

Rozdział 8

Reprezentacje w przestrzeni stanów

8.1 Definicja reprezentacji

8.1.1 Intuicyjne wprowadzenie

Wektor jest abstrakcyjnym pojęciem geometrycznym. Wykonanie konkretnych obliczeń wymaga zadania (wybrania) odpowiedniego układu współrzędnych, w którym wektor utożsamiamy z kolumną liczb. Wybór układu współrzędnych to, innymi słowy, wybór wektorów bazy – jednostkowych wektorów osi układu. Współrzędne wektora to współczynniki jego rozkładu na wektory wybranej bazy. Podobnie postępujemy w mechanice kwantowej, choć posługujemy się nieco inną terminologią.

Wybór reprezentacji to po prostu wybór bazy w przestrzeni Hilberta – przestrzeni stanów układu fizycznego. Wybierając bazę przedstawiamy wektory przez ich "składowe", zaś operatory reprezentujemy przez odpowiednio obliczone elementy macierzowe. Wybór bazy – reprezentacji jest w zasadzie dowolny, lecz tak jak wybór układu współrzędnych w mechanice klasycznej, jest na ogół podyktowany wygodą obliczeń.

Jako bazę w pewnej przestrzeni Hilberta \mathcal{H} wybierzemy zbiór wektorów (ketów),

$$\{ |u_\alpha\rangle \} = \text{baza w przestrzeni } \mathcal{H}, \quad \alpha \in \mathcal{I}. \quad (8.1)$$

Mówimy często, że dokonaliśmy wyboru reprezentacji U . Jeżeli wybrana baza stanowi zbiór wektorów własnych pewnej wielkości fizycznej – obserwabli \hat{U} , to wybranej bazie – reprezentacji, nadajemy nazwę związaną z ową wielkością fizyczną. Na przykład, gdy baza $\{|u_\alpha\rangle\}$ odpowiada stanom własnym hamiltonianu, to mówimy o reprezentacji energetycznej, bowiem wtedy $\hat{U} = \hat{H}$ jest hamiltonianem, czyli operatorem energii.

Zwracamy tu uwagę na następującą okoliczność. Wektory bazy są numerowane indeksem α z pewnego zbioru \mathcal{I} . Możemy tu mieć do czynienia z trzema różnymi przypadkami.

- Wymiar przestrzeni Hilberta \mathcal{H} jest skończony ($\dim \mathcal{H} = N < \infty$). Wówczas zbiór \mathcal{I} jest też skończony i zawiera N elementów, które można ponumerować od 1 do N . Wtedy $\delta(\alpha - \beta) = \delta_{\alpha\beta}$ jest zwykłą deltą Kroneckera.
- Wymiar przestrzeni \mathcal{H} jest nieskończony ($\dim \mathcal{H} = \infty$) lecz przeliczalny (mocy takiej, jak zbiór liczb naturalnych \mathbb{N}). Zbiór \mathcal{I} jest przeliczalny i pokrywa się z \mathbb{N} , zaś $\delta(\alpha - \beta) = \delta_{\alpha\beta}$ jest nadal deltą Kroneckera.
- Wymiar przestrzeni Hilberta \mathcal{H} jest nieskończony, nieprzeliczalny ($\dim \mathcal{H} = \infty$, mocy continuum, jak zbiór liczb rzeczywistych \mathbb{R}). Zbiór \mathcal{I} też jest nieprzeliczalny, a $\delta(\alpha - \beta)$ nabiera sensu tzw. delty Diraca.

8.1.2 Relacje ortonormalności i zupełności

Wybraliśmy reprezentację U , a więc bazę w przestrzeni Hilberta. Zakładamy, że jest to zbiór wektorów ortonormalnych, czyli taki, że wektory te spełniają warunek

$$\langle u_\alpha | u_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta) \quad (8.2)$$

Z faktu, że zbiór $\{|u_\alpha\rangle\}$ jest bazą w \mathcal{H} wynika, że dowolny ket (wektor) $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ można (i to w sposób jednoznaczny) zapisać jako kombinację liniową wektorów bazy postaci

$$|\psi\rangle = \int_{\mathcal{I}} d\alpha f(\alpha) |u_\alpha\rangle = \int_{\mathcal{I}} d\alpha |u_\alpha\rangle f(\alpha), \quad (8.3)$$

gdzie współczynniki $f(\alpha)$ są liczbami (zależnymi od parametru α), a więc nie ma znaczenia, czy napiszemy je przed, czy za wektorem. Rozkład taki nazwać możemy rozkładem keta $|\psi\rangle$ w reprezentacji U . Do dyskusji tego rozkładu wrócimy w dalszym ciągu wykładu. Sens całki w powyższym wzorze zależy od omawianego wyżej charakteru zbioru indeksów. Ponownie mamy trzy możliwe przypadki.

