Kémiai matematika
8. gyakorlat

Busai Ágota
agota.busai@gmail.com
www.math.bme.hu/~bgotti

2016.11.10.

Absztrakt terek és operátorok

Emlékeztető:

„Definíció" (lineáris tér): V nemüres halmaz *lineáris tér* (*vektortér*) a T test felett, ha

(i) $\forall x, y \in V: \ x + y \in V$

(ii) $\forall \lambda \in T, \forall x \in V: \ \lambda x \in V$

Definíció (Euklideszi tér): Véges dimenziós, skalárszorzatos lineáris tér (vektortér).

Definíció (skalárszorzat): $\langle x|y \rangle$ *skaláris szorzat*, ha

(i) $\langle x|y \rangle = \langle y|x \rangle^*$ (**megj:** * a komplex konjugálást jelöli)

(ii) $\langle x|\lambda y \rangle = \lambda \langle x|y \rangle$ és $\langle \lambda x|y \rangle = \lambda^* \langle x|y \rangle$

(iii) $\langle x + y|z \rangle = \langle x|z \rangle + \langle y|z \rangle$

(iv) $\langle x|x \rangle \geq 0$ és $\langle x|x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0$

Definíció (Hilbert tér): Végtelen dimenziós, skalárszorzatos lineáris tér (vektortér).
A tér elemei: *„bra"* vektorok ($\langle A|$, sorvektor) és *„ket"* vektorok ($|A\rangle$, oszlopvektor), ahol

$$H \ni |A\rangle = A_1 |e_1\rangle + A_2 |e_2\rangle + \cdots = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \text{ az } |e_i\rangle \text{ bázisban.}$$

A tér elemeire ható operátorok: $H \to H$ leképezések $(\widehat{A}, \widehat{B}, \dots)$
Jelölés: $|e_i\rangle = |i\rangle$.

Megjegyzés: († az adjungáltat jelöli, azaz a transzponált konjugáltját)

$$\langle A|^\dagger = \begin{pmatrix} A_1^* & A_2^* \cdots \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} A_1^{**} \\ A_2^{**} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = |A\rangle$$

$$|A\rangle^\dagger = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} A_1^* & A_2^* \cdots \end{pmatrix} = \langle A|$$

Definíció (belső szorzat): n-dimenziós komplex euklideszi térben a *belső szorzat* (*skalárszorzat*):

$$\langle A|B \rangle = \sum_i A_i^* B_i \in \mathbb{C}.$$

Emlékeztető: $\|A\|^2 = \langle A|A \rangle$

Definíció (L^p tér): $L^p[a, b]$ azon Lebesgue-mérhető függvények lineáris tere, amelyekre

$$\|f\|_p = \left(\int_a^b |f|^p \mathrm{d}\mu \right)^{\frac{1}{p}} < \infty.$$

Definíció (L^2 tér): $L^2[a, b]$ azon Lebesgue-mérhető függvények lineáris tere, amelyekre

$$\|f\|_2 = \sqrt{\int_a^b |f|^2 \mathrm{d}\mu} < \infty.$$

Megjegyzés: L^2 a négyzetesen integrálható függvények tere.

Definíció (skalárszorzat $L^2[a,b]$ komplex téren): $\langle f|g\rangle = \displaystyle\int_a^b f^*(x)\,g(x)\,\mathrm{d}x$

1. Legyen $f \in L^2[-1,1]$. Mi az $\langle f|f\rangle$, ha $f(x) = x$?

2. Az alábbiak közül melyik függvény eleme $L^2(-\infty,\infty)$-nek? És $L^2[0,\infty)$-nek?
(a) e^x (b) e^{-x} (c) e^{-x^2} (d) $\sin^2 x$

Emlékeztető: $\widehat{A}$ *önadjungált* vagy *Hermitikus* operátor, ha $\widehat{A}^\dagger = \widehat{A}$, azaz

$$\left\langle f\middle|\widehat{A}g\right\rangle = \left\langle \widehat{A}^\dagger f\middle|g\right\rangle = \left\langle \widehat{A}f\middle|g\right\rangle \quad \forall f,g \in H.$$

3. Mutassuk meg, hogy $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$!

HF 4. Hermitikus-e a $\widehat{D} = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ operátor az $L_2(-\infty,\infty)$ térben?

5. Hermitikus-e a $\widehat{D} = \imath\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ operátor az $L_2(-\infty,\infty)$ térben?

Definíció (spektrális alak/spektrálfelbontás): Legyen $\{|\varphi_i\rangle\}_{i=1}^n$ ONB és λ_i-k valósak.
A $\widehat{H}$ operátor *spektrális alakja*:

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^n \lambda_i\,|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\,,$$

ahol $|\cdot\rangle\langle\cdot|$ *diadikus szorzat*ot jelöl.

