

## Rozdział 29

# (U.8) Reprezentacje w przestrzeni Hilberta

### 29.1 Reprezentacje – dyskusja praktyczna

#### 29.1.1 Wprowadzenie

W głównej części wykładu problem reprezentacji – sposobu konstrukcji funkcji falowych w określonej bazie, omówiliśmy w sposób dość abstrakcyjny. Tutaj zajmiemy się kwestiami bardziej praktycznymi. Niech więc  $\Lambda$  będzie pewną wielkością fizyczną, której odpowiada operator hermitowski–obserwabla  $\hat{\Lambda} = \hat{\Lambda}^\dagger$ . Nie ma potrzeby precyzować jej sensu fizycznego. Nasze rozważania będą mieć charakter ogólny, niezależny od sensu fizycznego obserwabli  $\hat{\Lambda}$ . Zagadnienie własne dla dyskutowanej obserwabli ma postać

$$\hat{\Lambda} |\varphi_n\rangle = \lambda_n |\varphi_n\rangle, \quad |\varphi_n\rangle \in \mathcal{H}, \quad \lambda_n \in \mathbb{R}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (29.1)$$

Ponieważ  $\hat{\Lambda}$  jest obserwabłą, więc jej wektory własne tworzą bazę spełniającą relacje

$$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm} \quad - \quad \text{ortonormalność}, \quad (29.2a)$$

$$\sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = \hat{\mathbf{1}} \quad - \quad \text{zupełność}. \quad (29.2b)$$

Zwróćmy uwagę, że milcząc przyjąłmy, iż wartości własne  $\lambda_n$  są niezdegenerowane (co sprawia, że wystarcza jeden indeks) oraz że zbiór wartości własnych (a więc i wektorów własnych) jest przeliczalny, dzięki czemu występują delty Kroneckera, a nie Diraca.

Mamy więc pełną analogię z założeniami omówionymi przy wprowadzaniu formalnej (ogólnej) reprezentacji  $U$ . Możemy bazę  $\{|\varphi_n\rangle\}$  nazwać reprezentacją  $\Lambda$  i powtórzyć całą (dość formalną) konstrukcję reprezentacji  $\Lambda$ , zamiast  $U$ . Postępując w ten sposób nie otrzymamy, ani też nie powiemy, niczego istotnie nowego.

Wyberzemy inną drogę rozważań. W sytuacji praktycznej, najczęściej pracujemy w reprezentacji położeniowej. Dlatego też będziemy starać się połączyć dotychczasowe wyniki dotyczące formalnej dyskusji w języku przestrzeni Hilberta z opisem w ramach reprezentacji położeniowej. Jako reprezentację  $U$  wybierzemy reprezentację położeniową  $\{|\vec{r}\rangle\}$  numerowaną przez wektor  $\vec{r}$  i spełniającą relacje

$$\langle \vec{r}_1 | \vec{r}_2 \rangle = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad - \quad \text{ortonormalność}, \quad (29.3a)$$

$$\int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \hat{\mathbf{1}} \quad - \quad \text{zupełność (tzw. rozkład jedynek)}. \quad (29.3b)$$

Zgodnie z wprowadzonym w (9.8) nazewnictwem, wielkość

$$\varphi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle, \quad \text{przy czym} \quad \varphi_n^*(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle^* = \langle \varphi_n | \vec{r} \rangle \quad (29.4)$$

nazwiemy funkcją własną obserwabli  $\Lambda$  w reprezentacji położeniowej. Celem poniższych rozważań jest połączenie formalnych aspektów reprezentacji w przestrzeni  $\mathcal{H}$ , z aspektami praktycznymi, związanymi bezpośrednio z technikami obliczeniowymi właściwymi dla przestrzeni funkcyjnej  $L^2$  – przestrzeni funkcji zespolonych, całkowalnych z kwadratem, jakimi są właśnie funkcje własne obserwabli  $\Lambda$ , tj. funkcje  $\varphi_n(\vec{r})$ .

