

## Rozdział 10

# Zupełny zbiór obserwabli komutujących

### 10.1 Twierdzenia matematyczne

**Lemat 10.1** *Jeśli dwa operatory  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$  komutują i jeśli  $|\psi\rangle$  jest stanem własnym  $\hat{A}$ , to wektor  $|\psi'\rangle = \hat{B}|\psi\rangle$  jest także stanem własnym  $\hat{A}$  odpowiadającym tej samej wartości własnej.*

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \\ [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \end{array} \right\} \implies \left\{ \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) = \lambda(\hat{B}|\psi\rangle) \right\}. \quad (10.1)$$

**Dowód.** Bezpośrednio z założeń, przez prosty rachunek

$$\hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) = \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \hat{B}\lambda|\psi\rangle = \lambda(\hat{B}|\psi\rangle), \quad (10.2)$$

gdzie w drugiej równości skorzystaliśmy z komutacji operatorów  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$ . ■

Zwróćmy tu uwagę na dwa możliwe przypadki.

- Wartość własna  $\lambda$  jest niezdegenerowana. Wówczas  $|\psi\rangle$  jest jedynym wektorem własnym. Skoro  $\hat{B}|\psi\rangle$  jest też wektorem własnym (przy tej samej wartości własnej) to musi być proporcjonalny do  $|\psi\rangle$ , to znaczy

$$\hat{B}|\psi\rangle = \mu|\psi\rangle. \quad (10.3)$$

A więc w tym wypadku wektor  $|\psi\rangle$  jest także stanem własnym operatora  $\hat{B}$ .

- Wartość własna  $\lambda$  jest zdegenerowana, więc w przestrzeni  $\mathcal{H}$  odpowiada jej podprzestrzeń  $\mathcal{H}_\lambda$  o wymiarze  $g_\lambda > 1$ . Wektor  $\hat{B}|\psi\rangle$  odpowiada tej samej wartości własnej, a więc musi leżeć w podprzestrzeni  $\mathcal{H}_\lambda$ . Jedyne co możemy stwierdzić to, że

$$\lambda - \text{zdegenerowana} \implies \hat{B}|\psi\rangle \in \left\{ \begin{array}{l} \text{Podprzestrzeń } \mathcal{H}_\lambda \text{ rozpięta} \\ \text{przez wektory własne } \hat{A} \\ \text{odpowiadające zdegenerowanej} \\ \text{wartości własnej } \lambda \text{ operatora } \hat{A} \end{array} \right\}. \quad (10.4)$$

Działanie  $\hat{B}$  na wektor własny  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_\lambda$  operatora  $\hat{A}$  nie wyprowadza go poza tę podprzestrzeń. Mówimy, że podprzestrzeń  $\mathcal{H}_\lambda$  jest inwariantna względem  $\hat{B}$ .

**Lemat 10.2** *Jeśli dwie obserwabli  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$  komutują i jeśli  $|\psi_1\rangle$  oraz  $|\psi_2\rangle$  są dwoma wektorami własnymi  $\hat{A}$  należącymi do różnych wartości własnych, to element macierzowy  $\langle\psi_1|\hat{B}|\psi_2\rangle$  jest*

zerem

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \\ \hat{A}|\psi_1\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle \\ \hat{A}|\psi_2\rangle = \lambda_2|\psi_2\rangle \\ \lambda_1 \neq \lambda_2 \end{array} \right\} \implies \langle \psi_1 | \hat{B} | \psi_2 \rangle = 0. \quad (10.5)$$

**Dowód.** Na mocy poprzedniego twierdzenia, z komutacji operatorów  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$  wynika, że  $\hat{B}|\psi_2\rangle$  jest wektorem własnym  $\hat{A}$  należącym do wartości własnej  $\lambda_2$ . Wektory własne operatora  $\hat{A}$  odpowiadające  $\lambda_2$  są ortogonalne do wektorów własnych należących do  $\lambda_1$ . Stąd teza. ■

**Twierdzenie 10.1** *Jeśli dwie obserwabli komutują, to w przestrzeni stanów można skonstruować bazę ortonormalną wspólną dla obu obserwabli.*

