

VANJSKI UMNOŽAK, MATRICE...

Počnimo s vrlo jasnom i zornom prispodobom o uobičajenim vektorima u trodimenzijskom prostoru. Bazu tog vektorskog prostora, umjesto uobičajenih vektora \vec{i} , \vec{j} i \vec{k} , označavat ćemo s \vec{e}_1 , \vec{e}_2 i \vec{e}_3 . Svaki vektor \vec{a} u tom prostoru možemo prikazati kao linearни spoj baznih vektora

$$\vec{a} = a_1 \vec{e}_1 + a_2 \vec{e}_2 + a_3 \vec{e}_3$$

Budući da vektori $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ tvore ortonormiranu bazu, tj. vrijedi

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij},$$

koordinate vektora a_1, a_2, a_3 možemo prikazati kao skalarne umnoške vektora \vec{a} s vektorima baze. To znači da vrijedi

$$\vec{a} = (\vec{a} \cdot \vec{e}_1) \vec{e}_1 + (\vec{a} \cdot \vec{e}_2) \vec{e}_2 + (\vec{a} \cdot \vec{e}_3) \vec{e}_3$$

U ovoj se jednadžbi vektor \vec{a} pojavljuje na desnoj strani tako kao da bismo ga mogli izlučiti ispred zagrade. To možemo učiniti jedino ako se dogovorimo da bazni vektori, koji bi ostali u zagradi, tvore posebni umnožak, takav da umnožak dvaju baznih vektora ne djeluje između, tj. **unutar**, vektora (takav unutarnji umnožak smo već upoznali—to je skalarni umnožak) nego prema van, na neki vektor, pri čemu je rezultat takvog umnoška opet vektor, ovisan o vektoru na koji djeluje vanjski umnožak baznih vektora.

Uvedimo posebnu oznaku za vanjski umnožak dvaju vektora:

$$\vec{e}_i \circ \vec{e}_j$$

tako da prikaz vektora u određenoj ortonormiranoj bazi možemo napisati kao

$$\vec{a} = (\vec{e}_1 \circ \vec{e}_1 + \vec{e}_2 \circ \vec{e}_2 + \vec{e}_3 \circ \vec{e}_3) \vec{a} \quad (1)$$

uz očitu definiciju

$$(\vec{e}_1 \circ \vec{e}_1) \vec{a} = (\vec{e}_1 \cdot \vec{a}) \vec{e}_1 = a_1 \vec{e}_1 , \dots itd$$

To znači da je vanjski umnožak dvaju vektora **operator**. Možemo definirati $3 \times 3 = 9$ takvih operatora E_{ij}

$$E_{ij} \vec{a} = (\vec{e}_i \circ \vec{e}_j) \vec{a} = (\vec{e}_j \cdot \vec{a}) \vec{e}_i = a_j \vec{e}_i , \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2)$$

Budući da jednadžba (1) vrijedi **za svaki vektor**, zaključujemo da mora vrijediti sljedeća jednakost

$$\sum_{i=1}^3 E_{ii} = 1 \quad (3)$$

Jednadžba (3) se zove **relacija potpunosti (kompletnosti)**.

Logično je očekivati da će sustav baznih vektora u određenom smislu biti potpun, tj. da se svaki vektor može izraziti kao linearни spoj tih vektora. Jednadžba (3) samo izražava tu činjenicu, gdje jedinicu na desnoj strani valja shvatiti kao jedinični operator. Idemo proučiti svojstva gorenavedenih 9 "elementarnih" operatora.

1.) Svojstvo idempotentnosti

Izravnim računom dobivamo sljedeći identitet

$$E_{ii}^2 = (\vec{e}_i \circ \vec{e}_i)(\vec{e}_i \circ \vec{e}_i) = \vec{e}_i(\vec{e}_i \cdot \vec{e}_i) \circ \vec{e}_i = \vec{e}_i \circ \vec{e}_i = E_{ii}$$

Operator E_{ii} je **projektivni operator**. Njegovo djelovanje na određeni vektor se svodi na projekciju vektora na određenu i -tu os u prostoru. Idempotentnost znači samo to da kad jednom projicirate vektor na određenu os, ponovljena projekcija na tu istu os ne će ništa promijeniti.

2.) Svojstvo nil-potentnosti

$$E_{ij}^2 = 0 \quad , \quad i \neq j$$

To znači da je projekcija jedne osi na neku drugu os jednaka 0. Logično, zar ne? Sjena predmeta ne baca svoju sjenu.

3.) Svojstvo potpunosti

$$\sum_{i=1}^3 E_{ii} = 1$$

Razumije se da je zbroj svih mogućih projekcija određenoga vektora jednak upravo tom istom vektoru.