### 29.1.2 Dyskusja zagadnień praktycznych

#### Stany własne obserwabli $\hat{\Lambda}$ . Ortonormalność i zupełność

Formalna relacja ortogonalności dla stanów własnych obserwabli  $\Lambda$  ma postać (29.2a). Przechodzimy do przestrzeni funkcyjnej – to jest do reprezentacji położeniowej

$$\delta_{mn} = \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \int d^3r \langle \varphi_m | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle = \int d^3r \varphi_m^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}). \quad (29.5)$$

Druga równość wynika z rozkładu jedyńki (29.3b) w reprezentacji położeniowej, a trzecia z definicji (29.4).

Podobnie analizujemy relację zupełności (29.2b). Jako punkt wyjścia bierzemy ortonormalność stanów reprezentacji położeniowej, tj. formułę (29.3a). A zatem mamy

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \sum_n \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \vec{r}' \rangle = \sum_n \varphi_n(\vec{r}) \varphi_n^*(\vec{r}'). \quad (29.6)$$

Otrzymane wyrażenia ilustrują związek między formalizmem przestrzeni Hilberta, a językiem znanym ze standardowych przestrzeni funkcyjnych.

#### Równanie własne obserwabli $\hat{\Lambda}$

Wróćmy teraz do zagadnienia własnego (29.1). Na obie jego strony podziela lewostronnie bra  $\langle \vec{r} |$ . Otrzymamy

$$\langle \vec{r} | \hat{\Lambda} | \varphi_n \rangle = \langle \vec{r} | \lambda_n | \varphi_n \rangle = \lambda_n \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle = \lambda_n \varphi_n(\vec{r}), \quad (29.7)$$

bowiem liczbę  $\lambda_n$  można wyciągnąć na zewnątrz elementu macierzowego. Powyższa formuła sugeruje zapis  $\hat{\Lambda} \varphi_n(\vec{r}) = \lambda_n \varphi_n(\vec{r})$ , a więc utożsamienie operatora  $\hat{\Lambda}$  z jego odpowiednikiem  $\hat{\Lambda}^{(r)}$  w reprezentacji położeniowej. Jak wiemy, w ogólnym przypadku, sugestia taka jest nieuzasadniona. Zawsze prawidłowy jest natomiast zapis

$$\langle \vec{r} | \hat{\Lambda} | \varphi_n \rangle = \int d^3r' \langle \vec{r} | \Lambda | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \varphi_n \rangle = \int d^3r' \langle \vec{r} | \Lambda | \vec{r}' \rangle \varphi_n(\vec{r}') \quad (29.8)$$

Łącząc wyrażenia (29.8) i (29.7) w oczywisty sposób otrzymujemy

$$\int d^3r' \langle \vec{r} | \Lambda | \vec{r}' \rangle \varphi_n(\vec{r}') = \lambda_n \varphi_n(\vec{r}), \quad (29.9)$$

Funkcje  $\varphi_n(\vec{r})$  nie są tu dowolne, (funkcje własne obserwabli  $\Lambda$ ), a zatem nie wolno wnioskować czegokolwiek o elemencie macierzowym  $\langle \vec{r} | \Lambda | \vec{r}' \rangle$  operatora  $\hat{\Lambda}$  w reprezentacji położeniowej. Do dyskusji działania operatora  $\hat{\Lambda}$  na funkcje falowe wrócimy nieco dalej.

#### Element macierzowy $\langle \vec{r} | \hat{\Lambda} | \vec{r}' \rangle$

Skupmy się najpierw na bardziej formalnych aspektach. Stosując dwukrotnie relację zupełności dla stanów własnych obserwabli  $\Lambda$  otrzymujemy

$$\langle \vec{r} | \hat{\Lambda} | \vec{r}' \rangle = \sum_m \sum_n \langle \vec{r} | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | \hat{\Lambda} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \vec{r}' \rangle. \quad (29.10)$$

Z zagadnienia własnego (29.1) i warunku ortogonalności (29.2a) dalej wynika, że

$$\langle \varphi_m | \hat{\Lambda} | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_m | \lambda_n | \varphi_n \rangle = \lambda_n \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \lambda_n \delta_{mn}, \quad (29.11)$$

