmatrix} \right\rangle = \langle v, v' \rangle_V + \langle w, w' \rangle_W. \quad (127)$$

اثبات این که این رابطه واقعاً یک ضرب داخلی را تعریف می کند به عهده خواننده است.

مثال: خواننده می تواند براحتمی تحقیق کند که $R^3 = R^2 \oplus R$ ، یا بطور کلی $R^{m+n} = R^m \oplus R^n$.

حال دسته ای از تبدیلات خطی روی $V \oplus W$ وجود دارند که به شکل زیر هستند:

$$T = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}. \quad (128)$$

این نوع تبدیلات خطی در واقع روی فضای V مثل تبدیل خطی A و روی فضای W مثل تبدیل خطی B عمل می کنند. به همین جهت بهتر است که آنها را با $A \oplus B$ نشان دهیم. رابطه (128) نشان می دهد که اگر برای فضای برداری V و W پایه انتخاب کنیم و تبدیلات روی آنها را با ماتریس نشان دهیم، ماتریس تبدیل T بصورت بلوکه قطری درخواهد آمد. البته همه تبدیلات روی فضای $V \oplus W$ به صورت (128) نیستند.

۱۴ ضرب تانسوری فضاهای برداری

تعریف دقیق ضرب تانسوری فضاها، طوری که دارای استحکام ریاضی باشد برای منظور ما که کاربرد آن در مکانیک کوانتومی است، ممکن است که چندان مفید نباشد. ارایه این تعریف دقیق ممکن است ما را از فهم شهودی این مفهوم دور کند و هم چنین باعث شود که در کاربردهای محاسباتی آن ناتوان شویم. به جای این کار ما سعی می کنیم که تعریفی از این مفهوم ارائه کنیم که توانایی ما را برای کار با ضرب تانسوری فضاها گسترش دهد. نخست به تعریف ضرب تانسوری دو ماتریس دلخواه می پردازیم. **تعریف:** هرگاه $(A)_{m \times n}$ و $(B)_{p \times q}$ دو ماتریس با ابعاد داده شده باشند می توان ضرب تانسوری آنها را که ماتریسی با ابعاد $(mp \times nq)$ است به شکل زیر تعریف کرد:

$$(A \otimes B)_{ij,kl} := A_{ik} B_{jl} \quad (129)$$

به لحاظ عملی ضرب این دو ماتریس به شکل زیر انجام می شود:

$$A \otimes B := \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix} \quad (130)$$

در ماتریس فوق نحوه شمارش سطرها به ترتیب زیر است:

$$\{11, 12, 13, \dots, 1p, 21, 22, 23, \dots, 2p, \dots, m1, m2, m3, \dots, mp\}, \quad (131)$$

و نحوه شمارش ستون ها نیز به شکل زیر است:

$$\{11, 12, 13, \dots, 1q, 21, 22, 23, \dots, 2q, \dots, n1, n2, n3, \dots, nq\}. \quad (132)$$

این ضرب دارای خواص زیر است که خواننده می تواند با استفاده از تعریف (129) صحت آنها را تحقیق کند:

$$A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C$$

$$\begin{aligned}
A \otimes (\alpha B) &= (\alpha A) \otimes B = \alpha(A \otimes B) \\
(A \otimes B) \otimes C &= A \otimes (B \otimes C) \\
(A \otimes B)(C \otimes D) &= AC \otimes BD \\
(A \otimes B)^\dagger &= A^\dagger \otimes B^\dagger
\end{aligned} \tag{133}$$

نکنه‌ی مهم این است که در این نوع ضرب، هیچ نوع محدودیتی روی ابعاد ماتریس‌ها وجود ندارد و هر دو نوع ماتریسی را می‌توان در هم ضرب کرد. بنابراین می‌توان دو بردار Ket مثل $|v\rangle$ و $|w\rangle$ را در هم ضرب کرد و بردار جدیدی که آن را با $|v, w\rangle$ نشان می‌دهیم بدست آورد:

$$|v, w\rangle := |v\rangle \otimes |w\rangle. \tag{134}$$

هم‌چنین می‌توان دو بردار bra مثل $\langle x|$ و $\langle y|$ را نیز در هم ضرب کرد و یک بردار برای جدید بدست آورد که آن را با $\langle x, y|$ نشان می‌دهیم:

$$\langle x, y| = \langle x| \otimes \langle y|. \tag{135}$$

با استفاده از رابطه‌ی سوم در 133 بدست می‌آوریم:

$$\langle x, y|v, w\rangle = (\langle x| \otimes \langle y|)(|v\rangle \otimes |w\rangle) = \langle x|v\rangle \langle y|w\rangle. \tag{136}$$

