Løsning til øving 16 for FY1004, våren 2008

Den komplekse 2×2-matrisen

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

er hermitesk dersom diagonalelementene A_{11} og A_{22} er reelle, og dessuten $A_{21} = (A_{12})^*$. I denne oppgaven antar vi at A er en hermitesk 2×2-matrise, og vi innfører fire reelle parametre, som vi her velger å kalle t, x, y, z, slik at

$$A = \begin{pmatrix} t+z & x - \mathrm{i}y \\ x + \mathrm{i}y & t - z \end{pmatrix} .$$

a) Uttrykk parametrene t, x, y, z ved matriseelementene $A_{11}, A_{12}, A_{21}, A_{22}$.

Vi ser at

$$\begin{aligned} t &= \frac{A_{11} + A_{22}}{2} , \\ z &= \frac{A_{11} - A_{22}}{2} , \\ x &= \frac{A_{21} + A_{12}}{2} = \frac{A_{21} + A_{21}^*}{2} = \mathrm{Re}\, A_{21} = \mathrm{Re}\, A_{12} , \\ y &= \frac{A_{21} - A_{12}}{2\mathrm{i}} = \frac{A_{21} - A_{21}^*}{2\mathrm{i}} = \mathrm{Im}\, A_{21} = -\,\mathrm{Im}\, A_{12} . \end{aligned}$$

b) Finn egenverdiene og egenvektorene til A uttrykt ved t, x, y, z.

At en vektor

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

er en egenvektor for A med egenverdi λ, betyr at egenverdiligningen

$$A\psi = \lambda\psi$$

er oppfylt. En egenvektor er pr. definisjon ikke null, vi tillater altså ikke at $\psi_1 = \psi_2 = 0$. Egenverdiligningen er en matriseligning:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} .$$

For at det skal finnes en løsning som ikke har $\psi_1 = \psi_2 = 0$, må matrisen

$$A - \lambda I = \begin{pmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda \end{pmatrix}$$

ha determinant null, vi må ha

$$\begin{aligned} 0 &= \det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - (A_{11} + A_{22})\lambda + A_{11}A_{22} - A_{21}A_{12} \\ &= \lambda^2 - (\mathrm{Tr}\, A)\, \lambda + \det A = \lambda^2 - 2t\lambda + t^2 - x^2 - y^2 - z^2 = (\lambda - t)^2 - x^2 - y^2 - z^2 . \end{aligned}$$

For en $n \times n$-matrise A er $\det(A - \lambda I)$ et n-tegradspolynom i λ som kalles det karakteristiske polynomet for A. Og den karakteristiske ligningen $\det(A - \lambda I) = 0$ har n røtter (løsninger for λ) som er egenverdiene til A. Den Hermiteske 2×2-matrisen A her har de to reelle egenverdiene

$$\lambda = t \pm r \qquad \text{med} \qquad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \; .$$

Dette er et eksempel på det generelle teoremet at alle egenverdiene til en Hermitesk matrise er reelle.

Et spesiatilfelle er $x = y = z = 0$, da er $A = tI$, og enhver vektor ψ er en egenvektor for A med egenverdi t, nemlig: $A\psi = tI\psi = t\psi$.

I alle andre tilfeller har A to ulike egenverdier. Til hver egenverdi svarer da en entydig egenvektor, og de to egenvektorene er ortogonale. Hvis ψ er en egenvektor, så regner vi $a\psi$ der a er et kompleks tall, $a \neq 0$, som den samme egenvektoren.

