

Matrixrekenen in de kwantummechanica

Rik Sprenkels

13 september 2011

1 Matrixrekenen

We nemen een vierkante matrix \mathbf{A} met $n \times n$ elementen, en een vector \mathbf{c} met evenveel elementen. We kunnen een nieuwe vector \mathbf{d} maken door \mathbf{A} met \mathbf{c} te (matrix)vermenigvuldigen:

$$\mathbf{d} = \mathbf{A}\mathbf{c}. \quad (1)$$

Elk element van de vector \mathbf{d} is de som van het product van de elementen van de rijen van de matrix \mathbf{A} met de elementen van \mathbf{c} . Ga bij jezelf na dat dit overeenkomt met het (handmatig) vermenigvuldigen van een matrix met een vector. We kunnen dit wiskundig opschrijven als:

$$d_j = \sum_{k=1}^n A_{jk}c_k, \quad (2)$$

waarin d_j het j -de element van de vector \mathbf{d} is, en A_{jk} het element van de matrix \mathbf{A} op de j -de rij, en in de k -de kolom.

We kunnen op dezelfde manier matrixvermenigvuldiging in formulevorm vatten. Zoals we weten is elk element van het product van twee vierkante matrices de som van het product van de elementen van de rijen van de eerste matrix, met de elementen van de kolommen van de tweede matrix. In formulevorm:

$$\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{B} \quad \Leftrightarrow \quad C_{jl} = \sum_{k=1}^n A_{jk}B_{kl} \quad \forall \quad j, l, \quad (3)$$

voor drie vierkante matrices met alle n rijen en n kolommen. We sommeren dus van 1 tot n , omdat dat het aantal kolommen is van de eerste matrix, en het aantal rijen van de tweede matrix.

Ten slotte kunnen we ook het inproduct - in de Dirac-notatie opgeschreven als een bra-ket - omzetten naar het inproduct zoals we dat uit de lineaire algebra gewend zijn:

$$\mathbf{c} \cdot \mathbf{d} = \sum_{k=1}^n c_k d_k = \mathbf{c}^T \mathbf{d}. \quad (4)$$

Ook dit komt overeen met de manier waarop we gewend zijn het inproduct van twee vectoren te nemen.

De kracht van op deze manier matrixvermenigvuldiging opstellen, in plaats van gewoon de afzonderlijke elementen te vermenigvuldigen, is dat we op een algemenere manier kunnen nadenken over vector- en matrixvermenigvuldiging. Dit heeft als voordeel dat we nu met matrices kunnen werken waarvan de elementen onbekend zijn, en dat we moeiteloos met hele grote (zelfs: oneindig grote) matrices kunnen rekenen.

2 Matrices in de kwantummechanica

We kunnen laten zien dat er geen informatie verloren gaat als we van de bra-ketnotatie van Dirac overgaan naar een matrix-benadering van de kwantummechanica. We definiëren eerst de kwantummechanische matrix \mathbf{A} behorend bij een operator \hat{A} , en de kwantummechanische vector \mathbf{c} behorend bij een genormeerde toestandsfunctie $|\psi\rangle$.

Zoals we weten kunnen we de toestandsfunctie $|\psi\rangle$ ontbinden in een orthonormale basis bestaande uit basisfuncties $|k\rangle$, waarvoor geldt dat $\langle j|k\rangle = \delta_{jk}$.

Voor een (willekeurig grote) basis van kwantummechanische basisfuncties $|k\rangle$, waarbij k loopt van 1 tot n , definiëren we het matrixelement A_{jk} als volgt:

$$A_{jk} = \langle j|\hat{A}|k\rangle \quad (5)$$

en het vectorelement c_k

$$c_k = \langle k|\psi\rangle = \langle k|\sum_{l=1}^n c_l|l\rangle = \sum_{l=1}^n c_l\langle k|l\rangle = c_k. \quad (6)$$

Wat we meteen zien is dat matrices van bovenstaande vorm vierkant zijn. Immers, de indices j en k lopen beiden van 1 tot en met n .

We laten nu zien dat wat we gewend zijn van vector-vermenigvuldiging en matrix-vermenigvuldiging overeenkomt met hoe we in de bra-ket-notatie werken. Eerst stellen we de verwachtingswaarde van de operator \hat{A} voor een willekeurige toestandsfunctie $|\psi\rangle$ op, waarbij we eerst $|\psi\rangle$ expanderen in de basis van functies $|k\rangle$:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n c_k^* c_l \langle k|\hat{A}|l\rangle \quad (7)$$

$$= \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n c_k^* A_{kl} c_l = \mathbf{c}^T \mathbf{A} \mathbf{c}. \quad (8)$$

Dit werkt blijkbaar als het vermenigvuldigen van de complex geconjugeerde, getransponeerde vector \mathbf{c} met de matrix \mathbf{A} met de vector \mathbf{c} . Vervolgens moeten we checken dat matrixvermenigvuldiging nog goed gaat. Hiervoor voeren we eerst de operator \hat{I} in, en deze zetten we meteen om in matrixnotatie:

$$\hat{I} \equiv \sum_{k=1}^n |k\rangle\langle k| \quad (9)$$

$$I_{mn} = \langle m|\hat{I}|n\rangle = \langle m|\sum_{k=1}^n |k\rangle\langle k|n\rangle \quad (10)$$

$$= \sum_{k=1}^n \langle m|k\rangle\langle k|n\rangle = \sum_{k=1}^n \delta_{mk}\delta_{kn} = \delta_{mn}. \quad (11)$$

De matrix I heeft dus alleen elementen als $m = n$, oftewel op de diagonaal, en deze zijn allemaal één. \hat{I} is dus de eenheidsoperator, de operator die vermenigvuldigd met een operator of functie diezelfde operator of functie oplevert.

Hiermee controleren of het vermenigvuldigen van twee matrices equivalent is aan het vermenigvuldigen van twee operatoren:

$$(\mathbf{AB})_{jl} = \sum_{k=1}^n A_{jk}B_{kl} \quad (12)$$

$$= \sum_{k=1}^n \langle j|\hat{A}|k\rangle\langle k|\hat{B}|l\rangle = \langle j|\hat{A}\left(\sum_{k=1}^n |k\rangle\langle k|\right)\hat{B}|l\rangle \quad (13)$$

$$= \langle j|\hat{A}\hat{B}|l\rangle = \langle j|\hat{A}\hat{B}|l\rangle. \quad (14)$$

Dit blijkt inderdaad het geval.