A zatem z (29.10) dostajemy

$$\langle \vec{r} | \hat{\Lambda} | \vec{r}' \rangle = \sum_m \sum_n \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle \lambda_n \delta_{mn} \langle \varphi_m | \vec{r}' \rangle = \sum_n \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle \lambda_n \langle \varphi_n | \vec{r}' \rangle \quad (29.12)$$

Odnajdujemy, że wobec dowolności bra  $\langle \vec{r} |$  i keta  $| \vec{r}' \rangle$  z powyższej równości dostajemy

$$\hat{\Lambda} = \sum_n | \varphi_n \rangle \lambda_n \langle \varphi_n |. \quad (29.13)$$

co oczywiście stanowi rozkład spektralny obserwabli  $\hat{\Lambda}$ .

W wielu praktycznych przypadkach obserwabla  $\hat{\Lambda}$  odpowiada wielkości fizycznej mającej swój odpowiednik w mechanice klasycznej (np. hamiltonian, czy moment pędu). Posługując się wówczas zasadą odpowiedniości potrafimy skonstruować operator  $\hat{\Lambda}^{(r)}$  w reprezentacji położeniowej

$$\hat{\Lambda}^{(r)} = \hat{\Lambda}^{(r)}(\vec{r}, -i\hbar\nabla). \quad (29.14)$$

Sytuacja ulega wtedy uproszczeniu, bowiem jak wiemy z ogólnej teorii

$$\langle \vec{r} | | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Lambda}^{(r)}. \quad (29.15)$$

W takim wypadku równanie własne (29.9) redukuje się do

$$\hat{\Lambda}^{(r)} \varphi_n(\vec{r}) = \lambda_n \varphi_n(\vec{r}). \quad (29.16)$$

### 29.1.3 Dowolny stan $|\psi\rangle$

Niech  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  będzie dowolnym stanem z przestrzeni  $\mathcal{H}$  rozpiętej przez stany własne obserwabli  $\hat{\Lambda}$ . Wyrażenie  $\langle \vec{r} | \psi \rangle \equiv \psi(\vec{r})$  jest funkcją falową w reprezentacji położeniowej. Wektory  $\{ | \varphi_n \rangle \}$  tworzą bazę w  $\mathcal{H}$ , więc stan  $|\psi\rangle$  możemy przedstawić jako kombinację liniową

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n | \varphi_n \rangle, \quad (29.17)$$

Widzimy więc, że bra  $\langle \vec{r} |$  działając na kety produkuje

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle = \sum_n C_n \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle = \sum_n C_n \varphi_n(\vec{r}). \quad (29.18)$$

Mamy więc (w reprezentacji położeniowej) standardowy rozkład dowolnej funkcji falowej  $\psi(\vec{r})$  na funkcje własne obserwabli  $\hat{\Lambda}$ .

Zróbmy teraz inaczej, podziałajmy bra  $\langle \varphi_m |$  na obie strony rozkładu (29.17). Z ortonormalności (29.2a) bazy w  $\mathcal{H}$  wynika więc

$$\langle \varphi_m | \psi \rangle = \sum_n C_n \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \sum_n C_n \delta_{mn} = C_m. \quad (29.19)$$

Odwracając powyższą relację, korzystamy z zupełności reprezentacji  $| \vec{r} \rangle$  i z definicji (29.4). W rezultacie otrzymujemy dobrze znane wyrażenie dla współczynników rozkładu funkcji  $\psi(\vec{r})$  na funkcje bazy

$$C_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle = \int d^3r \langle \varphi_n | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle = \int d^3r \varphi_n^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}), \quad (29.20)$$

Zgodnie z terminologią wprowadzoną w relacji (8.47) współczynniki  $C_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle$  możemy nazywać funkcjami falowymi stanu  $|\psi\rangle$  w reprezentacji stanów własnych obserwabli  $\hat{\Lambda}$  (w reprezentacji  $\Lambda$ ). Jednocześnie, współczynniki  $C_n$  interpretujemy jako amplitudy prawdopodobieństwa tego, że układ w stanie opisanym funkcją falową  $\psi(\vec{r})$  da w wyniku pomiaru wielkości  $\Lambda$  wartość własną  $\lambda_\alpha$ .