حال برای فضای برداری V یک پایه با بردارهای $\{|i\rangle, i = 1, \dots, m\}$ و برای فضای برداری W یک پایه با بردارهای پایه $\{|j\rangle, j = 1 \dots n\}$ در نظر می‌گیریم. به این ترتیب ما کاری کرده‌ایم که V با C^m و فضای W نیز با C^n یکسان باشند. می‌توان ضرب تانسوری بردارهای پایه را مطابق با تعریف بالا بدست آوریم. به این ترتیب mn بردار پایه به شکل $|i\rangle \otimes |j\rangle$ بدست می‌آوریم که آنها را به اختصار با $|i, j\rangle$ نمایش می‌دهیم:

$$|i, j\rangle := |i\rangle \otimes |j\rangle \quad i = 1 \dots m, j = 1 \dots n. \tag{137}$$

با توجه به رابطه‌ی 136 این بردارهای متعامد و یکه هستند.

مثال: هرگاه V یک فضای برداری با پایه

$$\{|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\}$$

باشد آنگاه $V \otimes V$ یک فضای برداری ۴ بعدی با پایه‌های زیراست:

$$|0, 0\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |0, 1\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1, 0\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1, 1\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{138}$$

حال فضای $V \otimes W$ را فضایی تعریف می کنیم که از ترکیب خطی تمام این نوع بردارها با ضرایب مختلط تشکیل شده باشد، یعنی

$$V \otimes W = \left\{ \sum_{i,j} z_{ij} |i, j\rangle, \quad | z_{ij} \in C \right\}. \quad (139)$$

بنابراین تعریف بردارهای $\{|i, j\rangle\}$ یک پایه برای این فضا تشکیل می دهند و این به این معناست که بعد فضای $V \otimes W$ برابر است با mn . بازهم با استفاده از روابط 133 براحتی معلوم می شود که

$$|v, w\rangle = |v\rangle \otimes |w\rangle = \left(\sum_i v_i |i\rangle \right) \otimes \left(\sum_j w_j |j\rangle \right) = \sum_{i,j} v_i w_j |i, j\rangle. \quad (140)$$

دقت کنید که یک بردار دلخواه در فضای $V \otimes W$ را الزاماً نمی توان به صورت $|v\rangle \otimes |w\rangle$ نوشت مثل بردار زیر

$$|\psi\rangle := |0, 0\rangle + |1, 1\rangle, \quad (141)$$

زیرا هرگاه آن را مساوی $(a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle)$ قرار دهیم معلوم می شود که هیچ جوابی برای ضرایب a, b, c, d وجود ندارد. چنین بردارهایی را درهم تنیده¹⁴ می گوئیم.

بعد از ضرب تانسوری بردارها می توانیم ضرب تانسوری عملگرها را نیز تعریف کنیم. هرگاه $\hat{A} : V \rightarrow V$ و $\hat{B} : W \rightarrow W$ دو عملگر باشند، عملگر $\hat{A} \otimes \hat{B} : V \otimes W \rightarrow V \otimes W$ را به عنوان عملگری تعریف می کنیم که ماتریس آن ضرب تانسوری ماتریس های مربوط به \hat{A} و \hat{B} باشد. به عبارت دیگر

$$\langle i, j | \hat{A} \otimes \hat{B} | k, l \rangle = \langle i | \hat{A} | k \rangle \langle j | \hat{B} | l \rangle. \quad (142)$$

به این ترتیب وقتی که عملگر $\hat{A} \otimes \hat{B}$ روی بردار $|v\rangle \otimes |w\rangle$ اثر می کند، بعد از کمی محاسبه خواهیم داشت:

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})(|v\rangle \otimes |w\rangle) = (\hat{A}|v\rangle) \otimes (\hat{B}|w\rangle). \quad (143)$$

بحث ما درباره ی ضرب تانسوری دو فضای برداری در اینجا به پایان می رسد. همانطور که در ابتدا گفتیم معرفی ما از این مفهوم به چند دلیل فاقد استحکام ریاضی بود. نخست آنکه هر دو فضا را محدود بعد گرفتیم. دوم آنکه از همان ابتدا یک پایه برای هر دو فضا معرفی کردیم و به این ترتیب هر دو فضا را در آن پایه خاص به فضای بردارهای مختلط یعنی C^m و C^n تقلیل دادیم. به این ترتیب همه چیز را از تعریف ضرب تانسوری دو ماتریس با بعد دلخواه 129 آغاز کردیم. و پیش رفتیم. در این

