Университет ИТМО

Реферат

«Матричная формулировка квантовой механики. Матричная алгебра.»

Студент: Елисеев А.
Группа: V3300
Преподаватель: Комолов Владимир Леонидович

Санкт-Петербург
2016

1 Оглавление

Содержание

2 Создание квантовой механики в матричной форме

Первая из предложенных формулировок квантовой механики. Впервые описана в 1925 г. и развита Вернером Гейзенбергом. В 1932 г. он за свою теорию получил нобелевскую премию "За создание квантовой механики в матричной форме". В основу теории легла идея каждой механической наблюдаемой (таким, как положение, импульс или энергия) сопоставить матрицеу (или оператор).

3 Описание

Квантовые динамические переменные не подчиняются коммутативному закону умножения. Подобные некоммутативные динамические переменные, часто называются просто операторами, их удобно представлять в виде матриц. Обычно, в квантовой механике имеют дело с эрмитовыми и унитарными матрицами бесконечного ранга. Например матрицу оператора энергии с помощью некоторого полного набора ортонормированных функций $\nu_n(r)$ можно представить в седующем виде:

$$H_{nm} = \int d\tau \nu_n^*(r)\hat{H}\nu_m(r) \tag{1}$$

Такая матрица позволяет определить энергетические состояния системы. Аналогично, в матричном виде записываются и другие наблюдаемые величины.

4 Матричная алгебра

4.1 Определенее

Для начала необходимо вести определение матрицы. Матрица - это математический объект, записываемый в виде прямоугольной таблицы элементов кольца или поля, которая представляет собой совокупность строк и столбцов, на пересечении которых находятся её элементы. Количество строк и столбцов матрицы задает размер матрицы. Такая таблица складывается и перемножается с другими таблицами по определенным формулам.

Рассмотрим например матрицы A n на m и B k на s

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1s} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{k1} & b_{k2} & \cdots & b_{ks} \end{pmatrix} \tag{3}$$

4.2 Сложение

Матрицы A B можно сложить, если $n = k$ и $m = s$, тогда элементы матрицы $C = A+B$ вычисляется следующим образом:

$$c_{i,j} = a_{i,j} + b_{i,j} \tag{4}$$

Здесь $i = \{1, 2 \ldots n\}$ и $j = \{1, 2 \ldots m\}$

4.3 Умножение

Если число столбцов матрицы A равно числу строк матрицы B ($m = k$), то матрицы можно перемножить (A умножить на B справа), по следующему правилу: если $C = AB$ то:

$$c_{i,j} = \Sigma_{t=1}^{m} a_{i,t} b_{t,j} \tag{5}$$

4.4 Свойства умножения и сложения

- Сложение матриц коммутативно $A + B = B + A$
- Умножение матриц дистрибутивно $A(B + C) = AB + AC$
- Умножение матриц ассоциативно $A(B + C) = AB + AC$

4.5 Нулевая матрица

Матрица, все элементы которой равны нулю. Для квадратной нулевой матрицы и квадратной матрицы A выполняется $A0 = 0A$.

4.6 Единичная матрица

Квадратная матрица, на главной диагонали которой стоят единичные матричные элементы.

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

Для единичной матрицы справедливо $AE = EA$

4.7 Произведение матрицы на число

Произведением числа q на матрицу A является матрица, элементы которой получаются умножением матричных элементов матрицы A на это число.

$$qA = \begin{pmatrix} qa_{11} & qa_{12} & \cdots & qa_{1m} \\ qa_{21} & qa_{22} & \cdots & qa_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ qa_{n1} & qa_{n2} & \cdots & qa_{nm} \end{pmatrix} \tag{7}$$

4.8 Шпур

Сумма диагональных матричных элементов квадратной матрицы называется ее шпуром или следом (обозначается как Spur, Trace)

$$Sp(A) = \Sigma_{k=1}^{n} A_{k,k} \tag{8}$$

4.9 Обратная матрица

Матрица A может иметь или не иметь обратную матрицу A^{-1}, определяемую соотношениями

$$AA^{-1} = A^{-1}A \tag{9}$$

Если матрица A имеет обратную, то она называется несингулярной и является квадратной.

4.10 Эрмитово сопряжение

Матрица A^+ называется эрмитово сопряженной с A, если она получена из A заменой строк на столбцы и всех матричных элементов на комплексно сопряженные им величины. Это можно записать следующим образом.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} \tag{10}$$

$$A^+ = \begin{pmatrix} a^*_{11} & a^*_{12} & \cdots & a^*_{1m} \\ a^*_{21} & a^*_{22} & \cdots & a^*_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a^*_{n1} & a^*_{n2} & \cdots & a^*_{nm} \end{pmatrix} \tag{11}$$

$$(A^+)_{kl} = A^*_{lk} \tag{12}$$

4.11 Самосопряженность и унитарность

- Матрица называется эрмитовой или самосопряженной, если $A = A^+$
- Унитарность матрицы зааетсяя следующим образом $A^+ = A^{-1}$

4.12 Диаганализация

Матрица S диагонализует матрицу A, если в результате преобразования получается диагональная матрица A'

$$A'_{kl} = A'_k \delta_{kl} \tag{13}$$

Собственные значения диагональной матрицы A', полученной из A в результате преобразования, не зависят от способа диагонализации A: они являются и собственными значениями первоначальной недиагональной матрицы A.

4.13 Важные свойства в квантовой механике

Основная теорема: любую эрмитову матрицу можно привести к диагональному виду с помощью унитарного преобразования.

Следствие: собственные значения эрмитовой матрицы определяются однозначно.

Чтобы две эрмитовы матрицы можно было диагонализовать с помощью одного и того же унитарного преобразования, необходимо и достаточно чтобы эти матрицы коммутировали, т.е.

$$AB = BA \tag{14}$$

Или через оператор коммутации $[AB] = 0$

Собственные значения эрмитовой матрицы вещественны.