Stan  $|\psi\rangle$  powinien być unormowany. Z rozkładu (29.17) otrzymujemy

$$\begin{aligned} 1 = \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_n C_n^* \langle \varphi_n | \sum_m C_m | \varphi_m \rangle = \sum_n \sum_m C_n^* C_m \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle \\ &= \sum_n \sum_m C_n^* C_m \delta_{nm} = \sum_n \sum_m |C_n|^2, \end{aligned} \quad (29.21)$$

a zatem odtwarza się dobrze znany wzór normalizacyjny dla współczynników rozkładu funkcji falowej w bazie funkcji własnych obserwabli.

### Działanie obserwabli $\hat{\Lambda}$

Rozważmy jeszcze działanie operatora  $\hat{\Lambda}$  na dowolny stan  $|\psi\rangle$ . Można to zrobić na różne (wzajemnie zgodne) sposoby. Zanalizujmy ket powstały z  $\hat{\Lambda}|\psi\rangle$  w reprezentacji położeniowej. A więc pisząc z lewej bra  $\langle \vec{r} |$  mamy

$$\langle \vec{r} | \hat{\Lambda} | \psi \rangle = \sum_n \langle \vec{r} | \hat{\Lambda} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi \rangle = \sum_n C_n \lambda_n \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle = \sum_n C_n \lambda_n \varphi_n(\vec{r}), \quad (29.22)$$

co znów odtwarza skądinąd dobrze znane relacje. Jeśli znamy postać operatora  $\hat{\Lambda}^{(r)}$  w reprezentacji położeniowej (tj znamy (29.14) i (29.15)), wówczas formuła (29.22) może być zapisana

$$\langle \vec{r} | \hat{\Lambda} | \psi \rangle = \hat{\Lambda}^{(r)} \langle \vec{r} | \psi \rangle = \hat{\Lambda}^{(r)} \psi(\vec{r}) = \sum_n \lambda_n C_n \varphi_n(\vec{r}), \quad (29.23)$$

co, w ogólnym przypadku nie jest znaczącym uproszczeniem, lecz ładnie pokazuje wewnętrzną zgodność formalizmu.

### Funkcje własne $\hat{\Lambda}$ w reprezentacji pędowej

Funkcja  $\varphi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle$  jest funkcją własną obserwabli  $\Lambda$  w reprezentacji położeniowej. Równie dobrze możemy zbudować reprezentację pędową, w której funkcjami własnymi obserwabli  $\hat{\Lambda}$  będą funkcje  $\tilde{\varphi}_n(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \varphi_n \rangle$ . W myśl ogólnych zasad, bez trudu wyrażamy je przez odpowiednie funkcje w reprezentacji położeniowej

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_n(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \varphi_n \rangle &= \int d^3r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle \\ &= \int d^3r \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle^* \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \varphi_n(\vec{r}), \end{aligned} \quad (29.24)$$

gdzie skorzystaliśmy z wyrażenia (9.55) określającego  $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$  – funkcję własną pędu w reprezentacji położeniowej. W analogiczny sposób "odwrotną" relację zapisujemy w postaci

$$\begin{aligned} \varphi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle &= \int d^3p \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \varphi_n \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \tilde{\varphi}_n(\vec{p}) \end{aligned} \quad (29.25)$$

Widzimy więc, zgodnie z oczekiwaniem, że funkcje własne obserwabli  $\hat{\Lambda}$  w reprezentacjach położeniowej i pędowej tworzą parę transformat Fouriera.

### 29.1.4 Uwagi końcowe

W powyższej dyskusji tak naprawdę nie wprowadziliśmy żadnych nowych pojęć. Pokazaliśmy, jak formalne ujęcie zagadnienia własnego (29.1) obserwacji  $\Lambda$ , "tłumaczy się" na język reprezentacji położeniowej. To ostatnie sformułowanie jest typowe, w sensie, że najczęściej spotykane, tak w literaturze, jak i w zastosowaniach. Nasze wyprowadzenie pokazuje jakie są wewnętrzne związki formalizmu mechaniki kwantowej. Chodzi tu przede wszystkim o relacje pomiędzy abstrakcyjnym ujęciem w przestrzeni Hilberta  $\mathcal{H}$  (w notacji Diraca), a praktycznymi obliczeniami, które zwykle prowadzimy w przestrzeni funkcji falowych. W tej ostatniej mamy bowiem praktyczne narzędzia matematyczne, które pozwalają uzyskać konkretne wyniki ilościowe.

