

Rozdział 28

(U.7) Notacja Diraca

28.1 Przestrzeń dualna. Pojęcie bra

W głównej części wykładu wprowadziliśmy pojęcie *bra* $\langle \psi | \in \mathcal{H}$ w sposób intuicyjny, przez odwołanie się iloczynu skalarnego w przestrzeni Hilberta. Omówimy to teraz nieco dokładniej.

Z przestrzenią wektorową \mathcal{H} stowarzyszona jest przestrzeń \mathcal{H}^* zwana przestrzenią dualną. Jest to zbiór wszystkich funkcjonałów liniowych na \mathcal{H} . Można wykazać, że przestrzeń dualna \mathcal{H}^* ma także strukturę przestrzeni wektorowej. Liniowość funkcjonałów oznacza, że χ z przestrzeni \mathcal{H}^* określa odwzorowanie

$$\mathcal{H} \ni |\psi\rangle \xrightarrow{\chi \in \mathcal{H}^*} \chi(|\psi\rangle) \in \mathbb{C}, \quad (28.1)$$

które jest liniowe, to znaczy

$$\chi(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \chi(|\psi_1\rangle) + \lambda_2 \chi(|\psi_2\rangle), \quad (28.2)$$

czyli efekt działania funkcjonału na kombinację liniową wektorów jest kombinacją liniową efektów działania funkcjonału na poszczególne składniki kombinacji.

Należy zwrócić uwagę, że nie wolno mylić funkcjonałów liniowych z operatorami liniowymi. Te pierwsze przyporządkowują ketowi liczby zespolone, zaś operator przekształca ket (czyli wektor) na jakiś inny ket (wektor).

Każdy element przestrzeni dualnej będziemy nazywać *bra* i oznaczać go $\langle \psi | \in \mathcal{H}$. Działanie bra na ket $|\psi\rangle$ daje liczbę zespoloną. Sugeruje to związek z iloczynem skalarnym, w który wyposażona jest przestrzeń \mathcal{H} .

Każdemu ketowi $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ przyporządkowujemy bra

$$\mathcal{H} \ni |\varphi\rangle \longrightarrow \langle \varphi | \in \mathcal{H}^*, \quad (28.3)$$

definiując działanie funkcjonału $\langle \varphi |$ na dowolny ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ w następujący sposób

$$(\langle \varphi |)|\psi\rangle = \langle \varphi | \psi \rangle = \begin{cases} \text{iloczyn skalarny :} \\ \langle \varphi | \psi \rangle \end{cases} \quad (28.4)$$

Widzimy więc, że sposoby zapisu iloczynu skalarnego i efektu działania bra (funkcjonału) na ket (wektor) nieprzypadkowo są identyczne. Ta identyczność zapisu każe jednak postawić pytanie, czy każdemu ketowi – wektorowi z przestrzeni Hilberta, odpowiada jakieś bra – funkcjonał liniowy z przestrzeni dualnej?

Odpowiedź brzmi: tak. Każdemu ketowi $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ odpowiada bra $\langle \psi | \in \mathcal{H}^*$. Natomiast pytanie odwrotne: czy każdemu bra odpowiada ket (a więc czy odpowiedniość jest jedno-jednoznaczna), jest trudniejsze. Dla przestrzeni skończenie wymiarowych odpowiedzią jest jednoznaczne

tak. W przestrzeniach nieskończenie wielowymiarowych sprawa jest subtelniejsza. Nie będziemy tu wchodzić w niuanse natury matematycznej. Dla naszych celów (zastosowanie w teorii fizycznej, jaką jest mechanika kwantowa) można uważać, że rzeczywiście każdemu ketowi $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ odpowiada bra $\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$ i na odwrót. W świetle tych uwag możnaby przyjąć, że przestrzenie wektorowe \mathcal{H} i \mathcal{H}^* są izomorficzne, a więc można by je utożsamić.