**Uzasadnienie.** Przedstawimy tu intuicyjne rozważania, a nie w pełni ścisły dowód. Załóżmy, dla uproszczenia, że operator  $\hat{A}$  ma widmo dyskretne, a więc

$$\hat{A}|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle \quad (10.6)$$

gdzie  $n = 1, 2, \dots$ , oraz  $i = 1, 2, \dots, g_n$  ( $g_n$  jest stopniem degeneracji wartości własnej  $a_n$ ). Ponieważ  $\hat{A}$  jest obserwabłą, więc wektory  $|u_n^i\rangle$  tworzą bazę ortonormalną w przestrzeni stanów  $\mathcal{H}$ . Zbiory wektorów  $\{|u_n^i\rangle\}_{i=1,2,\dots,g_n}$  dla kolejnych  $n$  rozpinają podprzestrzeń  $\mathcal{H}_n$ , na które jest podzielona cała przestrzeń stanów. Wiemy, że operator  $\hat{B}$  komutujący z  $\hat{A}$  działając na wektory z  $\mathcal{H}_n$  nie "wychodzi" z niej,

$$\hat{B}\mathcal{H}_n \in \mathcal{H}_n. \quad (10.7)$$

Wiemy także z poprzedniego lematu, że

$$\langle u_m^i | \hat{B} | u_n^j \rangle = 0, \quad \text{dla } m \neq n. \quad (10.8)$$

Gdy jednak  $m = n$  to relacja ta już na ogół nie jest spełniona. Oznacza to, że macierz reprezentująca operator  $\hat{B}$  ma kształt blokowy

	$\mathcal{H}_1$	$\mathcal{H}_2$	$\mathcal{H}_3$	.....
$\mathcal{H}_1$	■			
$\mathcal{H}_2$		■		
$\mathcal{H}_3$			■	
⋮				■

(10.9)

Zaznaczone bloki są podmacierzami kwadratowymi o wymiarze  $g_n \times g_n$ . Bloki numerowane indeksem  $n$  mogą oczywiście mieć różne rozmiary. Mamy teraz dwa przypadki.

Wartość własna  $a_n$  jest niezdegenerowana,  $\dim \mathcal{H} = 1$  (indeks górny przy  $|u_n^i\rangle$  jest zbyteczny). Odpowiedni blok w macierzy obserwabli  $\hat{B}$  jest wymiaru  $1 \times 1$ . Wektor własny obserwabli  $\hat{A}$  jest jednocześnie wektorem własnym obserwabli  $\hat{B}$ , tak samo jak w (10.3).

Drugi przypadek zachodzi, gdy wartość własna  $a_n$  jest  $g_n$ -krotnie zdegenerowana. Blok w macierzy (10.9) ma wymiar  $g_n \times g_n$ . Wektory  $|u_n^i\rangle$  rozpinające podprzestrzeń  $\mathcal{H}_n$  są wektorami

własnymi obserwabli  $\hat{A}$ , lecz na ogół nie są wektorami własnymi  $\hat{B}$ . Utwórzmy wektor  $|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}_n$  jako dowolną kombinację wektorów rozpinających tę podprzestrzeń. Działanie operatora  $\hat{A}$  na  $|\psi_n\rangle$  to (por. (3.49))

$$\begin{aligned}\hat{A}|\psi_n\rangle &= \hat{A}\left(\sum_{i=1}^{g_n} c_i |u_n^i\rangle\right) = \sum_{i=1}^{g_n} c_i \hat{A}|u_n^i\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{g_n} c_i a_n |u_n^i\rangle = a_n \left(\sum_{i=1}^{g_n} c_i |u_n^i\rangle\right) = a_n |\psi_n\rangle,\end{aligned}\quad (10.10)$$

nie zmienia tej kombinacji poza przemnożeniem przez liczbę. Oznacza to, że w podprzestrzeni  $\mathcal{H}_n$  działanie operatora  $\hat{A}$  można przedstawić jako  $a_n \hat{I}_n$ , gdzie  $\hat{I}_n$  jest macierzą jednostkową "obciętą" do podprzestrzeni  $\mathcal{H}_n$ . Innymi słowy, dowolny wektor z  $\mathcal{H}_n$  jest wektorem własnym  $\hat{A}$ . Jakkolwiek wybierzemy bazę (ortonormalną) w  $\mathcal{H}_n$ , to zbudowany z niej wektor zawsze będzie stanem własnym  $\hat{A}$  należącym do wartości własnej  $a_n$ . Wnioskujemy więc, że w podprzestrzeni  $\mathcal{H}_n$  rozpiętej przez  $\{|u_n^i\rangle\}_{i=1,2,\dots,g_n}$  można wybrać inną bazę. Operator  $\hat{B}$  działając na wektor z  $\mathcal{H}_n$  nie wyprowadza go z tej podprzestrzeni. Operator  $\hat{B}$  jest hermitowski, a więc rozważając jego "obcięcie" do podprzestrzeni  $\mathcal{H}_n$  stwierdzamy, że można do zdiagonalizować. A zatem, możemy w  $\mathcal{H}_n$  znaleźć bazę (ortonormalną)  $\{|\varphi_n^i\rangle\}_{i=1,2,\dots,g_n}$ , złożoną z wektorów własnych obserwabli  $\hat{B}$