¹⁴Entangled States

چارچوب ممکن است کسی بپرسد که چگونه ضرب تانسوری دو فضای برداری مثل $C^m \otimes M_{p,q}(C)$ که بردارهای اولین فضا بردارهای m بعدی مختلط و بردارهای دومین فضا به صورت ماتریس ها هستند را انجام می دهیم؟ پاسخ این است که وقتی برای دومین فضا نیز یک پایه انتخاب کنیم آنگاه هر ماتریس به صورت یک بردار مختلط pq بعدی درخواهد آمد و ما می توانیم از تعاریف ارائه شده در بالا استفاده کنیم. هم چنین اگر کسی بپرسد که چگونه ضرب تانسوری دو فضا مثل $C[a, b] \otimes C^m$ که بردارهای اولی تابع و بردارهای دومی n تایی های مرتب هستند را انجام می دهیم بازهم می گوئیم که گسسته کردن فاصله ی $[a, b]$ می توان هر تابع $f \in C[a, b]$ را به صورت یک N تایی مرتب در نظر گرفت که در آن N یک عدد بسیار بزرگ است و بازهم مسئله به ضرب دو بردار مختلط چند بعدی تقلیل پیدا می کند. علاوه به این مشکلات مفهومی که به این روش نه چندان دلچسب رفع و رجوع می شوند این اشکال نیز وجود دارد که باید نشان دهیم وقتی که پایه ی دو فضای برداری را عوض می کنیم موجوداتی که تعریف کرده ایم مثل ضرب دو بردار یا ضرب دو عملگر تغییر نمی کنند. می بینیم که روش بکاررفته برای تعریف ضرب تانسوری دو فضا اگر چه سراسر است و ساده است ولی از مشکلات مفهومی رنج می برد. خواننده ای که مایل است از این رنج رهایی یابد می تواند به یک کتاب درسی در زمینه جبرخطی مراجعه کند. شاید هم در ویراست های آینده این درسنامه تعریف دقیق به صورت یک ضمیمه آورده شود.

۱۵ تابع دلتای دیراک

یکی از مهمترین ابداعات فرعی دیراک معرفی تابعی بود که اکنون به نام خود او تابع دلتای دیراک نامیده می شود. در نگاه اول می توان گفت که تابع دلتای دیراک در همه نقاط محور حقیقی برابر صفر است بجز در یک نقطه که مقدار آن بی نهایت است. برخلاف نام اش، تابع دلتا یک تابع نیست بلکه می توان آن را به صورت حدّ یک دنباله از توابع پیوسته در نظر گرفت.

تابع پیوسته زیر را در نظر می گیریم که در آن $0 < \epsilon \ll 1$.

$$\delta_\epsilon(x) := \begin{cases} 0 & x \leq -\epsilon \\ \frac{1}{2\epsilon} & -\epsilon \leq x \leq \epsilon \\ 0 & \epsilon \leq x \end{cases} \quad (144)$$

این تابع دارای خاصیت های زیر است:
الف:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\epsilon(x) dx = 1, \quad (145)$$

ب: برای هر تابعی که در فاصله $(-\epsilon, \epsilon)$ متناهی باشد،

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_{\epsilon}(x) f(x) dx = f(0) + O(\epsilon) \quad (146)$$

که در آن $O(\epsilon)$ کمیتی از مرتبه ϵ است. حد تابع $\delta_{\epsilon}(x)$ را وقتی که $\epsilon \rightarrow 0$ با تابع $\delta(x)$ نشان می‌دهیم و قرار می‌دهیم

$$\delta(x) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_{\epsilon}(x). \quad (147)$$

و آن را تابع دلتای دیراک می‌نامیم. به خودی خود $\delta(x)$ یک تابع نیست بلکه می‌توان به آن به عنوان یک عملگر نگاه کرد که تنها در زیر یک انتگرال معنادار است. در نتیجه خواهیم داشت:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0). \quad (148)$$

می‌توان تابع $\delta(x-b)$ را به طور مشابه تعریف کرد. این تابع دارای خاصیت‌های زیر است:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-b) dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-b) f(x) dx = f(b), \quad (149)$$

تابع دلتای دیراک را می‌توان به عنوان حد دنباله‌های دیگری از توابع نیز گرفت. در زیر چند تا از این دنباله‌ها را معرفی می‌کنیم.