Odpowiedniość pomiędzy ketami i bra (tj. pomiędzy przestrzeniami \mathcal{H} i \mathcal{H}^*) oznaczyliśmy znakiem \dagger i nazwaliśmy sprzężeniem hermitowskim

$$\mathcal{H} \ni |\varphi\rangle \xrightarrow{\text{operacja } \dagger} |\varphi\rangle^\dagger = \langle\varphi| \in \mathcal{H}^*, \quad (28.5)$$

o własności $|\varphi\rangle^{\dagger\dagger} = |\varphi\rangle$. Omawiając tę operację stwierdziliśmy, że jest ona antyliniowa. Wykażemy teraz, że tak jest rzeczywiście. Niech ket (wektor) $|f\rangle$ będzie kombinacją liniową

$$|f\rangle = \lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle \quad (28.6)$$

Odpowiada mu bra $\langle f| = |f\rangle^\dagger$. Znajdziemy $\langle f|$ wiedząc, że działanie $\langle f|$ na dowolny ket (wektor) $|\psi\rangle$ sprowadza się do iloczynu skalarnego wektorów $|f\rangle$ i $|\psi\rangle$ w tej właśnie kolejności, tj. do $\langle f|\psi\rangle$. Lecz $|f\rangle$ jest kombinacją liniową (28.6), zatem

$$\langle f|\psi\rangle = \langle \lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle = \lambda_1^* \langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^* \langle\varphi_2|\psi\rangle, \quad (28.7)$$

co wynika z antyliniowości iloczynu skalarnego w pierwszym składniku. Prawa strona wzoru (28.7) informuje nas, że efekt działania bra $\langle f|$ na dowolny ket jest równy efektowi działania kombinacji liniowej

$$\langle f| = \lambda_1^* \langle\varphi_1| + \lambda_2^* \langle\varphi_2|, \quad (28.8)$$

Zestawiając (28.6) i (28.8) stwierdzamy, że kombinacja liniowa wektorów z \mathcal{H} przechodzi w kombinację antyliniową bra (funkcjonałów liniowych). Stwierdzenie to, w połączeniu z określeniem operacji \dagger w (28.5) pozwala napisać

$$|f\rangle^\dagger = (\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle)^\dagger = \lambda_1^* \langle\varphi_1| + \lambda_2^* \langle\varphi_2| = \langle f|. \quad (28.9)$$

Uzyskany wynik jest spójny z określeniem operacji \dagger w (28.5). Rzeczywiście, niech $|f\rangle$ będzie kombinacją liniową jak w (28.6). Wówczas dostajemy

$$\begin{aligned} (|f\rangle)^{\dagger\dagger} &= [\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle]^{\dagger\dagger} \\ &= [\lambda_1^* \langle\varphi_1| + \lambda_2^* \langle\varphi_2|]^\dagger = \lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle = |f\rangle, \end{aligned} \quad (28.10)$$

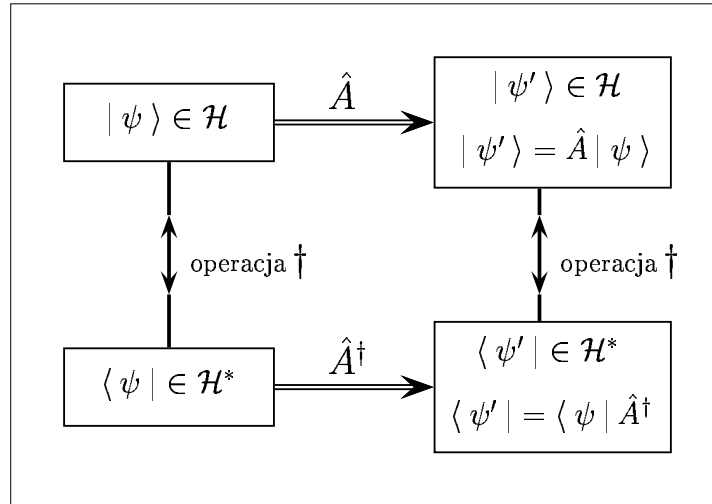
bowiem dwukrotnie korzystamy z antyliniowości odpowiedniości pomiędzy ketami i bra.

28.2 Operatory i ich sprzężenia

W głównej części wykładu omawiając operatory $\hat{A} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ wskazywaliśmy, że sprzężenie hermitowskie operatora jest sprawą nieco subtelniejszą niż to z pozoru wygląda. Jeśli operator \hat{A} odwzorowuje ket $|\psi\rangle$ na ket $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ to wówczas ketowi temu odpowiada

$$\langle\psi'| = (|\psi'\rangle)^\dagger = \langle\psi|\hat{A}^\dagger, \quad (28.11)$$

czyli $\langle\psi|\hat{A}^\dagger$ to nowe bra – funkcyjonał liniowy działający na kety z przestrzeni \mathcal{H} . Sugeruje to, że na operator \hat{A}^\dagger można spojrzeć jako na odwzorowanie w przestrzeni dualnej \mathcal{H}^* . Formalna relacja (28.11) może być wyjaśniona za pomocą poniższego diagramu. Widzimy więc, że operator \hat{A}^\dagger rzeczywiście może być interpretowany jako odwzorowanie $\hat{A}^\dagger : \mathcal{H}^* \longrightarrow \mathcal{H}^*$.



