

## Rozdział 7

# Notacja Diraca

### 7.1 Abstrakcyjna przestrzeń wektorów stanu

Do tej pory posługiwaliśmy się postulatem, że stan układu fizycznego jest w mechanice kwantowej w pełni opisany za pomocą funkcji falowej  $\psi(\vec{r})$  (dla cząstki bezspinowej). Funkcję falową mogliśmy rozkładać w bazie funkcji własnych takiego, czy innego operatora – obserwabli, otrzymując zbiór liczb – współczynników rozkładu. Przy wyborze innej obserwabli (inne funkcje własne) rozkład, więc i współczynniki byłyby już inne. Mamy więc do czynienia z sytuacją podobną jak w przypadku zwykłych wektorów z przestrzeni  $\mathbb{R}^3$ , gdzie każdy wektor jest opisany trzema liczbami – składowymi (współrzednymi) w wybranym układzie współrzędnych. Zmiana układu odniesienia prowadzi do innej trójki liczb. Jednak wektor, jako obiekt geometryczny pozostaje zawsze ten sam. Koncepcja wektora sprawia, że przy formułowaniu ogólnych zasad (praw fizyki) nie potrzebujemy odwoływać się do jakiegokolwiek układu współrzędnych.

Podobnym podejściem posłużymy się i teraz — w mechanice kwantowej. Każdemu stanowi kwantowo-mechanicznego układu (np. cząstce) przypisujemy pewien wektor, który oznaczmy przez  $|\psi\rangle$ , z pewnej przestrzeni Hilberta (zupełnej i ośrodkowej przestrzeni wektorowej z iloczynem skalarnym, nad ciałem liczb zespolonych). Formalnie pisząc, dokonujemy przyporządkowania

$$\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F} \longrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{H}. \quad (7.1)$$

Podkreślmy, że w wektorze  $|\psi\rangle$  nie ma żadnej zależności od położenia  $\vec{r}$ . Zanim przejdziemy do znacznie bardziej szczegółowego omówienia związku (7.1) poczynimy pewne intuicyjne uwagi. Otóż na relację tę można spojrzeć tak, jak na odpowiedniość między trójką liczb — składowymi wektora z  $\mathbb{R}^3$  w pewnym układzie współrzędnych, a wektorem — obiektem geometrycznym, który już w żaden sposób nie zależy od układu odniesienia. Wartości funkcji falowej w kolejnych punktach  $\vec{r}$  (choć jest ich nieskończenie wiele) spełniają rolę analogiczną do składowych zwykłego wektora. Podejście takie nie jest jedynie sformalizowaniem mechaniki kwantowej. Pozwala ono na łatwo uchwytne uogólnienia. Są takie sytuacje (np. spin), dla których nie daje się wprowadzić funkcji falowych. Natomiast uogólnienia za pomocą formalnych wektorów jest stosunkowo proste.

Dlatego też postulat o opisie stanu układu sformułujemy inaczej. A mianowicie, postulujemy, że stan układu fizycznego jest opisany przez pewien wektor (wektor stanu lub po prostu stan), należący do odpowiednio dobranej (abstrakcyjnej) przestrzeni Hilberta. Dodatkowo będziemy żądać, aby wektor ten był unormowany do jedności

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \|\psi\| = 1. \quad (7.2)$$

Normę wektora obliczamy za pomocą iloczynu skalarnego, właściwego dla przestrzeni  $\mathcal{H}$ . Żądanie unormowania potrzebne jest do utrzymania interpretacji probabilistycznej. W dalszej części

tego rozdziału omówimy formalizm wektorów stanu, a także jego związki z funkcjami falowymi, operatorami, itp.