دنباله اول: قرار می‌دهیم

$$g_{\sigma}(x) := \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}, \quad (150)$$

که نشان دهنده تابعی گاوسی با پهنای σ و ماکزیمم $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}$ در نقطه $x=0$ است. سطح زیر منحنی آن نیز برابر است با ۱. در اینجا داریم

$$\delta(x) := \lim_{\sigma \rightarrow 0} g_{\sigma}(x). \quad (151)$$

دنباله دوم: قرار می دهیم

$$\delta_T(x) := \frac{1}{2\pi} \int_{-T}^T e^{ix} dt = \frac{\sin Tx}{\pi x}. \quad (152)$$

داریم

$$\int_{-\infty}^{\infty} D_T(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} D_T(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin y}{y} dy = 1. \quad (153)$$

برای این دنباله داریم

$$\delta(x) := \lim_{T \rightarrow \infty} D_T(x). \quad (154)$$

واز آنجا به رابطه بسیار مهم زیر می رسم:

$$\delta(x) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixt} dt. \quad (155)$$

بعضی دیگر از خواص تابع دلتا به شرح زیر هستند:

$$\delta(x - x') = \delta(x' - x) \\ \int \delta'(x - x') f(x') dx' = -\frac{df}{dx}(x). \quad (156)$$

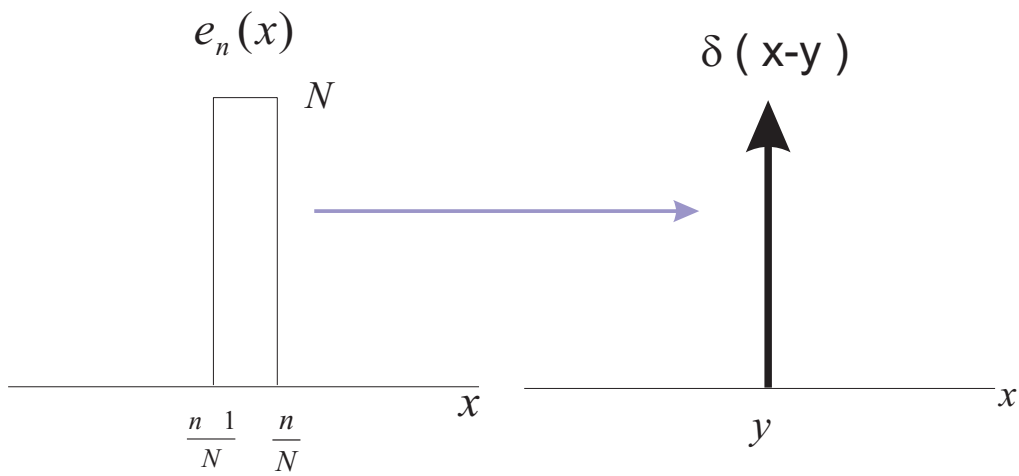
۱.۱۵ توابع دلتا به عنوان پایه ای برای فضای توابع

در این قسمت می خواهیم نشان دهیم که توابع دلتا را می توان به عنوان یک پایه برای فضای توابع در نظر گرفت. فضای توابع $F[0, 1]$ را در نظر می گیریم. هیچ نوع فرض بخصوصی درباره این توابع نظیر پیوستگی یا مشتق پذیری نمی کنیم. این فضای توابع بی نهایت بعدی است. حال به ازای هر عدد بزرگ N برای این فضای یک پایه در نظر می گیریم که با تقریب خوبی می تواند فضای توابع را جابجاء کند. سپس حد $N \rightarrow \infty$ را در نظر می گیریم که در آن توابع فضا با دقت توسط پایه تعریف شده نمایش داده می شوند. فاصله $[0, 1]$ را به N قسمت تقسیم می کنیم. به این ترتیب داریم

$$[0, 1] = \Delta_1 \cup \Delta_2 \cup \dots \cup \Delta_N \quad (157)$$

که در آن

$$\Delta_n := \left[\frac{n-1}{N}, \frac{n}{N} \right] \quad (158)$$



شکل ۳: درحد $N \rightarrow \infty$ ، شاخص گسسته $\frac{n}{N}$ به سمت شاخص پیوسته y و تابع $e_n(x)$ به تابع $\delta(x-y)$ میل می کند.