Rys. 28.1: Definicja operatora sprzężonego \hat{A}^\dagger . Diagram ilustruje wzajemne odpowiadanie ketów i bra powiązanych przez operatory \hat{A} oraz \hat{A}^\dagger . Pionowe linie odpowiadają antyliniowej operacji \dagger zdefiniowanej w (28.5). Poziome linie podwójne definiują formalne działanie operatora \hat{A} i operatora \hat{A}^\dagger doń sprzężonego.

Twierdzenie 28.1 *Relacja przyporządkowania*

$$\mathcal{H}^* \ni \langle \psi | \xrightarrow{\hat{A}^\dagger} \langle \psi' | = \langle \psi | \hat{A}^\dagger \in \mathcal{H}^*, \quad (28.12)$$

jest liniowa w tym sensie, że bra będącemu kombinacją liniową $\langle \chi | = \lambda_1 \langle \varphi_1 | + \lambda_2 \langle \varphi_2 |$, gdzie $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$, przyporządkowuje nowe bra $\langle \chi' | = \lambda_1 \langle \varphi_1 | \hat{A}^\dagger + \lambda_2 \langle \varphi_2 | \hat{A}^\dagger$.

Dowód. Bra $\langle \chi | = \lambda_1 \langle \varphi_1 | + \lambda_2 \langle \varphi_2 |$ odpowiada (antyliniowość) ketowi $|\chi\rangle = \lambda_1^* |\varphi_1\rangle + \lambda_2^* |\varphi_2\rangle$. Operator \hat{A} (z założenia liniowy) działając na $|\chi\rangle$ produkuje

$$|\chi'\rangle = \hat{A}|\chi\rangle = \lambda_1^* \hat{A}|\varphi_1\rangle + \lambda_2^* \hat{A}|\varphi_2\rangle = \lambda_1^* |\varphi'_1\rangle + \lambda_2^* |\varphi'_2\rangle. \quad (28.13)$$

Powstały ket $|\chi'\rangle$ (antyliniowo) odpowiada bra

$$\langle \chi' | = \lambda_1 \langle \varphi'_1 | + \lambda_2 \langle \varphi'_2 | = \lambda_1 \langle \varphi_1 | \hat{A}^\dagger + \lambda_2 \langle \varphi_2 | \hat{A}^\dagger. \quad (28.14)$$

Wobec tego mamy

$$\langle \chi | \hat{A}^\dagger = [\lambda_1 \langle \varphi_1 | + \lambda_2 \langle \varphi_2 |] \hat{A}^\dagger = \lambda_1 \langle \varphi_1 | \hat{A}^\dagger + \lambda_2 \langle \varphi_2 | \hat{A}^\dagger, \quad (28.15)$$

czyli mamy wykazaną liniowość relacji (28.12). ■

Operatory \hat{A} i \hat{A}^\dagger odwzorowują w siebie dwie, w zasadzie różne, przestrzenie. Ponieważ jednak możemy uznać te przestrzenie za izomorficzne, więc rozróżnienie pomiędzy dziedzinami obydwóch operatorów zanika. W tym świetle, szczególnie wyraźna jest zaleta notacji Diraca polegająca na tym, że możemy się nią efektywnie posługiwać bez wnikania w omawiane niuanse matematyczne.

Jak wspominaliśmy, wygodnie jest przyjąć następujące określenie operatora sprzężonego (por. (7.30))

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \varphi \rangle &= (\langle \psi | \hat{A}^\dagger) | \varphi \rangle = [\langle \varphi | (\hat{A} | \psi \rangle)]^* \\ &= \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle^*, \end{aligned} \quad (28.16)$$

co musi zachodzić dla dowolnych $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Nawiasy w kolejnych równościach pozwalają lepiej zidentyfikować obiekty z jakimi mamy do czynienia. W końcu jednak, notacja Diraca umożliwia ich opuszczenie.