$$\hat{B}|\varphi_n^i\rangle = b_i^{(n)} |\varphi_n^i\rangle. \quad (10.11)$$

Każdy  $|\varphi_n^i\rangle \in \mathcal{H}_n$  jest jakąś kombinacją liniową "starej bazy"  $\{|u_n^i\rangle\}_{i=1,2,\dots,g_n}$ . Na mocy relacji (10.10) stwierdzamy, że każdy  $|\varphi_n^i\rangle$  jest nadal wektorem własnym  $\hat{A}$  odpowiadającym wartości własnej  $a_n$ . Postępowanie to możemy zastosować w każdej z podprzestrzeni  $\mathcal{H}_n$ . Tak skonstruowane wektory  $|\varphi_n^i\rangle$  dla kolejnych  $n$  i odpowiadających im  $i = 1, 2, \dots, g_n$  są wektorami własnymi zarówno obserwabli  $\hat{A}$  jak i  $\hat{B}$ , a także stanowią bazę ortonormalną w całej przestrzeni  $\mathcal{H}$ . Podsumowując stwierdzamy

- Przestrzeń  $\mathcal{H}$  dzielimy na podprzestrzenie  $\mathcal{H}_n$  – podprzestrzenie własne obserwabli  $\hat{A}$  odpowiadające wartościom własnym  $a_n$ .
- Każda z podprzestrzeni  $\mathcal{H}_n$  jest inwariantna względem obserwabli  $\hat{B}$  komutującej z  $\hat{A}$ . W  $\mathcal{H}_n$  znajdujemy bazę złożoną z wektorów własnych  $\hat{B}$ .
- Tak podzielony zbiór wektorów  $\{|\varphi_n^i\rangle\}$  dla  $n = 1, 2, \dots; i = 1, 2, \dots, g_n$  jest bazą ortonormalną w  $\mathcal{H}$  złożoną z wektorów własnych wspólnych dla obserwabli  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$ .

Tak więc twierdzenie jest uzasadnione. ■

Zwróćmy uwagę, że uzasadniając twierdzenie milcząco przyjęliśmy, że wartości własne  $b_i^{(n)}$  obserwabli  $\hat{B}$  w  $\mathcal{H}_n$  są niezdegenerowane. Założenie to upraszcza rozważania, ale nie jest konieczne, bo zawsze można w  $\mathcal{H}_n$  znaleźć bazę złożoną z wektorów własnych  $\hat{B}$ , będących jednocześnie wektorami własnymi  $\hat{A}$ . Bloki w macierzy (10.9) wynikają z podziału na podprzestrzenie przez operator  $\hat{A}$ . Jeśli wartości własne  $\hat{B}$  w  $\mathcal{H}_n$  są zdegenerowane to wówczas każdy z bloków będzie podzielony na podbloki, niekoniecznie o rozmiarze  $1 \times 1$ . Dlatego też dla komutujących obserwabli  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$  będziemy pisali

$$\hat{A}|\varphi_{np}^i\rangle = a_n |\varphi_{np}^i\rangle \quad (10.12a)$$

$$\hat{B}|\varphi_{np}^i\rangle = b_p |\varphi_{np}^i\rangle. \quad (10.12b)$$

Indeksy  $n$  i  $p$  rozróżniają wartości własne obu obserwabli. Możemy powiedzieć, że indeks  $n$  numeruje bloki (wynikłe z degeneracji wartości własnej  $a_n$ ), indeks  $p$  numeruje podbloki dla danego  $n$ . Górny indeks  $i$  jest potrzebny jeśli podbloki mają wymiar większy niż  $1 \times 1$ , tj. gdy wartości własne  $\hat{B}$  są nadal zdegenerowane.

Prawdziwe jest również twierdzenie odwrotne. *Jeżeli dwie obserwable mają wspólną bazę wektorów własnych to obserwable te komutują.* Dowód można przeprowadzić przez odwrócenie kolejności rozważań.

Czasami mamy do czynienia z zagadnieniem własnym obserwabli  $\hat{C}$ , która jest sumą dwóch innych obserwabli komutujących, tj.