4.) Linearna nezavisnost

Devet operatora E_{ij} , $i, j = 1, 2, 3$ su međusobno linearne nezavisne. Dokaz te činjenice je u svojstvima idempotentnosti i nil-potentnosti.

To znači da ti operatori mogu poslužiti kao baza novog vektorskog prostora, kojega su elementi upravo linearni operatori i da se svaki linearni linearni operator može predočiti u obliku linearnog spoja devet baznih operatora.

Budući da operator svojim djelovanjem na vektor napravi neki drugi vektor, dovoljno je znati kako određeni operator djeluje na bazne vektore. Uzmimo neki operator A koji djeluje na vektor \vec{a}

$$\begin{aligned} A\vec{a} &= A\left(\sum_{i=1}^3 a_i \vec{e}_i\right) = \sum_{i=1}^3 a_i A\vec{e}_i = \sum_{i=1}^3 a_i \sum_{j=1}^3 a_{ji} \vec{e}_j = \sum_{j=1}^3 \left(\sum_{i=1}^3 a_{ji} a_i \right) \vec{e}_j = \\ &= \sum_{j=1}^3 \left(\sum_{i=1}^3 a_{ji} \vec{a} \cdot \vec{e}_i \right) \vec{e}_j = \sum_{j=1}^3 \left(a_{ji} \sum_{i=1}^3 \vec{e}_j \circ \vec{e}_i \right) \vec{a} = \sum_{i,j=1}^3 a_{ji} E_{ji} \vec{a} \end{aligned}$$

Odavde slijedi

$$A = \sum_{i,j=1}^3 a_{ji} E_{ji}$$

Ova relacija upravo znači da se svaki operator može izraziti kao linearni spoj baznih operatora E_{ij} . Koeficijenti tog linearног spoja (tj. koordinate operatora u bazi E_{ij}) su brojevi koji ovise o dva indeksa, i i j . Te brojeve možemo smjestiti u tablicu 3x3, i reći da je svaki operator predočiv s tablicom brojeva. Idemo vidjeti kakva su svojstva množenja dviju tablica. U tu svrhu uzet ćemo dva operatora, A i B , predočiti ih u bazi E_{ij} i pomnožiti

$$\begin{aligned} AB &= \left(\sum_{i,j=1}^3 a_{ij} E_{ij} \right) \left(\sum_{k,l=1}^3 b_{kl} E_{kl} \right) = \sum_{i,j,k,l=1}^3 a_{ij} b_{kl} (\vec{e}_i \circ \vec{e}_j) (\vec{e}_k \circ \vec{e}_l) = \\ &= \sum_{i,j,k,l=1}^3 a_{ij} b_{kl} \delta_{jk} \vec{e}_i \circ \vec{e}_l = \sum_{i,j,l=1}^3 a_{ij} b_{jl} E_{il} = \sum_{i,l=1}^3 \left(\sum_{j=1}^3 a_{ij} b_{jl} \right) E_{il} = \\ &= \sum_{i,l=1}^3 c_{il} E_{il} \end{aligned}$$

Dakle, ako operatoru A pridružimo tablicu a_{ij} , operatoru B tablicu b_{ij} onda će umnošku operatora $C=AB$ biti pridružena tablica c_{ij} tako da vrijedi

$$c_{ij} = \sum_k a_{ik} b_{kj}$$

Izvedeno pravilo množenja tablica je zapravo istovjetno s pravilom množenja matrica. Na taj način smo uspostavili odnos između operatora i matrica: svaki operator se može predočiti matricom. Izgled te matrice ovisi o bazi. Međutim, fizikalni rezultati ne ovise o izboru baze. No, kad već operatore možemo predočiti matricama onda je logično očekivati da i same vektore, na koje operatori djeluju, možemo također predočiti matricama. Zaista, vektore možemo predočiti kao matrice s jednim stupcem i brojem redaka jednakim dimenziji prostora, a operatore, koji djeluju u istom prostoru i kojih rezultat djelovanja ostaje u istom prostoru, možemo predočiti matricama s jednakim brojem redaka i stupaca i jednakima dimenziji prostora.

Primjer 1.

Operator A određen je u ortonormiranoj bazi jednadžbama

$$\begin{aligned} A\vec{e}_1 &= -\vec{e}_1 + 2\vec{e}_2 + 5\vec{e}_3 \\ A\vec{e}_2 &= \vec{e}_1 - \vec{e}_3 \\ A\vec{e}_3 &= 6\vec{e}_1 + 2\vec{e}_2 - 7\vec{e}_3 \end{aligned}$$

Prikažite taj operator kao kvadratnu matricu, vektore kao jednostupčane matrice, i pokažite da se ove jednadžbe mogu prikazati kao množenje matrica.