توابع زیر را تعریف می کنیم:

$$e_n(x) := \begin{cases} N & x \in \Delta_n \\ 0 & x \notin \Delta_n \end{cases} \quad (159)$$

سطح زیراین توابع مساوی بایک است. این توابع بریکدیگر عمودند اما بهنجار نیستند:

$$\langle e_n, e_m \rangle \equiv \int_0^1 e_n^*(x) e_m(x) dx = N \delta_{m,n}. \quad (160)$$

هم چنین این خاصیت را دارند که به ازای هر تابع $f \in F[0, 1]$ داریم:

$$\langle e_n, f \rangle \equiv \int_0^1 e_n^*(x) f(x) dx = N \int_{x \in \Delta_n} f(x) dx =: N \left(\frac{1}{N} f(x_n) \right) = f(x_n), \quad (161)$$

که در آن $x_n \in \Delta_n$ نقطه ای درون Δ_n است که با تقریب خوبی نشان دهنده مقدار تابع در ناحیه Δ_n است، به عبارت دیگر:

$$f(x_n) := \frac{\int_{x \in \Delta_n} f(x) dx}{\frac{1}{N}} \quad (162)$$

حال N را به سمت بی نهایت میل می دهیم. در این حالت اندیس n نیز جای خود را به یک اندیس پیوسته مثل $y := \frac{n}{N}$ می دهد. تابع $e_n(x)$ نیز مطابق با نمایشی که قبلاً در مورد توابع دیراک دیدیم به تابع دلتای دیراک یعنی $\delta(x-y)$ میل می کند، شکل (۳)

نحوه تبدیل کمیت ها درحد $N \rightarrow \infty$ به شکل زیر است.

$$\begin{aligned}
\frac{n}{N} &\longrightarrow y \\
e_n(x) &\longrightarrow \delta(x - y) \\
|e_n\rangle &\longrightarrow |y\rangle \\
\langle x|e_n\rangle &\longrightarrow \langle x|y\rangle \\
\langle e_n|e_m\rangle = \delta_{n,m} &\longrightarrow \langle y|y'\rangle = \delta(y - y').
\end{aligned}
\tag{163}$$

تابع e_n را در این حالت به صورت برداری $|y\rangle$ نشان می دهیم که نمایش پرای آن به صورت $|y\rangle$ است. رابطه (161) به شکل زیردرمی آید.

$$\langle y|f\rangle = \int_0^1 \delta(y - x)f(x)dx = f(y),
\tag{164}$$

هرگاه در این حد $N\delta_{m,n}$ را به عنوان تابع $K(y, y')$ نشان دهیم که در آن $y = \frac{n}{N}$ و $y' = \frac{m}{N}$ هستند، از تساوی

$$\sum_n N\delta_{m,n} \frac{1}{N} = 1
\tag{165}$$

نتیجه می گیریم که

$$\int K(y, y')dy' = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_m N\delta_{m,n} \frac{\Delta y}{\Delta m} = \sum_m N\delta_{m,n} \frac{1}{N} = 1.
\tag{166}$$

بنابراین $K(y, y')$ همان تابع دلتای دیراک است و رابطه (160) را می بایست به صورت زیرنوشت:

$$\langle y|y'\rangle = \delta(y - y').
\tag{167}$$

یا

$$\int_0^1 dx \delta(x - y)\delta(x - y') = \delta(y - y').
\tag{168}$$

آنچه که می خواهیم در پایان این بخش روی آن تاکید کنیم آن است که یک تابع $f \in F[0, 1]$ را به صورت یک بردارکت $|f\rangle$ یا برای $\langle f|$ نمایش می دهیم. مقدار این تابع یعنی $f(x)$ تصویر آن روی بردار پایه $|x\rangle$ است، یعنی

$$f(x) = \langle x|f\rangle. \quad (169)$$

رابطه (168) نیز به شکل زیر درمی آید:

$$\int_0^1 \langle y|x\rangle \langle x|y'\rangle dx = \langle y|y'\rangle, \quad (170)$$

و با برداشتن $|y\rangle$ و $|y'\rangle$ از دو طرف

$$\int_0^1 |x\rangle \langle x| dx = I, \quad (171)$$

که در آن I عملگر همانی است.

باید تاکید کنیم که تنها برای سادگی فاصله $[0, 1]$ را در نظر گرفتیم. این پایه برای فضای توابع $F[a, b]$ و یا $F(-\infty, \infty)$ نیز برقرار است. هم چنین براحتی این روابط به بیشتر از یک بعد نیز تعمیم می یابند.