## 7.2 Kety i bra. Notacja Diraca

Niech  $\mathcal{H}$  oznacza pewną przestrzeń Hilberta. Ketem nazwiemy element tej przestrzeni, czyli po prostu wektor  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ . Szczegóły związku pomiędzy ketami a funkcjami falowymi omówimy później. Przestrzeń funkcji falowych  $\mathcal{F}$  i przestrzeń Hilberta  $\mathcal{H}$  są izomorficzne, mimo to jednak będziemy rozróżniać między nimi tak, jak rozróżniamy trójki liczb i obiekty geometryczne jakimi są zwykłe wektory. Podkreślimy jeszcze raz, że w ketcie  $|\psi\rangle$  nie ma żadnej zależności od położenia  $\vec{r}$ . W funkcji falowej  $\psi(\vec{r})$  punkt  $\vec{r}$  ma charakter pewnego (uprzywilejowanego) układu odniesienia. Teraz chcemy o tym zapomnieć, a dalej traktować ów układ odniesienia na równi z jakimkolwiek innym.

Przestrzeń  $\mathcal{H}$  jest przestrzenią Hilberta, jest więc wyposażona w iloczyn skalarny

$$|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H} \longrightarrow \langle\psi|\phi\rangle \in \mathbb{C}, \quad (7.3)$$

o własnościach, które wypiszemy już bez dodatkowych komentarzy

$$\bullet \quad \langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*, \quad (7.4a)$$

$$\bullet \quad \langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle, \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}, \quad (7.4b)$$

$$\bullet \quad \langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle, \quad (7.4c)$$

$$\bullet \quad (i) \quad \langle\psi|\psi\rangle = \|\psi\|^2 \in \mathbb{R}, \quad (7.4d)$$

$$(ii) \quad \|\psi\| \geq 0, \text{ równość zachodzi tylko wtedy, gdy } |\psi\rangle = 0. \quad (7.4e)$$

Wektor  $|\psi\rangle$  nazwalismy ketem. Wygodnie jest nazwać

$$\langle\psi| \quad - \quad \text{bra}. \quad (7.5)$$

Iloczyn skalarny  $\langle\varphi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$  jest "bra-ketem". Nazwę tę wprowadził Dirac, bowiem *bracket* oznacza po angielsku nawias. Mówiąc ściśle zbiór wszystkich bra tworzy tzw. przestrzeń dualną  $\mathcal{H}^*$  – przestrzeń funkcjonałów liniowych działających na przestrzeni wektorowej  $\mathcal{H}$ . Nie będziemy jednak omawiać aspektów matematycznych. Zainteresowanych odsyłamy do *Uzupełnień*. Tutaj poprzestaniemy na stwierdzeniu, że bra  $\langle\chi|$  jest obiektem matematycznym, który w działaniu na wektor (ket)  $|\psi\rangle$  produkuje liczbę zespoloną, równą iloczynowi skalarnemu wektorów (ketów)  $|\chi\rangle$  oraz  $|\psi\rangle$ :

$$\left. \begin{array}{l} |\psi\rangle \in \mathcal{H} \\ \langle\chi| \in \mathcal{H}^* \end{array} \right\} \longrightarrow \langle\chi|\psi\rangle \in \mathbb{C}. \quad (7.6)$$

Odpowiedniość pomiędzy ketami i bra oznaczmy znakiem  $\dagger$  (sprzężenia hermitowskiego) i napiszemy

$$\mathcal{H} \ni |\varphi\rangle \xrightarrow{\text{operacja } \dagger} |\varphi\rangle^\dagger = \langle\varphi| \in \mathcal{H}^*. \quad (7.7)$$

Nie wchodząc w niuanse matematyczne przyjmujemy również, że każdemu bra odpowiada ket, więc dodatkowo określimy operację odwrotną

$$\mathcal{H}^* \ni \langle\varphi| \xrightarrow{\text{operacja } \dagger} \langle\varphi|^\dagger = |\varphi\rangle \in \mathcal{H}. \quad (7.8)$$