## 29.2 Zmiany reprezentacji

### 29.2.1 Dwie reprezentacje: "stara" i "nowa"

Rozważmy przestrzeń wektorową  $\mathcal{H}$  stanów, w której mamy dwie różne bazy, czy też w myśl przyjętej terminologii, dwie reprezentacje

$$\{ |u_n\rangle \} = \begin{cases} \text{pierwsza ("stara"),} \\ \text{reprezentacja } U \\ \text{dyskretna.} \end{cases} \quad \{ |v_\alpha\rangle \} = \begin{cases} \text{druga ("nowa"),} \\ \text{reprezentacja } V \\ \text{ciągła.} \end{cases} \quad (29.26)$$

Z założenia obie reprezentacje odpowiadają bazom ortonormalnym i zupełnym. Dla pierwszej z nich "starej",

$$\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn}, \quad \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = \hat{1}, \quad (29.27)$$

i dla drugiej "nowej"

$$\langle v_\alpha | v_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta), \quad \int d\alpha |v_\alpha\rangle \langle v_\alpha| = \hat{1}. \quad (29.28)$$

Dowolny wektor  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  możemy rozłożyć w każdej z baz

$$|\psi\rangle = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n | \psi \rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle, \quad \text{gdzie } c_n = \langle u_n | \psi \rangle \quad (29.29a)$$

$$|\psi\rangle = \int d\alpha |v_\alpha\rangle \langle v_\alpha | \psi \rangle = \int d\alpha |v_\alpha\rangle C(\alpha), \quad \text{gdzie } C(\alpha) = \langle v_\alpha | \psi \rangle. \quad (29.29b)$$

Oczywiście wektory jednej z baz można zapisać w drugiej

$$|v_\alpha\rangle = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n | v_\alpha \rangle, \quad (29.30a)$$

$$|u_n\rangle = \int d\alpha |v_\alpha\rangle \langle v_\alpha | u_n \rangle. \quad (29.30b)$$

Iloczyny skalarne występujące w powyższych związkach możemy uważać za macierze

$$\langle u_n | v_\alpha \rangle = T_{n\alpha}, \quad (29.31a)$$

$$\langle v_\alpha | u_n \rangle = S_{\alpha n}. \quad (29.31b)$$

Korzystając z własności iloczynu skalarnego

$$S_{\alpha n} = \langle v_\alpha | u_n \rangle = \langle u_n | v_\alpha \rangle^* = T_{n\alpha}^* = (T^\dagger)_{\alpha n}. \quad (29.32)$$

Możemy także rozważyć "odwrotne" relacje

$$T_{n\alpha} = \langle u_n | v_\alpha \rangle = \langle v_\alpha | u_n \rangle^* = S_{n\alpha}^* = (S^\dagger)_{\alpha n}. \quad (29.33)$$

Traktując formalnie powyższe wyniki, możemy stwierdzić, że obie macierze są wzajemnymi sprzężeniami hermitowskimi

$$S = T^\dagger, \quad \text{lub} \quad T = S^\dagger, \quad (29.34)$$

przy czym podkreślamy, że mówimy o macierzach, a nie o operatorach.