۱۶ تبدیل فوریه

فضای توابع مختلط در فاصله $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$ را در نظر می گیریم. این فضا را با $C[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$ نشان می دهیم. ضرب داخلی روی این فضا به شکل $\langle f, g\rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x)g^*(x)dx$ تعریف شده است. توابع

$$e_n(x) := \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{2\pi i n x}{L}}, \quad n \in Z \quad (172)$$

را در نظر می گیریم. این توابع بر یکدیگر عمود بوده و نرم همه آنها برابر با واحد است:

$$\langle e_n, e_m\rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e_n^*(x)e_m(x)dx = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{\frac{-2\pi i n x}{L}} e^{\frac{2\pi i m x}{L}} dx = \delta_{n,m}. \quad (173)$$

علاوه بر این، هر تابع دلخواه را می توان بر حسب این توابع بسط داد:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e_n(x). \quad (174)$$

ضرایب f_n را می توان به ترتیب زیر بدست آورد:

$$f_n = \langle e_n, f \rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e_n^*(x) f(x) dx = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-\frac{2\pi i n x}{L}} f(x) dx. \quad (175)$$

بنابراین مجموعه توابع $\{e_n\}$ تشکیل یک پایه برای این فضا می دهند. با جایگزینی (175) در رابطه (174) بدست می آوریم

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e_n^*(y) f(y) dy e_n(x) = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} e_n(y)^* e_n(x) \right) f(y) dy \quad (176)$$

مقایسه ای با رابطه (156) نشان می دهد که

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e_n(y)^* e_n(x) = \delta(x - y). \quad (177)$$

این رابطه را رابطه کامل بودن پایه های $\{e_n\}$ می گوئیم.

حال L را به سمت بی نهایت میل می دهیم. در این حالت توابع $e_n(x)$ بخاطر عامل $\frac{2\pi i n}{L}$ بسیار به هم نزدیک می شوند و در نتیجه بهتر است که آنها را بایک شاخص پیوسته یعنی $k := \frac{2\pi n}{L}$ مشخص کنیم. علاوه بر آن اگر به همین شکل در این توابع حد $L \rightarrow \infty$ را اعمال کنیم، به خاطر عامل $\frac{1}{\sqrt{L}}$ این توابع همگی صفر خواهند شد. بنابراین می بایستی توابع پایه جدید را ضمن جایگزینی شاخص گسسته $\frac{2\pi n}{L}$ با شاخص پیوسته k در توابع اولیه در ضریب مشخصی نیز ضرب کنیم. توابع جدید را با $\hat{e}_k(x)$ نشان می دهیم و قرار می دهیم

$$\hat{e}_k(x) := A e_n(x) \quad k := \frac{2\pi n}{L} \quad (178)$$

که در آن ضریب A می بایست تعیین شود. بهترین راه برای این کار توجه به کامل بودن پایه یعنی رابطه (177) است. این رابطه را به صورت زیر می توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e_n(y)^* e_n(x) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} e_n(y)^* e_n(x) \frac{\Delta n}{\Delta k} \Delta k \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1}{C^2} \hat{e}_k(y)^* \hat{e}_k(x) \frac{L}{2\pi} \Delta k = \delta(x - y). \end{aligned} \quad (179)$$

این رابطه به مامی گوید که می بایست C را برابر با $\sqrt{\frac{L}{2\pi}}$ بگیریم. باین جایگزینی خواهیم داشت:

$$\hat{e}_k(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (180)$$

ورابطه (179) به شکل زیردرمی آید:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{e}_k^*(x) \hat{e}_k(y) dk \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-y)} dk = \delta(x-y). \quad (181)$$

باین جایگزینی روابط قبلی یک به یک تغییرمی کنند. نخست به رابطه (174) نگاه می کنیم: از آنجا که شاخص n جای خود را به یک شاخص پیوسته $k = \frac{2\pi n}{L}$ داده است این رابطه به صورت زیردرمی آید:

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e_n(x) \approx \sum_{k=-\infty}^{\infty} f_n e_n(x) \frac{\Delta n}{\Delta k} \Delta k \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} f_n e_n(x) \frac{L}{2\pi} \Delta k = \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{f}(k) \hat{e}_k(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{f}(k) dk. \end{aligned} \quad (182)$$

که در آن $\hat{f}(k) := \sqrt{\frac{L}{2\pi}} f_n$. از رابطه بالا می توانیم با توجه به رابطه (175)، $\hat{f}(k)$ را بر حسب $f(x)$ بدست آورد:

$$\hat{f}(k) \equiv \sqrt{\frac{L}{2\pi}} f_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx. \quad (183)$$

جفت روابط

$$\begin{aligned} f(x) &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{f}(k) dk \\ \hat{f}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx. \end{aligned} \quad (184)$$

رایک تبدیل فوریه در فضای توابع یک متغیره می گویند. این روابط به صورت زیر به فضای n بعدی تعمیم می یابند.

$$\begin{aligned} f(x) &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik \cdot x} \hat{f}(k) d^n k \\ \hat{f}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik \cdot x} f(x) d^n x. \end{aligned} \quad (185)$$

در این جا مبانی ریاضی لازم برای درک ساختار مکانیک کوانتومی به پایان می رسد. در ضمیمه هایی که در صفحات بعد آمده اند، خواننده بعضی مطالب اختیاری را خواهد آموخت.