Łącząc obie relacje widzimy, że złożenie dwóch operacji  $\dagger$  działa następująco

$$|\varphi\rangle^{\dagger\dagger} = (|\varphi\rangle^\dagger)^\dagger = (\langle\varphi|)^\dagger = |\varphi\rangle. \quad (7.9)$$

Przyjmujemy tu bez dowodu (patrz *Uzupełnienia*), że operacja  $\dagger$  jest antyliniowa, tzn. ketowi  $|f\rangle$  będącemu kombinacją liniową  $|f\rangle = \lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle$  (gdzie  $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ ) odpowiada bra  $\langle f| = |f\rangle^\dagger$  takie, że

$$\begin{aligned} |f\rangle^\dagger &= (\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle)^\dagger \\ &= \lambda_1^*|\varphi_1\rangle^\dagger + \lambda_2^*|\varphi_2\rangle^\dagger = \lambda_1^*\langle\varphi_1| + \lambda_2^*\langle\varphi_2| = \langle f|. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Relacja ta dobrze kojarzy się z własnościami sprzężenia hermitowskiego. Stąd zresztą wynika zastosowanie znaku  $\dagger$  do oznaczenia odpowiedniości ket  $\leftrightarrow$  bra.

**Uwaga.** W tym miejscu należy wyjaśnić możliwe nieporozumienie notacyjne. Mnożenie keta (wektora) przez liczbę zespoloną możemy zapisać jako

$$|\lambda\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle. \quad (7.11)$$

Jakiemu bra odpowiada powyższy ket? Można powiedzieć, że ketowi  $|\lambda\psi\rangle$  odpowiada bra  $\langle\lambda\psi|$ . Jednakże na mocy (7.10)

$$\langle\lambda\psi| = |\lambda\psi\rangle^\dagger = (\lambda|\psi\rangle)^\dagger = \lambda^*\langle\psi|. \quad (7.12)$$

"Wyciągając" liczbę  $\lambda \in \mathbb{C}$  z bra musimy pamiętać o antyliniowości. Warto ten fakt skojarzyć także z antyliniowością iloczynu skalarnego w pierwszym składniku (7.4c).

## 7.3 Operatory liniowe

### 7.3.1 Operatory, kety i bra

Nie wprowadzamy tu nieznaną skądinąd informacji. Naszym celem jest przede wszystkim wyjaśnienie kwestii notacyjnych. Operator  $\hat{A}$  odwzorowuje przestrzeń  $\mathcal{H}$  w siebie

$$\mathcal{H} \ni |\psi\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |\psi'\rangle \in \mathcal{H}, \quad \text{przy czym} \quad |\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle. \quad (7.13)$$

Ograniczamy się do klasy operatorów liniowych, to znaczy takich, że

$$\hat{A}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1\hat{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2\hat{A}|\psi_2\rangle, \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}. \quad (7.14)$$

Operatory można dodawać, mnożyć przez liczbę zespoloną, co raczej nie wymaga komentarzy. Natomiast iloczyn dwóch operatorów rozumiemy jako złożenie dwóch odwzorowań

$$(\hat{B}\hat{A})|\psi\rangle = \hat{B}[\hat{A}|\psi\rangle] = \hat{B}|\psi'\rangle. \quad (7.15)$$

Takie złożenie jest na ogół nieprzemienne, więc znów pojawia się pojęcie komutatora dwóch operatorów

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (7.16)$$

Wprowadzamy teraz ważną wielkość, zwaną elementem macierzowym operatora, który definiujemy w następujący sposób

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\varphi|(\hat{A}|\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi'\rangle \in \mathbb{C}, \quad (7.17)$$

co możemy interpretować jako bra  $\langle \varphi |$  działające na ket (wektor)  $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ , lub po prostu jako iloczyn skalarny wektorów  $|\varphi\rangle$  i  $|\psi'\rangle$ . Zwracamy tu uwagę na właściwą kolejność czynników.