Egenverdiligningen $A\psi = \lambda\psi$ med $\lambda = t \pm r$ ser slik ut:

$$\begin{aligned} (t+z)\psi_1 + (x - \mathrm{i}y)\psi_2 &= (t \pm r)\psi_1 \; , \\ (x + \mathrm{i}y)\psi_1 + (t - z)\psi_2 &= (t \pm r)\psi_2 \; . \end{aligned}$$

Med $\lambda = t + r$ har vi de to ligningene

$$\begin{aligned} (x - \mathrm{i}y)\psi_2 &= (r - z)\psi_1 \; , \\ (x + \mathrm{i}y)\psi_1 &= (r + z)\psi_2 \; . \end{aligned}$$

Vi kan velge hvilken av disse to ligningene vi vil løse for å uttrykke ψ_1 ved ψ_2, eller omvendt, resultatet skal bli det samme uansett.

Dersom vi regner numerisk, kan vi for eksempel resonnere som følger. Hvis $z \geq 0$, så vet vi sikkert at $r + z > 0$, og da kan vi bruke den andre ligningen, som gir oss egenvektoren på formen

$$\psi = C_1 \begin{pmatrix} r + z \\ x + \mathrm{i}y \end{pmatrix} ,$$

der C_1 er en normeringsfaktor. Hvis $z \leq 0$, så vet vi sikkert at $r - z > 0$, og da kan vi bruke den første ligningen, som gir oss egenvektoren på formen

$$\psi = C_2 \begin{pmatrix} x - \mathrm{i}y \\ r - z \end{pmatrix} ,$$

der C_2 er en annen normeringsfaktor.

Så til den andre egenverdien, $\lambda = t - r$. Da har vi ligningene

$$\begin{aligned} (x - \mathrm{i}y)\psi_2 &= (-r - z)\psi_1 \; , \\ (x + \mathrm{i}y)\psi_1 &= (-r + z)\psi_2 \; . \end{aligned}$$

Hvis $z \geq 0$, så vet vi igjen at $r + z > 0$, og da kan vi bruke den første ligningen, som gir

$$\psi = C_3 \begin{pmatrix} -x + \mathrm{i}y \\ r + z \end{pmatrix} ,$$

der C_3 er en normeringsfaktor. Hvis $z \leq 0$, vet vi at $r - z > 0$, og da kan vi bruke den andre ligningen, som gir

$$\psi = C_4 \begin{pmatrix} r - z \\ -x - \mathrm{i}y \end{pmatrix} ,$$

der C_4 er en normeringsfaktor.

Når vi innfører identitetsmatrisen I og de tre såkalte Pauli-matrisene $\sigma_x = \sigma_1$, $\sigma_y = \sigma_2$ og $\sigma_z = \sigma_3$, definert ved at

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} , \qquad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} , \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} ,$$

kan vi skrive

$$A = tI + x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z = tI + \vec{r} \cdot \vec{\sigma} = tI + r\vec{n} \cdot \vec{\sigma} \ .$$

Vi ser da på x, y, z som de tre komponentene av en vektor $\vec{r}$, og på $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ som de tre komponentene av en vektor $\vec{\sigma}$. Vi definerer $r = |\vec{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ og $\vec{n} = \vec{r}/r$.

c) Vis at fordi $\vec{n}$ er en enhetsvektor, $\vec{n} \cdot \vec{n} = 1$, er $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = I$.
Hva forteller det om egenverdiene til matrisene $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ og $A = tI + r\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$?

La oss kvadrere matrisen

$$\vec{r} \cdot \vec{\sigma} = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z = \begin{pmatrix} z & x - \mathrm{i}y \\ x + \mathrm{i}y & -z \end{pmatrix} .$$

Matrisemultiplikasjon av denne matrisen med seg selv gir at

$$(\vec{r} \cdot \vec{\sigma})^2 = \begin{pmatrix} z^2 + (x - \mathrm{i}y)(x + \mathrm{i}y) & 0 \\ 0 & (x + \mathrm{i}y)(x - \mathrm{i}y) + z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^2 & 0 \\ 0 & r^2 \end{pmatrix} = r^2 \, I \ .$$

Så når $\vec{n}$ er en enhetsvektor, får vi at $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = (\vec{n} \cdot \vec{n}) \, I = I$.