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}, \quad \text{przy czym} \quad [\hat{A}, \hat{B}] = 0. \quad (10.13)$$

Jeśli znajdziemy zbiór  $|\varphi_{np}^i\rangle$  – wspólną bazę dla  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$ , to problem dla  $\hat{C}$  jest automatycznie rozwiązany. Wektor  $|\varphi_{np}^i\rangle$  w oczywisty sposób jest stanem własnym  $\hat{C}$ :

$$\hat{C}|\varphi_{np}^i\rangle = (a_n + b_p)|\varphi_{np}^i\rangle. \quad (10.14)$$

Fakt, że  $\{|\varphi_{np}^i\rangle\}$  stanowią bazę jest ważny. Stąd bowiem wynika, że liczby  $c_{np} = a_n + b_p$  wyczerpują zbiór wartości własnych obserwabli  $\hat{C}$ .

## 10.2 Zupełny zbiór obserwabli komutujących (ZZOK)

Jeśli mamy obserwabłą  $\hat{A}$  o niezdegenerowanych wartościach własnych to wektory własne  $\{u_n\}$  tworzą bazę w przestrzeni stanów. Podprzestrzenie  $\mathcal{H}_n$  są jednowymiarowe i są wyznaczone jednoznacznie. Mówimy, że operator  $\hat{A}$  stanowi (jednoelementowy) zupełny zbiór obserwabli komutujących (ZZOK).

Jeżeli wartości własne  $\hat{A}$  są zdegenerowane (wszystkie, czy tylko niektóre) to pewne podprzestrzenie  $\mathcal{H}_n$  są więcej niż jednowymiarowe. W tych podprzestrzeniach można wybrać bazę w sposób dowolny. Wartości własne  $a_n$  nie wystarczają więc do jednoznacznego określenia bazy w całej przestrzeni. Aby wyznaczyć bazę w sposób jednoznaczny potrzebujemy jakichś dodatkowych informacji. W tym celu wybieramy obserwabłą  $\hat{B}$  komutującą z  $\hat{A}$  i konstruujemy wspólną bazę. Jeśli problem niejednoznaczności zostanie w ten sposób usunięty, to zbiór  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$  stanowi ZZOK. Jednoznacznie wyznaczona baza  $\{|\varphi_{np}\rangle\}$  odpowiada wartościom własnym  $\{a_n, b_p\}$ . Wystarczy jeśli  $\hat{B}$  w podprzestrzeniach wyznaczonych przez  $\hat{A}$  będzie mieć niezdegenerowane wartości własne. Zwróćmy jednak uwagę, że nie wszystkie wartości własne  $\hat{B}$  muszą być niezdegenerowane. Wektory  $|\varphi_{np}\rangle$  i  $|\varphi_{ms}\rangle$  z dwóch różnych podprzestrzeni  $\mathcal{H}_n$  i  $\mathcal{H}_m$  mogą odpowiadać tym samym wartościom własnym  $\hat{B}$  (choć odpowiadają różnym wartościom własnym:  $a_n \neq a_m$  obserwabli  $\hat{A}$ ). Co więcej, gdyby wszystkie wartości własne  $\hat{B}$  były niezdegenerowane to operator  $\hat{B}$  sam z siebie stanowiłby ZZOK.

Może się tak zdarzyć, że dla pary wartości własnych  $a_n$  i  $b_p$  istnieje kilka wektorów własnych (macierz (10.9) ma w klatkach podklatki o wymiarze większym niż  $1 \times 1$ ). Wobec tego musimy kontynuować proces jednoznacznego wyznaczania bazy. Dobieramy trzecią obserwabłą  $\hat{C}$  komutującą zarówno z  $\hat{A}$  jak i z  $\hat{B}$

$$[\hat{C}, \hat{A}] = [\hat{C}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}] = 0. \quad (10.15)$$

Jeśli wartościom własnym  $a_n$  i  $b_p$  odpowiada jeden wspólny wektor własny  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$ , to z konieczności (ze względu na relację (10.15)) jest to także wektor własny obserwabli  $\hat{C}$ . Wynika to oczywiście z pierwszego lematu (10.1).

Jeśli wartościom własnym  $a_n$  i  $b_p$  odpowiada podprzestrzeń  $\mathcal{H}_{np}$  o wymiarze większym niż 1, to możemy wybrać bazę wspólną dla trzech obserwabli  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  i  $\hat{C}$ . Wówczas trzy wartości własne  $a_n$ ,  $b_p$  i  $c_s$  wyznaczają wektory własne  $|\varphi_{nps}\rangle$ . Jeśli w ten sposób zbudowana baza jest już określona w pełni jednoznacznie to obserwable  $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}\}$  stanowią ZZOK.