Możliwa jest też inna interpretacja wzoru (7.17). Możemy bowiem napisać

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle = (\langle \varphi | \hat{A}) | \psi \rangle \quad (7.18)$$

i potraktować  $\langle \varphi' | = \langle \varphi | \hat{A}$  jako pewne nowe bra.

Podkreślmy, że porządek w jakim wypisywane są poszczególne człony wyrażeń, jest bardzo istotny.  $\langle \varphi | \hat{A}$  to pewne nowe bra z przestrzeni  $\mathcal{H}^*$ , które może dalej działać na ket  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ . Wobec tego

$$[\langle \varphi | \hat{A}] | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \varphi' | \psi \rangle \in \mathbb{C}. \quad (7.19)$$

Z drugiej strony, gdybyśmy napisali w odwrotnej kolejności, tj.  $\hat{A} \langle \varphi |$ , to wtedy mamy

$$\begin{aligned} [\hat{A} \langle \varphi |] | \psi \rangle &= \hat{A} \langle \varphi | \psi \rangle = \hat{A} \cdot \{\text{liczba zespolona}\} \\ &= \hat{A}' - \text{pewien nowy operator,} \end{aligned} \quad (7.20)$$

a więc coś zupełnie innego niż w (7.19).

### 7.3.2 Operator rzutowy

Warto omówić jeszcze jedną kwestię. A mianowicie zanalizujemy wielkość  $|\varphi\rangle\langle\psi|$ . Łatwo zauważyć, że dla dowolnego keta

$$|\phi\rangle \in \mathcal{H} \longrightarrow (|\varphi\rangle\langle\psi|)|\phi\rangle = |\varphi\rangle\langle\psi|\phi\rangle \in \mathcal{H}, \quad (7.21)$$

bowiem iloczyn skalarny  $\langle\psi|\phi\rangle$  jest liczbą, zaś iloczyn keta i liczby zespolonej to wektor z  $\mathcal{H}$ . Wobec tego

$$|\varphi\rangle\langle\psi| = \{\text{operator na } \mathcal{H}\}. \quad (7.22)$$

Niech teraz  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  będzie unormowany do jedności, tzn.  $\langle\phi|\phi\rangle = 1$ . Zbadajmy szczególnie przypadek operatora typu (7.22)

$$\mathbf{P}_\phi = |\phi\rangle\langle\phi|. \quad (7.23)$$

Operator ten działając na dowolny ket  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  daje nam

$$\mathbf{P}_\phi |\psi\rangle = |\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle, \quad (7.24)$$

a więc wektor proporcjonalny do keta  $|\phi\rangle$ . Współczynnikiem proporcjonalności jest iloczyn skalarny  $\langle\phi|\psi\rangle$ , który przez analogię ze standardową geometrią, możemy interpretować jako długość rzutu wektora  $|\psi\rangle$  na wektor  $|\phi\rangle$ . Zatem  $\mathbf{P}_\phi$  w/g wzoru (7.24) daje rzut  $|\psi\rangle$  na  $|\phi\rangle$ . Dlatego też operator  $\mathbf{P}_\phi$  nazywamy operatorem rzutowym, lub projektorem (na  $|\phi\rangle$ ). Operator ten jest idempotentny, tzn.

$$\mathbf{P}_\phi^2 = |\phi\rangle\langle\phi|\phi\rangle\langle\phi| = |\phi\rangle\langle\phi| = \mathbf{P}_\phi, \quad (7.25)$$

co wynika z unormowania keta  $|\phi\rangle$ . Własność idempotentności jest typowa dla operatorów rzutowych. Operatory rzutowe są często spotykane w formalizmie mechaniki kwantowej, dlatego też krótko o nich wspomnieliśmy.