At $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = I$, forteller at en egenverdi λ til matrisen $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ må oppfylle den tilsvarende ligningen $\lambda^2 = 1$, følgelig må $\lambda = \pm 1$. Bevis: hvis $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})\psi = \lambda\psi$, så er

$$\psi = I\psi = (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2\psi = (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})[(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})\psi] = (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})[\lambda\psi] = \lambda(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})\psi = \lambda^2\psi \ ,$$

og siden $\psi \neq 0$, impliserer det at $\lambda^2 = 1$.

Hvis $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})\psi = \lambda\psi$, og $A = tI + r\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$, så er dessuten

$$A\psi = (tI + r\vec{n} \cdot \vec{\sigma})\psi = (t + r\lambda)\psi \ .$$

Det viser at egenverdiene til A er $t \pm r$.

d) Uttrykk matrisen $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ ved polarvinklene θ, φ, som vi definerer ved at

$$x = r \, \sin\theta \, \cos\varphi \ , \qquad y = r \, \sin\theta \, \sin\varphi \ , \qquad z = r \, \cos\theta \ .$$

Komponentene av $\vec{n} = \vec{r}/r$ er

$$n_x = \sin\theta \, \cos\varphi \ , \qquad n_y = \sin\theta \, \sin\varphi \ , \qquad n_z = \cos\theta \ .$$

Det gir at

$$\vec{n} \cdot \vec{\sigma} = n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z = \begin{pmatrix} n_z & n_x - \mathrm{i}n_y \\ n_x + \mathrm{i}n_y & -n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\theta \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} .$$

e) En vektor i det todimensjonale komplekse vektorrommet $\mathbf{C}^2$,

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} ,$$

altså en 2×1-matrise, kalles gjerne en *spinor* i kvantemekanisk sammenheng. Vis at spinorene

$$u = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} , \qquad v = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

er egenvektorer til matrisen $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$, og finn de tilhørende egenverdiene.

Vi må regne ut $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})u$ og $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})v$. Vi finner:

$$\begin{aligned}
(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})u &= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\frac{\theta}{2} + \sin\theta\sin\frac{\theta}{2} \\ \left(\sin\theta\cos\frac{\theta}{2} - \cos\theta\sin\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\left(\theta - \frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\theta - \frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} = u \ ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})v &= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \left(-\cos\theta\sin\frac{\theta}{2} + \sin\theta\cos\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ -\sin\theta\sin\frac{\theta}{2} - \cos\theta\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\left(\theta - \frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ -\cos\left(\theta - \frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} = -v \ ,
\end{aligned}$$

Konklusjon: u er en egenvektor (egenspinor) for $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ med egenverdi 1, og v er en egenvektor med egenverdi -1.

Hermitesk konjugering (transponering og komplekskonjugering) av spinoren ψ gir 1×2-matrisen

$$\psi^\dagger = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} .$$

$\mathbf{C}^2$ er et Hilbert-rom, med skalarproduktet mellom to spinorer ψ og ϕ definert som

$$\langle \psi, \phi \rangle = \psi^\dagger \phi = \psi_1^* \phi_1 + \psi_2^* \phi_2 \ .$$

Normen av ψ skrives $||\psi||$ og defineres ved at

$$||\psi||^2 = \psi^\dagger \psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \ .$$

Når vi normerer spinoren ψ til 1 (dvs. at $\psi^\dagger\psi = 1$), kan den representere en kvantemekanisk tilstand i et fysisk system av den typen som kalles et *to-nivå-system.* Alle observable i et to-nivå-system, som for eksempel Hamilton-funksjonen, representeres ved hermiteske 2×2-matriser, og har nøyaktig to egentilstander. Unntaket er identitetsmatrisen I, som ikke gjør forskjell på vektorene i Hilbert-rommet, idet den har alle som egenvektorer med egenverdi 1.

f) Forventningsverdien til observabelen A i tilstanden ψ er som vanlig definert som

$$\langle A \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle = \psi^\dagger A \psi \ .$$

La $\vec{w} = \langle \vec{\sigma} \rangle$, det vil si at $\vec{w}$ er en vektor med komponenter $w_x = \langle \sigma_x \rangle$, $w_y = \langle \sigma_y \rangle$, $w_z = \langle \sigma_z \rangle$.
Vis at når ψ er normert, er $\vec{w}$ en enhetsvektor.