Iz definicije tablice

$$A \vec{e}_i = \sum_{j=1}^3 a_{ji} \vec{e}_j$$

dobivamo

$$\begin{aligned} a_{11} &= -1, a_{21} = 2, a_{31} = 5 \\ a_{12} &= 1, a_{22} = 0, a_{32} = -1 \\ a_{13} &= 6, a_{23} = 2, a_{33} = -7 \end{aligned}$$

tako da imamo

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 6 \\ 2 & 0 & 2 \\ 5 & -1 & -7 \end{pmatrix}$$

Stavimo li

$$\vec{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

po zakonu matričnog množenja dobivamo

$$A \vec{e}_1 \equiv \begin{pmatrix} -1 & 1 & 6 \\ 2 & 0 & 2 \\ 5 & -1 & -7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix} \equiv -\vec{e}_1 + 2\vec{e}_2 + 5\vec{e}_3$$

itd., kao što i mora biti.

Primjer 2.

Vanjski umnožak dvaju vektora može se prikazati kao množenje matrica, tako da lijevi vektor prikažemo kao stupac, a desni vektor kao redak. Tako imamo

$$\vec{e}_1 \circ \vec{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{e}_2 \circ \vec{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \ 1 \ 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{e}_3 \circ \vec{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \ 0 \ 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

itd.

Nađite sve operatore (svih devet) E_{ij} i matričnim množenjem pokažite da zaista imaju svojstva koja su bila navedena.

Zadatak 1.

Ako je

$$\vec{a} = 3\vec{e}_1 - 2\vec{e}_2 + 4\vec{e}_3$$

$$\vec{b} = -6\vec{e}_1 + 7\vec{e}_3$$

izračunajte matrični prikaz operatora

$$A = \vec{a} \circ \vec{b} - \vec{b} \circ \vec{a}$$

Također možemo **unutarnji**, tj. skalarni, umnožak dvaju vektora prikazati u matričnom obliku, ali tako da lijevi vektor prikažemo kao redak, a desni kao stupac. Pa tako imamo

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_1 = (1 \ 0 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = (1 \ 0 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \ , itd.$$

Vidimo da pri predočavanju unutarnjeg i vanjskog umnoška dvaju vektora s pomoću matričnog množenja moramo posebno pamtiti s koje strane umnoška ćemo vektor prikazati kao stupac, a s koje kao redak. U svrhu lakšeg pamćenja i zapamćivanja, vidjet ćemo da je Diracov bra-ket način zabilježavanja znatno pogodniji i slikovitiji.

Umjesto stavljanja strjelica nad znakom za vektor, možemo vektore prikazati jednostavno kao ketove, a dualne vektore kao braove. Tako imamo jednačenje:

$$\vec{e}_1 = |e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad \vec{e}_2 = |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad \vec{e}_3 = |e_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\langle e_1| = (1 \ 0 \ 0) , \quad \langle e_2| = (0 \ 1 \ 0) , \quad \langle e_3| = (0 \ 0 \ 1)$$

Ako zapamtimo da su ketovi istovjetni sa stupcima onda nas braovi samim svojim izgledom podsjećaju da su istovjetni s redcima. Skalarni, tj. unutarnji, umnožak napisan u bra-ket načinu zabilježavanja smo vidjeli prije. Kako izgleda vanjski umnožak? Vrlo jednostavno:

$$\vec{e}_i \circ \vec{e}_j = |e_i\rangle\langle e_j|$$

Harmonički oscilator

Imamo prebrojivo beskonačnu ortonormiranu bazu vektora $|n\rangle$ i operatore stvaranja, poništenja i broja: A^+, A, N . Napišimo sve to u matričnom obliku:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad A^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Napišimo te operatore pomoću vanjskih umnožaka:

$$A = \sum_{m=0}^{\infty} \sqrt{m} |m-1\rangle\langle m|, \quad A^+ = \sum_{m=0}^{\infty} \sqrt{m+1} |m+1\rangle\langle m|$$

$$N = \sum_{m=0}^{\infty} m |m\rangle\langle m|$$

Zadatak 2.

Napišite kvadrate ovih operatora s pomoću vanjskih umnožaka.

Zadatak 3.

Napišite relaciju potpunosti za vlastitu ortonormiranu bazu operatora položaja X .

Zadatak 4.

Koristeći se vanjskim umnošcima, napišite vektor stanja harmoničkog oscilatora u vlastitoj bazi operatora položaja.

KVANTNA KEMIJA 5. predavanje