۱۷ ضمیمه: یک قضیه در مورد توابع عملگرهای بهنجار

در متن درس دیدیم که چگونه می توان یک تابع از یک عملگر نرمال را تعریف کرد. در این ضمیمه یک قضیه خیلی جالب در مورد توابع این نوع عملگرها ثابت می کنیم که در وهله اول دور از ذهن به نظر می رسد.

قضیه: اگر T یک عملگر بهنجار باشد تابع $f(T)$ همواره یک چند جمله ای خواهد بود. (دور از ذهن بودن این قضیه از اینجا معلوم می شود که مثلاً تابع $f(T) = \sin(T)$ یک چند جمله ای بر حسب T است و نه آنطور که در مورد اعداد می دانیم یک سری بی نهایت.)
اثبات: چون T بهنجار است داریم

$$T = \sum_{i=1}^k \lambda_i P_i, \quad (186)$$

و از آنجا

$$f(T) = \sum_{i=1}^k f(\lambda_i) P_i. \quad (187)$$

حال می توانیم عملگرهای تصویرگر P_i را بر حسب T و توان های آن بنویسیم. فرض کنید که $P_j = g_j(T)$ که در آن $g_j(x)$ تابعی است که می خواهیم فرم آن را پیدا کنیم. در این صورت خواهیم داشت

$$P_j := g_j(T) = g_j\left(\sum_i \lambda_i P_i\right) = \sum_i g_j(\lambda_i) P_i \quad (188)$$

که از آن نتیجه می گیریم $g_j(\lambda_i) = \delta_{ij}$. بنابراین هر تابع $g_j(x)$ می بایست چنان باشد که به ازای $x = \lambda_j$ مقدار آن برابر با ۱ و به ازای $x \neq \lambda_j$ مقدار آن برابر با صفر باشد. چنین تابعی فرم زیر را دارد:

$$g_j(x) = \prod_{k \neq j} \frac{x - \lambda_k}{\lambda_j - \lambda_k} \quad (189)$$

در نتیجه

$$P_j \equiv g_j(T) = \prod_{k \neq j} \frac{T - \lambda_k}{\lambda_j - \lambda_k}. \quad (190)$$

این رابطه نشان می دهد که هر عملگر تصویرگر چیزی نیست جز یک چند جمله ای بر حسب T و در نتیجه تابع $f(T)$ نیز چیزی جز یک چند جمله ای بر حسب T نخواهد بود. به عبارت بهتر می توانیم بنویسیم

$$f(T) = \sum_{i=1}^k f(\lambda_i) \prod_{k \neq i} \frac{T - \lambda_k}{\lambda_i - \lambda_k}. \quad (191)$$

۱۸ مسئله ها

۱ - یک عملگر بهنجار مثل T در نظریه گیریم. این عملگر دارای این خاصیت است که $T^2 = I$. نشان دهید که

$$e^{\alpha T} = \cosh \alpha I + \sinh \alpha T. \quad (192)$$

۲ - عملگر $T: R^2 \rightarrow R^2$ را در نظر بگیرید که مطابق با رابطه زیر تعریف می شود:

$$T(x, y) = (-y, x)e \quad (193)$$

نشان دهید که

$$e^{\alpha T} = \sin \alpha T + \cos \alpha I. \quad (194)$$

اثر $e^{\alpha T}$ را بر نقطه (x, y) حساب کنید.

۳ - عملگر بهنجاری است که در رابطه $S^3 = I$ صدق می کند. عملگر $e^{i\alpha S}$ زیرا به صورت ترکیبی خطی از عملگرهای I, S و S^2 بنویسید.

۴ - فرض کنید که A و B دو عملگر بهنجار باشند. تابع

$$f(\lambda) := e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} \quad (195)$$

را در نظریه گیریم. حال می توانیم این تابع را به عنوان یک تابع تحلیلی حول $\lambda = 0$ بسط دهیم و بنویسیم

$$f(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \lambda^n. \quad (196)$$

الف: با محاسبه مشتقات متوالی $f(\lambda)$ طرف راست را بر حسب B و تعویضگرهای متوالی $[A, B]$ ، $[A, [A, B]]$ ، $[A, [A, [A, B]]]$ و ... بنویسید.