Vis også at ψ er en egenvektor for $\vec{w} \cdot \vec{\sigma}$ med egenverdi 1.

Når

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} ,$$

så er

$$\begin{aligned} w_x &= \langle \sigma_x \rangle = \psi^\dagger \sigma_x \psi = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix} \\ &= \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 = 2\,\mathrm{Re}(\psi_1^* \psi_2) \ , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} w_y &= \langle \sigma_y \rangle = \psi^\dagger \sigma_y \psi = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\psi_2 \\ \mathrm{i}\psi_1 \end{pmatrix} \\ &= -\mathrm{i}(\psi_1^* \psi_2 - \psi_2^* \psi_1) = 2\,\mathrm{Im}(\psi_1^* \psi_2) \ , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} w_z &= \langle \sigma_z \rangle = \psi^\dagger \sigma_z \psi = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix} \\ &= |\psi_1|^2 - |\psi_2|^2 \ . \end{aligned}$$

Vi ser at w_x, w_y og w_z alle er reelle, som de bør være fordi de er forventnigsverdier av Hermiteske matriser. Og vi finner at

$$\begin{aligned} w_x^2 + w_y^2 + w_z^2 &= (\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1)^2 - (\psi_1^* \psi_2 - \psi_2^* \psi_1)^2 + (|\psi_1|^2 - |\psi_2|^2)^2 \\ &= 4\psi_1^* \psi_2 \psi_2^* \psi_1 + |\psi_1|^4 - 2|\psi_1|^2 |\psi_2|^2 + |\psi_2|^4 \\ &= |\psi_1|^4 + 2|\psi_1|^2 |\psi_2|^2 + |\psi_2|^4 = (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)^2 = 1 \ . \end{aligned}$$

Vi har at

$$\vec{w} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} w_z & w_x - \mathrm{i}w_y \\ w_x + \mathrm{i}w_y & -w_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\psi_1|^2 - |\psi_2|^2 & 2\psi_2^* \psi_1 \\ 2\psi_1^* \psi_2 & -|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \end{pmatrix} .$$

Og dermed,

$$(\vec{w} \cdot \vec{\sigma})\psi = \begin{pmatrix} |\psi_1|^2 - |\psi_2|^2 & 2\psi_2^* \psi_1 \\ 2\psi_1^* \psi_2 & -|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)\,\psi_1 \\ (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)\,\psi_2 \end{pmatrix} = \psi \ .$$

g) Definer

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\,\sigma_x \ , \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\,\sigma_y \ , \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\,\sigma_z \ ,$$

og vis at disse matrisene oppfyller kommutasjonsrelasjonene for dreieimpuls:

$$[S_x, S_y] = \mathrm{i}\hbar S_z \ , \qquad [S_y, S_z] = \mathrm{i}\hbar S_x \ , \qquad [S_z, S_x] = \mathrm{i}\hbar S_y \ .$$

Vis også at

$$\vec{S}^{\,2} = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3}{4}\,\hbar^2 = s(s+1)\hbar^2$$

med $s = 1/2$.

Alle disse relasjonene følger av multiplikasjonstabellen for Pauli-matrisene:

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \ , \\ \sigma_x \sigma_y &= -\sigma_y \sigma_x = \mathrm{i}\sigma_z \ , \\ \sigma_y \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_y = \mathrm{i}\sigma_x \ , \\ \sigma_z \sigma_x &= -\sigma_x \sigma_z = \mathrm{i}\sigma_y \ . \end{aligned}$$