## 7.4 Sprzężenia hermitowskie w notacji Diraca

### 7.4.1 Definicja operatora sprzężonego

Operator  $\hat{A}$  działając na (wektor) ket  $|\psi\rangle$  produkuje inny wektor  $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ . Wektorowi temu, na mocy odpowiedniości (7.7) odpowiada bra  $\langle\psi'|$ , które zapisujemy w postaci

$$\langle\psi'| = (|\psi'\rangle)^\dagger = (\hat{A}|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|\hat{A}^\dagger. \quad (7.26)$$

A zatem operator  $\hat{A}$  przekształca  $|\psi\rangle$  na  $|\psi'\rangle$ , zaś  $\hat{A}^\dagger$  pozwala zbudować nowe bra  $\langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$  ze starego bra  $\langle\psi|$ . Przyporządkowanie to możemy też zapisać jako

$$\{\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle\} \longleftrightarrow \{\langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger\}, \quad (7.27)$$

Powyższe relacje określają więc operator  $\hat{A}^\dagger$ . Rozszerzoną dyskusję tego zagadnienia można znaleźć w *Uzupełnieniach*.

### 7.4.2 Własności sprzężenia hermitowskiego

Z definicji sprzężenia operatora wyprowadzamy jeszcze inną własność  $\hat{A}^\dagger$ . Niech  $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$  – dowolny ket. Wówczas z własności iloczynu skalarnego mamy

$$\langle\varphi|\psi'\rangle = \langle\psi'|\varphi\rangle^*. \quad (7.28)$$

Po lewej kładziemy  $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ , po prawej wstawiamy odpowiednie bra w/g relacji (7.27). A zatem

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle^*, \quad (7.29)$$

lub równoważnie, przez sprzężenie zespolone obu stron

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle, \quad (7.30)$$

dla dowolnych ketów  $|\varphi\rangle$  i  $|\psi\rangle$ . Formuły (7.29) lub (7.30) można uznać za definicję operatora  $\hat{A}^\dagger$  sprzężonego do  $\hat{A}$ . Wzory te budzą skojarzenia z określeniem sprzężenia operatora w przestrzeni funkcji falowych (por. (3.26) i (3.27)) szczególnie, gdy zapiszemy je inaczej, korzystając z własności iloczynu skalarnego

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* = [\langle\psi|(\hat{A}|\varphi\rangle)]^* = \langle(\hat{A}\psi)|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle, \quad (7.31)$$

Nasze wyniki są jednak dosyć formalne. Nie jest na razie oczywiste, jak się one tłumaczą na język funkcji falowych. Problem ten omówimy później, poruszając kwestie tzw. reprezentacji w przestrzeni ketów (w przestrzeni Hilberta).

Operacja sprzężenia hermitowskiego operatorów ma własności:

$$(a). \quad (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}, \quad (7.32a)$$

$$(b). \quad (\lambda\hat{A})^\dagger = \lambda^*\hat{A}^\dagger, \quad (7.32b)$$

$$(c). \quad (\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger, \quad (7.32c)$$

$$(d). \quad (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger, \quad (7.32d)$$

analogiczne do relacji (3.29). Dowody powyższych własności podane są w *Uzupełnieniach*. Na zakończenie zauważmy, że operator rzutowy (7.24) jest ewidentnie hermitowski

$$\mathbf{P}_\phi^\dagger = (|\phi\rangle\langle\phi|)^\dagger = |\phi\rangle\langle\phi| = \mathbf{P}_\phi. \quad (7.33)$$

### 7.4.3 Uwagi dodatkowe i przykłady

Mogą się tu pojawić nieporozumienia podobne do tych, które dyskutowaliśmy w odniesieniu do relacji (7.11) i (7.12). Nie jest mianowicie oczywiste, co znaczy zapis  $|\hat{A}\psi\rangle$  oraz  $\langle\hat{A}\psi|$ . Wyjaśniamy to przyjmując następującą umowę.  $|\hat{A}\psi\rangle$  jest innym zapisem keta  $\hat{A}|\psi\rangle$ , natomiast  $\langle\hat{A}\psi|$  jest to bra stowarzyszone z ketem  $\hat{A}|\psi\rangle$ , czyli

$$|\hat{A}\psi\rangle \equiv \hat{A}|\psi\rangle \quad \text{oraz} \quad \langle\hat{A}\psi| \equiv \langle\psi|\hat{A}^\dagger, \quad (7.34)$$

co powinno zapobiegać ewentualnym nieporozumieniom. Rozważymy teraz kilka prostych przykładów posługiwania się wprowadzonym formalizmem i notacją Diraca.