W razie potrzeby (nadal brak pełnej jednoznaczności) kontynuujemy proces, dobierając obserwabę  $\hat{D}$  komutującą z trzema poprzednimi.

Podsumowując mówimy, że zbiór obserwabli  $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$  stanowią zupełny zbiór obserwabli komutujących (ZZOK), jeśli

- wszystkie obserwabli komutują parami;
- określenie wartości własnych wszystkich tych operatorów wyznacza jednoznacznie zbiór wektorów własnych tworzących bazę (ortonormalną) w przestrzeni stanów.

Równoważnie możemy powiedzieć, że zbiór obserwabli  $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$  jest zupełnym zbiorem obserwabli komutujących, jeżeli istnieje jednoznacznie określona baza, której wektory są wspólnymi wektorami własnymi wszystkich tych obserwabli jednocześnie.

Należy zdawać sobie sprawę, że wybór ZZOK dla danego układu fizycznego na ogół nie jest jednoznaczny. Kierujemy się zazwyczaj wygodą lub też sensem fizycznym obserwabli, wybierając je tak, aby jak najprościej interpretować wyniki.

### 10.3 Uwagi praktyczne

W praktycznych zastosowaniach interesuje nas oczywiście minimalny ZZOK. Jeśli taki zbudujemy, to zawsze można go rozszerzyć dobierając obserwabę komutującą z pozostałymi. To jednak nie wnosi niczego pożytecznego.

Niech więc (dla przykładu) trzy operatory (obserwabli)  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  oraz  $\hat{C}$  tworzą ZZOK. Wobec tego, z założenia komutują parami

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{C}, \hat{A}] = 0. \quad (10.16)$$

Jak wiemy, operatory te mają wspólny zbiór wektorów własnych

$$\hat{A} |\phi_{nps}\rangle = a_n |\phi_{nps}\rangle, \quad a_n \in \mathbb{R}, \quad n \in \mathcal{N}, \quad (10.17a)$$

$$\hat{B} |\phi_{nps}\rangle = b_p |\phi_{nps}\rangle, \quad b_p \in \mathbb{R}, \quad p \in \mathcal{P}, \quad (10.17b)$$

$$\hat{C} |\phi_{nps}\rangle = c_s |\phi_{nps}\rangle, \quad c_s \in \mathbb{R}, \quad s \in \mathcal{S}, \quad (10.17c)$$

Omawiając zagadnienie w ogólnym kontekście, musimy pamiętać, że zbiory indeksów  $\mathcal{N}$ ,  $\mathcal{P}$  oraz  $\mathcal{S}$  mogą być różne, skończone lub nie, jedne takie, a drugie inne. Charakter zbiorów indeksów zależy od konkretnego zagadnienia. Wektory  $\{|\phi_{nps}\rangle\}$  tworzą (jednoznacznie określoną) bazę w przestrzeni stanów, więc dowolny wektor  $|\psi\rangle$  można w sposób jednoznaczny rozłożyć w bazie

$$|\psi\rangle = \sum_{n \in \mathcal{N}} \sum_{p \in \mathcal{P}} \sum_{s \in \mathcal{S}} C_{nps} |\phi_{nps}\rangle. \quad (10.18)$$

W praktycznych zadaniach naszym podstawowym celem jest zwykle wyznaczenie bazy  $\{|\phi_{nps}\rangle\}$  w przestrzeni  $\mathcal{H}$ , a także jednego (lub więcej) spośród trzech zbiorów wartości własnych  $\{a_n\}$ ,  $\{b_p\}$  oraz  $\{c_s\}$ . Rozwiązanie problemu najczęściej przebiega w następujących krokach.

- Sprawdzamy, czy dany układ obserwabli stanowi ZZOK. Jeśli nie to musimy dobrać obserwabli tak, aby uzyskać ZZOK.
- Dla wybranych obserwabli stanowiących ZZOK rozwiązujemy zagadnienia własne postaci (10.17).
- Z otrzymanych wektorów własnych konstruujemy ortonormalną bazę w przestrzeni stanów.

Przedstawiona procedura jest sformułowana w sposób abstrakcyjny, zaś praktyczne obliczenia wykonujemy zwykle w reprezentacji położeniowej, a więc wektorami stanu są wówczas funkcje falowe.

\*\*\*\*\*