### 29.2.2 Własności transformacji

#### Unitarność transformacji zmiany reprezentacji

Przeanalizujmy konsekwencje ortonormalności obu baz. Dla bazy "starej", z zupełności "nowej"

$$\delta_{mn} = \langle u_m | u_n \rangle = \int d\alpha \langle u_m | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | u_n \rangle. \quad (29.35)$$

Według oznaczeń (29.31), a także z (29.32) mamy dalej

$$\delta_{mn} = \int d\alpha T_{m\alpha} S_{\alpha n} = \int d\alpha T_{m\alpha} (T^\dagger)_{\alpha n} = (T T^\dagger)_{mn}. \quad (29.36)$$

Stąd wnioskujemy, że

$$T T^\dagger = \hat{1} = S^\dagger S. \quad (29.37)$$

Analogicznie z normowania bazy "nowej" wynika

$$\begin{aligned} \delta(\alpha - \beta) &= \langle v_\alpha | v_\beta \rangle = \sum_n \langle v_\alpha | u_n \rangle \langle u_n | v_\beta \rangle = \sum_n S_{\alpha n} T_{n\beta} \\ &= \sum_n S_{\alpha n} S_{\beta n}^* = \sum_n S_{\alpha n} (S^\dagger)_{n\beta} = (S S^\dagger)_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (29.38)$$

A zatem mamy relację analogiczną do (29.37), a mianowicie

$$S S^\dagger = \hat{1} = T^\dagger T. \quad (29.39)$$

Uzyskane związki (29.34), (29.37) oraz (29.39) pozwalają więc wnioskować, że

$$\text{macierze } S, T \text{ są unitarne.} \quad (29.40)$$

#### Zmiana (transformacja) składowych keta

W obu bazach wyrażamy wektor  $|\psi\rangle$  (jeden i ten sam) za pomocą wzorów (29.29). Szukamy związków pomiędzy współczynnikami  $c_n$  w "starej", a  $C(\alpha)$  w "nowej" bazie. Z zupełności bazy starej mamy

$$C(\alpha) = \langle v_\alpha | \psi \rangle = \sum_n \langle v_\alpha | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle = \sum_n S_{\alpha n} c_n, \quad (29.41)$$

lub na odwrót

$$c_n = \langle u_n | \psi \rangle = \int d\alpha \langle u_n | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | \psi \rangle = \int d\alpha T_{n\alpha} C(\alpha) \quad (29.42)$$

Nietrudno sprawdzić wewnętrzną spójność przekształceń. Na przykład, do (29.42) podstawiamy (29.41). Stosując po drodze (29.32) otrzymujemy

$$\begin{aligned} c_n &= \int d\alpha T_{n\alpha} \left( \sum_m S_{\alpha m} c_m \right) = \sum_m \left( \int d\alpha T_{n\alpha} S_{\alpha m} \right) c_m \\ &= \sum_m \left[ \int d\alpha T_{n\alpha} (T^\dagger)_{\alpha m} \right] c_m = \sum_m [T T^\dagger]_{nm} c_m = \sum_m \delta_{nm} c_m = c_n, \end{aligned} \quad (29.43)$$

co wynika z unitarności macierzy  $T$ .

### Transformacja składowych bra

Zależność pomiędzy ketami i bra jest antyliniowa. Tak więc ketowi o rozkładzie (29.29a) w starej bazie odpowiada bra  $\langle \psi | = \sum_n c_n^* \langle u_n |$ . Wobec tego

$$\begin{aligned} \langle \psi | &= \sum_n \langle u_n | \psi \rangle^* \langle u_n | = \sum_n \langle \psi | u_n \rangle \langle u_n | = \sum_n \int d\alpha \langle \psi | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | u_n \rangle \langle u_n | \\ &= \int d\alpha \langle \psi | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | = \int d\alpha C^*(\alpha) \langle v_\alpha |, \end{aligned} \quad (29.44)$$

co stanowi poprawne przedstawienie bra w nowej bazie (w reprezentacji  $V$ ). Współczynniki rozkładów związane są relacją

$$C^*(\alpha) = \langle \psi | v_\alpha \rangle = \sum_n \langle \psi | u_n \rangle \langle u_n | v_\alpha \rangle = \sum_n c_n^* T_{n\alpha}, \quad (29.45)$$

gdzie w ostatnim kroku wykorzystaliśmy (29.31a). Ponieważ  $T_{n\alpha} = (S^\dagger)_{n\alpha}$  więc

$$C^*(\alpha) = \sum_n c_n^* (S^\dagger)_{n\alpha}, \quad (29.46)$$

co jest po prostu relacją sprzężoną do (29.41) i czego należało oczekiwać. Łatwo jest odwrócić powyższe wyrażenie, otrzymamy wtedy

$$c_n^* = \int \alpha C^*(\alpha) (T^\dagger)_{\alpha n} = \int \alpha C^*(\alpha) S_{n\alpha}, \quad (29.47)$$

co z kolei jest sprzężeniem (29.42).