1. Reguły (7.34) "wyjmowania" operatorów z bra wykorzystamy w (7.29), tj. w relacji (7.29), to jest we wzorze  $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle^*$ . Po lewej stronie znaku równości operator "wciągniemy" w prawo, a po prawej w lewo. Otrzymujemy

$$\langle\varphi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\hat{A}\psi|\varphi\rangle^*. \quad (7.35)$$

Ponieważ  $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle = |\hat{A}\psi\rangle$ , oraz  $\langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger = \langle\hat{A}\psi|$ , więc widzimy, że relacja (7.35) to nic innego niż własność  $\langle\varphi|\psi'\rangle = \langle\psi'|\varphi\rangle^*$  iloczynu skalarnego. Potwierdza to wewnętrzną spójność formalizmu.

2. Rozważymy wyrażenie  $\langle\hat{A}^\dagger\varphi|\psi\rangle$ . Na mocy reguł (7.34) i (7.32a) otrzymujemy

$$\langle\hat{A}^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|(\hat{A}^\dagger)^\dagger|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}\psi\rangle. \quad (7.36)$$

Relacja powyższa bywa czasem używana w celu zdefiniowania operatora sprzężonego  $\hat{A}^\dagger$  do operatora  $\hat{A}$ . Ilustruje ona sposób "przerzucania" operatora z lewej do prawej strony (lub odwrotnie) iloczynu skalarnego.

3. Nietrudno jest wykazać, że ze wzór (7.36) jest równoważny relacji (7.30). Weźmy sprzężenie zespolone po obu stronach (7.36):

$$\left[\langle\hat{A}^\dagger\varphi|\psi\rangle\right]^* = \langle\varphi|\hat{A}\psi\rangle^*. \quad (7.37)$$

Przekształcamy prawą stronę korzystając z własności iloczynu skalarnego

$$\left[\langle\hat{A}^\dagger\varphi|\psi\rangle\right]^* = \langle\hat{A}\psi|\varphi\rangle. \quad (7.38)$$

"Wyjmując" operatory zgodnie z (7.34), po lewej mamy  $\hat{A}^{\dagger\dagger} = \hat{A}$  i dostajemy

$$\left[\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle\right]^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle. \quad (7.39)$$

Nawias kwadratowy można opuścić i odtwarza się relacja (7.30).

Powyższe przykłady pokazują, że notacja Diraca umożliwia proste i szybkie formalne rachunki i to bez odwoływania się do niuansów matematycznych. Pamiętać należy o omówionych wyżej zasadach "wyjmowania" operatorów z ketów i bra, a także o kolejności obiektów, którymi manipulujemy.

### 7.4.4 Notacja Diraca – reguły mnemotechniczne

Ponieważ sprzężanie po hermitowsku jest często wykorzystywane w obliczeniach kwantowo-mechanicznych, warto jest zebrać omówione fakty i przedstawić procedurę obliczeń w postaci reguł, o praktycznie mnemotechnicznym charakterze. A więc obliczając sprzężenie hermitowskie trzeba:

- dokonać następujących zamian wielkości

$$\lambda \longrightarrow \lambda^* \quad \text{dla} \quad \lambda \in \mathbb{C}, \quad (7.40a)$$

$$|\psi\rangle \longrightarrow \langle\psi| \quad \text{dla} \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle\psi| \in \mathcal{H}^*, \quad (7.40b)$$

$$\langle\varphi| \longrightarrow |\varphi\rangle \quad \text{dla} \quad \langle\varphi| \in \mathcal{H}^*, \quad |\varphi\rangle \in \mathcal{H}, \quad (7.40c)$$

$$\hat{A} \longrightarrow \hat{A}^\dagger \quad \text{dla} \quad \hat{A} \text{ operator liniowy na } \mathcal{H}. \quad (7.40d)$$

- Odwrócić porządek wszystkich wielkości, choć w wypadku liczb zespolonych to nie ma znaczenia (liczby te są przemienne z wszelkimi innymi obiektami).

Dla przykładu zastosowania powyższych reguł postępowania, rozważmy wielkość (nie jest przy tym ważne czy ma ona jakikolwiek sens fizyczny lub matematyczny, czy nie)

$$\begin{aligned} [\lambda \langle u | \hat{A} | v \rangle | w \rangle \hat{B} \langle \psi |]^\dagger &= |\psi\rangle \hat{B}^\dagger \langle w | \langle v | \hat{A}^\dagger | u \rangle \lambda^* \\ &= \lambda^* \langle v | \hat{A}^\dagger | u \rangle |\psi\rangle \hat{B}^\dagger \langle w | \end{aligned} \quad (7.41)$$

W ostatnim kroku liczbę zespoloną  $\lambda^*$  i element macierzowy  $\langle \psi | \hat{A}^\dagger | w \rangle$ , który też jest liczbą zespoloną, przenieśliśmy na początek wyrażenia, bowiem liczby komutują z wszelkimi innymi wielkościami.

## 7.5 Operatory hermitowskie – obserwable

Na podstawie relacji (7.27) można domyślać się, że operatory  $\hat{A}$  i  $\hat{A}^\dagger$  są dwoma różnymi obiektami matematycznymi, bowiem  $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$  to ket, zaś  $\langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$  to bra. Dlatego też zapis warunku hermitowskości operatora w postaci  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$  nie jest w pełni ścisły (więcej szczegółów na ten temat można znaleźć w *Uzupełnieniach*). Należałoby raczej powiedzieć, że jeśli dla dowolnych  $|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathcal{H}$  zachodzi

$$(\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle) = \langle\psi|(\hat{A}|\varphi\rangle) \quad (7.42)$$

to operator  $\hat{A}$  nazywamy hermitowskim. Relację tę wygodnie jest zapisać po prostu pomijając nawiasy

$$\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle. \quad (7.43)$$

Widać więc, że przy operatorze hermitowskim można pominąć znak  $\dagger$ . Ze względu na omówione reguły posługiwania się notacją Diraca, pożyteczne jest używanie znaku  $\dagger$  i (dla operatorów hermitowskich) pomijanie go dopiero na końcu obliczeń.

Dla operatora hermitowskiego, z relacji (7.30) mamy

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle, \quad (7.44)$$

gdzie druga równość wynika z (7.43). Co więcej,

$$\langle\hat{A}\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{A}\varphi\rangle, \quad (7.45)$$

gdzie pierwsza równość wynika z reguły "wyjmowania" (7.34), druga równość to zastosowanie (7.43), zaś trzecia to znów reguła (7.34). Formuła (7.45) wskazuje, że z hermitowskości operatora wynika możliwość "przekładania" go z pierwszego do drugiego składnika iloczynu skalarnego.

Zwróćmy na zakończenie uwagę na mnemotechniczny charakter notacji Diraca. Dzięki temu posługujemy się nią szybko, łatwo i wygodnie. Dodatkową zaletą notacji Diraca jest to, że "ukrywa w sobie" szczegóły natury matematycznej i w ten sposób pozwala wykonywać obliczenia bez zbytniego zastanawiania się nad pełną ścisłością matematyczną.

\*\*\*\*\*