Definíció (Diadikus szorzat): A $|\phi\rangle$ és $\langle\psi|$ vektorok *diadikus szorzat*a (*külső szorzat*) n dimenziós Hilbert-térben:

$$|\phi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\\ \vdots\\ \phi_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1^* & \psi_2^* & \cdots & \psi_n^*\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\phi_1\psi_1^* & \phi_1\psi_2^* & \cdots & \phi_1\psi_n^*\\ \phi_2\psi_1^* & \phi_2\psi_2^* & \cdots & \phi_2\psi_n^*\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \phi_n\psi_1^* & \phi_n\psi_2^* & \cdots & \phi_n\psi_n^*\end{pmatrix}.$$

6. Hogyan hat a $\widehat{H} = \sum\limits_{i=1}^n \lambda_i\,|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ operátor egy $|\varphi_j\rangle$ bázisvektorra?

7. Add meg a $\widehat{H}^2$ operátor spektrális alakját!

8. Add meg az $\mathrm{e}^{\widehat{H}}$ operátor spektrálfelbontását!

HF 9. Add meg a $\cos\widehat{H}$ operátor spektrálfelbontását, ha a λ_i sajátértékhez tartozó sajátvektor $|\varphi_i\rangle$ $(i = 1,\ldots,n)$!

10. Add meg az $\widehat{I}$ identitásoperátor spektrálfelbontását a $\{|i\rangle\}_{i=1}^n$ ortonormált bázisban!

11. Legyen $\{|i\rangle\}_{i=1}^n$ ONB. Add meg a $\widehat{P} = |i\rangle\langle i|$ operátor mátrixát ebben a bázisban!
(*Tipp:* a mátrix oszlopaiba a $|i\rangle$ bázisvektorok képe kerül)

HF 12. Legyen $\{|i\rangle\}_{i=1}^n$ ONB. Add meg a $\widehat{P} = |i\rangle\langle j|$ operátor mátrixát ebben a bázisban!

13. Legyenek $|e_1\rangle$ és $|e_2\rangle$ normáltak és ortogonálisak.

(a) Tudjuk, hogy $\widehat{A}\,|e_1\rangle = 2\,|e_1\rangle + |e_2\rangle$ és $\widehat{A}\,|e_2\rangle = |e_1\rangle + 2\,|e_2\rangle$.
Add meg az $\widehat{A}$ operátor mátrixát az $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$ bázisban ($\underline{\underline{A}}_e$)!

(b) Legyen $|d_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle + |e_2\rangle)$ és $|d_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle - |e_2\rangle)$.
Add meg az $\widehat{A}$ operátor mátrixát a $|d_1\rangle$, $|d_2\rangle$ bázisban ($\underline{\underline{A}}_d$), amennyiben $|d_1\rangle$, $|d_2\rangle$ normáltak és ortogonálisak!

(c) Vizsgáljuk meg $\underline{\underline{A}}_e$ sajátértékeit!

(d) $\underline{\underline{A}}_e$ és $\underline{\underline{A}}_d$ tehát ugyananannak az $\widehat{A}$ operátornak két ábrázolása, két különböző bázison.
Add meg az $\underline{\underline{A}}_e$-ről $\underline{\underline{A}}_d$-re való áttérés $\underline{\underline{C}}$ mátrixát!
Tipp: $\underline{\underline{C}}\begin{pmatrix}|e_1\rangle\\|e_2\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}|d_1\rangle\\|d_2\rangle\end{pmatrix}=\dots$

A sajátérték-sajátvektor egyenlet mátrixos alakja:
Az $\underline{\underline{A}}$ mátrix sajátértékei legyenek λ_i-k, a megfelelő sajátvektorok $\underline{c}_i$-k, legyen továbbá $\underline{\underline{C}}$ a sajátvektorokból, mint oszlopvektorokból álló mátrix, azaz

$$\underline{\underline{C}}=\begin{pmatrix}\underline{c}_1 & \underline{c}_2 & \dots & \underline{c}_n\end{pmatrix},$$

és legyen $\underline{\underline{\Lambda}}$ a sajátértékek diagonális mátrixa, azaz $(\underline{\underline{\Lambda}})_{ij}=\delta_{ij}\lambda_i$. Ekkor az $\underline{\underline{A}}\,\underline{c}_i=\lambda_i\underline{c}_i$ egyenlet felírható az alábbi alakban:

$$\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{C}}=\underline{\underline{C}}\,\underline{\underline{\Lambda}},\ \text{azaz}\ \underline{\underline{A}}=\underline{\underline{C}}\,\underline{\underline{\Lambda}}\,\underline{\underline{C}}^{-1},\ \text{illetve}\ \underline{\underline{\Lambda}}=\underline{\underline{C}}^{-1}\,\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{C}}.$$

Megjegyzés: Ha $\underline{\underline{A}}$ önadjungált mátrix ($\underline{\underline{A}}=\underline{\underline{A}}^\dagger$), akkor $\underline{\underline{C}}$ unitér mátrix ($\underline{\underline{C}}^{-1}=\underline{\underline{C}}^\dagger$).