### Zachowanie iloczynu skalarnego

Jak wiemy, macierze unitarne zachowują iloczyn skalarny (pozostawiają bez zmian jego wartość). Sprawdźmy, że tak jest rzeczywiście. W starej bazie dla dwóch wektorów  $|\psi\rangle$  i  $|\varphi\rangle$  iloczyn skalarny wyraża się

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_n b_n^* c_n, \quad (29.48)$$

gdzie  $b_n = \langle u_n | \varphi \rangle$ , zaś  $c_n = \langle u_n | \psi \rangle$ . Przechodząc do nowej bazy, stare współczynniki wyrażamy przez nowe. Robimy to za pomocą formuły (29.42)

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_n \left( \int d\alpha T_{n\alpha} B(\alpha) \right)^* \int d\beta T_{n\beta} C(\beta) \quad (29.49)$$

gdzie teraz  $B(\alpha) = \langle v_\alpha | \varphi \rangle$  oraz  $C(\beta) = \langle v_\beta | \psi \rangle$ . Dalej otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \int d\alpha \int d\beta \sum_n B^*(\alpha) C(\beta) T_{n\alpha} T_{n\beta} \\ &= \int d\alpha \int d\beta \sum_n B^*(\alpha) C(\beta) (T^\dagger)_{\alpha n} T_{n\beta} \\ &= \int d\alpha \int d\beta B^*(\alpha) C(\beta) \delta(\alpha - \beta), \end{aligned} \quad (29.50)$$

na mocy unitarności macierzy  $T$ . Wykonując pozostałe całkowanie mamy

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int d\alpha B^*(\alpha) C(\alpha) = \int d\alpha \langle \varphi | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | \psi \rangle, \quad (29.51)$$

gdzie na mocy zupełności reprezentacji  $V$  stwierdzamy, że wynik jest poprawny. A więc ten sam iloczyn skalarny możemy obliczać w dowolnej bazie (reprezentacji). Innymi słowy zmiana reprezentacji za pomocą macierzy unitarnych nie zmienia iloczynu skalarnego.

Oczywiście automatycznie wnioskujemy, że norma wektora także nie ulega zmianie przy przechodzeniu od jednej reprezentacji do drugiej.

### Zmiana (transformacja) elementów macierzowych

Niech  $\hat{A}$  będzie operatorem odpowiadającym pewnej wielkości fizycznej. Elementy macierzowe tego operatora możemy oczywiście obliczać w obu bazach (reprezentacjach)

$$A_{mn} = \langle u_m | \hat{A} | u_n \rangle \quad \text{lub} \quad A_{\alpha\beta} = \langle v_\alpha | \hat{A} | v_\beta \rangle. \quad (29.52)$$

Sposób indeksowania informuje nas w której bazie prowadzimy obliczenia. Szukamy związków między tymi elementami macierzowymi. Chcemy wyrazić element w nowej bazie przez (skądinąd znany) element w starej bazie. Korzystając dwukrotnie z warunku zupełności starej bazy dostajemy

$$\begin{aligned} A_{\alpha\beta} &= \langle v_\alpha | \hat{A} | v_\beta \rangle = \sum_m \sum_n \langle v_\alpha | u_m \rangle \langle u_m | \hat{A} | u_n \rangle \langle u_n | v_\beta \rangle \\ &= \sum_m \sum_n S_{\alpha m} A_{mn} T_{n\beta} = \sum_m \sum_n S_{\alpha m} A_{mn} (S^\dagger)_{n\beta}. \end{aligned} \quad (29.53)$$

Formalnie rzecz biorąc napiszemy

$$A_{\alpha\beta} = \left( S A_{[U]} S^\dagger \right)_{\alpha\beta} \quad (29.54)$$

gdzie iloczyn po prawej rozumiemy jako iloczyn macierzy. Ponadto dolny wskaźnik przy operatorze  $A$  po prawej wskazuje, że bierzemy tam jego elementy macierzowe w reprezentacji  $U$ . Formuła (29.54) wskazuje więc jak przejść do reprezentacji  $V$  jeśli znany elementy macierzowe w reprezentacji  $U$  i znamy macierz przejścia.