Twierdzenie 28.2 *Operacja sprzężenia hermitowskiego operatorów ma własności:*

$$(a). \quad (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}, \quad (28.17a)$$

$$(b). \quad (\lambda \hat{A})^\dagger = \lambda^* \hat{A}^\dagger, \quad (28.17b)$$

$$(c). \quad (\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger, \quad (28.17c)$$

$$(d). \quad (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (28.17d)$$

Dowód. (a). Zapiszmy relację (28.16) dla dowolnych wektorów $|\eta\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ i dla pewnego operatora \hat{B}

$$\langle \eta | \hat{B} | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{B}^\dagger | \eta \rangle^*. \quad (28.18)$$

Podstawmy dalej $\hat{B} = \hat{A}^\dagger$ i weźmy sprzężenie zespolone obu stron

$$\langle \eta | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle^* = \langle \phi | \hat{A}^{\dagger\dagger} | \eta \rangle. \quad (28.19)$$

Stosując po lewej stronie (28.16) dostajemy

$$\langle \phi | \hat{A} | \eta \rangle = \langle \phi | \hat{A}^{\dagger\dagger} | \eta \rangle. \quad (28.20)$$

Z dowolności wektorów $|\phi\rangle$ i $|\eta\rangle$ wynika teza (28.17a).

(b). Bra $\langle \chi | = \langle \psi | (\lambda \hat{A})^\dagger$ (przy dowolnym $\langle \psi | \in \mathcal{H}^*$) odpowiada ket $(\lambda \hat{A}) | \psi \rangle = \hat{A} \lambda | \psi \rangle = \hat{A} | \lambda \psi \rangle$. Temu zaś ketowi odpowiada bra $\langle \lambda \psi | \hat{A}^\dagger = \lambda^* \langle \psi | \hat{A}^\dagger$ (z antyliniowości typu (28.8)). Wobec przemienności liczb z innymi wielkościami mamy

$$\langle \psi | (\lambda \hat{A})^\dagger = \langle \chi | = \langle \psi | \lambda^* \hat{A}^\dagger. \quad (28.21)$$

Z dowolności bra $\langle \psi |$ wynika teza (28.17b).

(c). Niech $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ – dowolny ket. Wówczas $|\psi'\rangle = (\hat{A} + \hat{B}) | \psi \rangle$, i ketowi temu odpowiada bra

$$\langle \psi' | = \langle \psi | (\hat{A} + \hat{B})^\dagger. \quad (28.22)$$

Z drugiej strony mamy $|\psi'\rangle = \hat{A} | \psi \rangle + \hat{B} | \psi \rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$. Ketowi temu odpowiada

$$\langle \psi' | = \langle \psi_1 | + \langle \psi_2 | = \langle \psi | \hat{A}^\dagger + \langle \psi | \hat{B}^\dagger. \quad (28.23)$$

Zestawiając prawe strony (28.22) i (28.23), z dowolności $\langle \psi |$ wynika teza (28.17c).

(d). Niech $|\psi\rangle$ będzie dowolny. Konstruujemy według przepisu (28.11) odpowiedniości

$$|\psi'\rangle = \hat{B} | \psi \rangle \longrightarrow \langle \psi' | = \langle \psi | \hat{B}^\dagger, \quad (28.24a)$$

$$|\psi''\rangle = \hat{A} | \psi' \rangle \longrightarrow \langle \psi'' | = \langle \psi' | \hat{A}^\dagger. \quad (28.24b)$$

Łącząc powyższe zależności dostajemy ciąg równości

$$\langle \psi'' | = \langle \psi' | \hat{A}^\dagger = (\langle \psi | \hat{B}^\dagger) \hat{A}^\dagger = \langle \psi | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (28.25)$$

Z drugiej strony, z (28.11) także wynika

$$|\psi''\rangle = (\hat{A}\hat{B}) | \psi \rangle \longrightarrow \langle \psi'' | = \langle \psi | (\hat{A}\hat{B})^\dagger. \quad (28.26)$$

Z porównania prawych stron w (28.25) i (28.26), a także z dowolności keta $|\psi\rangle$ (a więc również bra $\langle \psi |$ jest dowolne), wynika już teza (28.17d). ■