ب: هرگاه داشته باشیم $[A, B] = \alpha I$ عبارت $e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}$ را حساب کنید.

۵ - ماتریس های پائولی را به ترتیب زیر در نظر بگیرید:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (197)$$

اگر $\mathbf{n} := (n_x, n_y, n_z)$ یک بردار یکه باشد عبارت $\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma}$ برابر است با $\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma} = n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z$.

الف: اتحاد های زیر را ثابت کنید:

$$\sigma_k \sigma_l = \delta_{kl} + i \epsilon_{klm} \sigma_m$$

$$(\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma})(\mathbf{m} \cdot \vec{\sigma}) = \mathbf{m} \cdot \mathbf{n} I + i(\mathbf{m} \times \mathbf{n}) \cdot \vec{\sigma}$$

$$(\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma})(\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma}) = I. \quad (198)$$

ب: ویژه مقادیر و ویژه بردارهای عملگرهای پاولی را پیدا کنید.

ج: ویژه بردارها و ویژه بردارهای عملگر $\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma}$ را حساب کنید.

۶- در یک فضای n بعدی که بایر بردارهای پایه $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n-1\rangle$ تعریف می شود عملگرهای زیر تعریف شده اند:

$$\begin{aligned} S|0\rangle &= |1\rangle, & S|1\rangle &= |2\rangle, & \dots & & S|n-1\rangle &= |0\rangle \\ T|0\rangle &= |0\rangle, & T|1\rangle &= \xi|1\rangle, & \dots & & T|n-1\rangle &= \xi^{n-1}|2\rangle \end{aligned} \quad (199)$$

که در آن ξ ریشه n ام یک است یعنی $\xi^n = 1$.

الف: رابطه جابجایی زیر را حساب کنید:

$$[S, T] \quad (200)$$

ب: طرف راست عبارت زیر را حساب کنید:

$$e^{i\alpha S} T e^{-i\alpha S} \quad (201)$$

ج: اثر $e^{\frac{2\pi i}{n} S}$ روی یک حالت $|k\rangle$ چه حالتی است.

د: ویژه مقادیر و ویژه بردارهای عملگر S را حساب کنید.

ه: هرگاه تعریف کنیم $H = S + S^{-1} - 2$ ، ویژه مقادیر و ویژه بردارهای عملگر H را بدست آورید.

۷ - عملگرهای A و B در رابطه $[A, B] = I$ صدق می کنند. طرف راست عبارت های زیر را حساب کنید:

$$\begin{aligned} e^{\alpha A} B e^{-\alpha A} \\ e^{\alpha A} e^{\beta B} e^{-\alpha A}. \end{aligned} \quad (202)$$

۸ - نشان دهید که برای هر عملگر A رابطه زیر که در آن ϵ پارامتری نهایت کوچکی است، تا مرتبه اول از ϵ برقرار است:

$$\det(I + \epsilon A) = 1 + \epsilon \text{Tr}(A) \quad (203)$$

حال نشان دهید که

$$\det(e^A) = e^{\text{Tr}(A)}. \quad (204)$$

۹ - ماتریس $A = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}$ را در نظر بگیرید.

الف: به ازای چه مقادیری از a این ماتریس یک ماتریس مثبت است؟

ب: به ازای آن مقادیر ماتریس \sqrt{A} را بدست آورید.

ج: ماتریس \sqrt{A} را بر حسب ماتریس های I و A بنویسید.

۱۰ - هرگاه B یک عملگر باشد

الف: ثابت کنید که عملگر BB^\dagger همواره مثبت است.

ب: ماتریس زیر را در نظر بگیرید:

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (205)$$

ماتریس \sqrt{B} را حساب کنید.

ج: ماتریس \sqrt{B} را بر حسب توان های صحیح B بنویسید.

۱۱ - عملگرهای زیر را در نظر بگیرید:

$$A = \sum_{n=0}^N \sqrt{n+1} |n\rangle \langle n+1|, \quad A^\dagger = \sum_{n=0}^N \sqrt{n+1} |n+1\rangle \langle n|. \quad (206)$$

الف: جابجاگر این دو عملگر را حساب کنید.

ب: ردّ دو طرف تساوی $[A, A^\dagger]$ و نشان دهید که ردّ هر دو طرف مساوی صفر است.

ج: حال فرض کنید که $N \rightarrow \infty$ و نشان دهید که $[A, A^\dagger] = I$. در این حالت ردّ دو طرف را حساب کنید.