HF (e) Ellenőrizd, hogy $\underline{\underline{A}}_e=\underline{\underline{C}}\,\underline{\underline{A}}_d\,\underline{\underline{C}}^{-1}$!

Diagonalizálható mátrix függvényének meghatározása:
Ha $\underline{\underline{A}}=\underline{\underline{C}}\,\underline{\underline{\Lambda}}\,\underline{\underline{C}}^{-1}$, akkor $f(\underline{\underline{A}})=\underline{\underline{C}}\,f(\underline{\underline{\Lambda}})\,\underline{\underline{C}}^{-1}$.

14. Add meg $\sqrt{\underline{\underline{A}}_e}$-t és $\sqrt{\underline{\underline{A}}_d}$-t!

HF 15. $\widehat{A}$ sajátértékei 3 és 1, sajátvektorai $|d_1\rangle$ és $|d_2\rangle$. Ekkor $\widehat{A}$ spektrális alakja: $\widehat{A}=3\,|d_1\rangle\langle d_1|+1\,|d_2\rangle\langle d_2|$, tehát $\sqrt{\widehat{A}}=\sqrt{3}\,|d_1\rangle\langle d_1|+\sqrt{1}\,|d_2\rangle\langle d_2|$.
Ezt felhasználva add meg a $\sqrt{\widehat{A}}$ operátort az $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$ bázisban!

HF 16. Add meg $\sin\underline{\underline{A}}$-t, ha $\underline{\underline{A}}=\begin{bmatrix}0 & \pi\\ \pi & 0\end{bmatrix}$!

17. Legyen $|\alpha\rangle$ és $|\beta\rangle$ két ortonormált vektor a Hilbert-téren! Bizonyítsd be, hogy a

$$|\gamma\rangle=|\delta\rangle-(|\alpha\rangle\langle\alpha|+|\beta\rangle\langle\beta|)\,|\delta\rangle$$

vektor ortogonális $|\alpha\rangle$-ra és $|\beta\rangle$-ra ($|\delta\rangle$ tetszőleges).

HF 18. Legyen $\widehat{A}$ lineáris operátor, azaz $\widehat{A}\,(\alpha f+\beta g)=\alpha\widehat{A}f+\beta\widehat{A}g$. Lineáris-e az $\widehat{A}^2$ operátor?

HF♥ 19. Legyenek $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ normáltak és ortogonálisak. Tekintsük a

$$\begin{aligned}\widehat{\sigma}_x&=\frac{1}{2}(|\alpha\rangle\langle\beta|+|\beta\rangle\langle\alpha|)\\ \widehat{\sigma}_y&=\frac{\imath}{2}(-|\alpha\rangle\langle\beta|+|\beta\rangle\langle\alpha|)\\ \widehat{\sigma}_z&=\frac{1}{2}(|\alpha\rangle\langle\alpha|-|\beta\rangle\langle\beta|)\end{aligned}$$

operátorokat.

(a) Add meg a $\widehat{\sigma}_x$, $\widehat{\sigma}_y$, $\widehat{\sigma}_z$ operátorok mátrixát az $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ bázisán!

(b) Mutassuk meg, hogy $[\widehat{\sigma}_x,\widehat{\sigma}_y]=\imath\widehat{\sigma}_z$!

(c) Ellenőrizzük, hogy az operátorok mátrixai is kielégítik az előző pontban felírt formulát!

(d) Szerkesszük meg a *léptető operátorokat* és azok mátrixát, amelyek az alábbiak szerint hatnak!

$$\widehat{\sigma}_+\,|\beta\rangle=|\alpha\rangle\,,\qquad \widehat{\sigma}_+\,|\alpha\rangle=0$$
$$\widehat{\sigma}_-\,|\alpha\rangle=|\beta\rangle\,,\qquad \widehat{\sigma}_-\,|\beta\rangle=0$$

(e) Hogyan lehet $\widehat{\sigma}_x$, $\widehat{\sigma}_y$ lineáris kombinációjaként kifejezni $\widehat{\sigma}_+$-t és $\widehat{\sigma}_-$-t?

20. Legyenek $\widehat{A}$ és $\widehat{B}$ Hermitikus operátorok, $\alpha,\beta\in\mathbb{C}$. Hermitikus-e ekkor az
(a) $\widehat{A}+\widehat{B}$ (b) $\alpha\widehat{A}+\beta\widehat{B}$ (c) $\widehat{A}\widehat{B}$ operátor?