Możemy znaleźć także przejście odwrotne. Element macierzowy w reprezentacji  $U$  "starej", wyrazimy jako

$$\begin{aligned} A_{mn} &= \langle u_m | \hat{A} | u_n \rangle = \int d\alpha \int d\beta \langle u_m | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | \hat{A} | v_\beta \rangle \langle v_\beta | u_n \rangle \\ &= \int d\alpha \int d\beta S_{\alpha m}^* A_{\alpha\beta} S_{\beta n} = \int d\alpha \int d\beta (S^\dagger)_{m\alpha} A_{\alpha\beta} S_{\beta n} \\ &= \left( S^\dagger A_{[V]} S \right)_{mn}, \end{aligned} \quad (29.55)$$

gdzie znów ostatni iloczyn na sens iloczynu macierzowego, zaś operator  $A$  bierzemy w reprezentacji  $V$ .

### 29.2.3 Uwagi końcowe

Niech bazę  $\{|u_n\rangle\}$  (reprezentację  $U$ ) generują wektory własne pewnej obserwabli  $\hat{B}$ :

$$\hat{B}|u_n\rangle = b_n|u_n\rangle, \quad (29.56)$$

(dla prostoty bez degeneracji). Rozwiązanie tego zagadnienia w reprezentacji  $V$  odpowiada znalezieniu  $\langle v_\alpha | u_n \rangle$ , traktowanych dla każdego, kolejnego  $n$  jako funkcje parametru  $\alpha$ . Ze względu na równość (29.31b) rozwiązanie sprowadza się do znalezienia elementów macierzy przejścia  $S_{\alpha n}$ . Na mocy (29.55), dla operatora  $\hat{B}$  mamy

$$\langle u_m | \hat{B} | u_n \rangle = b_n \delta_{mn} = \int d\alpha \int d\beta (S^\dagger)_{m\alpha} A_{\alpha\beta} S_{\beta n}. \quad (29.57)$$

A więc rozwiązanie zagadnienia własnego dla  $\hat{B}$  w reprezentacji  $V$  jest równoważne znalezieniu macierzy  $S_{\alpha n} = \langle v_\alpha | u_n \rangle$ , która diagonalizuje macierz  $B_{\alpha\beta} = \langle v_\alpha | \hat{B} | v_\beta \rangle$  – macierz operatora  $\hat{B}$  w reprezentacji  $V$ . Innymi słowy, funkcje falowe  $\langle v_\alpha | u_n \rangle$  – funkcje własne operatora  $\hat{B}$  w reprezentacji  $V$  diagonalizują (zgodnie z (29.57)) macierz tego operatora zbudowaną w reprezentacji  $V$ .

**Uwaga.** Macierz  $S$  o elementach  $S_{\alpha n} = \langle v_\alpha | u_n \rangle$  nie przedstawia żadnego operatora. Macierz reprezentująca operator dana jest w jednej wybranej bazie, na przykład  $B_{mn} = \langle u_m | \hat{B} | u_n \rangle$ , natomiast macierz  $S$  zależy od obu baz (reprezentacji) jednocześnie. W naszych rozważaniach macierz tę świadomie przyjęliśmy "niekwadratową" (jeden indeks dyskretny, drugi ciągły, tworzą zbiory różnej mocy). Ilustruje to dobitnie fakt, że choć mówimy o macierzach, to macierze te nie odpowiadają jakiemuś operatorowi.

W pewnych przypadkach szczególnych może się zdarzyć, że obie bazy (reprezentacje) są równoliczne. Metody przechodzenia od jednej do drugiej nie ulegają istotnym zmianom, kluczową rolę znów odgrywa ortonormalność i zupełność obu baz.

\*\*\*\*\*