- $\alpha \in \{\text{zbiór skończony}\}$. Całka przechodzi w sumę skończoną. Współczynniki zapisujemy jako $f(\alpha) = f_\alpha$, przy czym stanowią one ciąg skończony.
- $\alpha \in \{\text{zbiór nieskończony, przeliczalny}\}$. Całka oznacza sumę nieskończoną (szereg), a współczynniki $f(\alpha) = f_\alpha$ są ciągiem nieskończonym.
- $\alpha \in \{\text{zbiór nieskończony, continuum}\}$. Całka pozostaje całką. Współczynniki $f(\alpha)$ są pewną funkcją indeksu α . (W zasadzie nic nie stoi na przeszkodzie, aby oznaczać je również za pomocą symbolu f_α).

Wprowadziliśmy w ten sposób ogólną notację, którą w razie potrzeby możemy dopasować do konkretnego przypadku, odpowiadającego jednej z trzech omówionych możliwości. W dalszym ciągu naszych rozważań nie będziemy za każdym razem, tam gdzie nie jest to konieczne, omawiać tych trzech możliwości. Dalszą dyskusję prowadzimy w notacji właściwej dla trzeciego przypadku. Adaptacja zapisu dla dwóch pozostałych, w świetle powyższych uwag, nie powinna stanowić żadnego problemu.

Oczywiście z relacji ortonormalności (8.2) zastosowanej do rozkładu (8.3) wynika

$$\langle u_\beta | \psi \rangle = \int_{\mathcal{I}} d\alpha \langle u_\beta | u_\alpha \rangle f(\alpha) = \int_{\mathcal{I}} d\alpha \delta(\alpha - \beta) f(\alpha) = f(\beta). \quad (8.4)$$

Wielkości $\langle u_\beta | \psi \rangle$, gdzie indeks β przebiega odpowiedni zbiór wartości, często bywają nazywane funkcjami falowymi w reprezentacji U (do sprecyzowania i omówienia tej nazwy wrócimy dalej).

Dalsze rozumowanie ilustruje następujący ciąg równości. Korzystamy z (8.3) i (8.4)

$$|\psi\rangle = \int_{\mathcal{I}} d\alpha |u_\alpha\rangle f(\alpha) = \int_{\mathcal{I}} d\alpha |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha | \psi \rangle = \left[\int_{\mathcal{I}} d\alpha |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha | \right] |\psi\rangle. \quad (8.5)$$

Relacja (8.5) musi być słuszna dla dowolnego keta $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, więc piszemy

$$\int_{\mathcal{I}} d\alpha |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha | = \int_{\mathcal{I}} d\alpha \hat{P}_\alpha = \hat{\mathbf{1}}, \quad (8.6)$$

gdzie $\hat{\mathbf{1}}$ jest operatorem jednostkowym (operatorem identyczności) na rozważanej przestrzeni Hilberta \mathcal{H} . Relację (8.6) nazywamy relacją zupełności bazy w \mathcal{H} , lub rozkładem operatora jednostkowego (w skrócie – jedynki) w reprezentacji U . Operator identyczności na przestrzeni \mathcal{H} został więc rozłożony na operatory rzutowe $\hat{P}_\alpha = |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha |$, z których każdy rzutuje na kierunek wyznaczony przez kolejny wektor wybranej bazy.

Wyprowadziliśmy tutaj relację zupełności zakładając jednoznaczność rozkładu wektora w pewnej bazie. Zachodzi też stwierdzenie odwrotne. Jeżeli pewien zbiór wektorów spełnia relację zupełności (8.6), to zbiór ten stanowi bazę ortonormalną w badanej przestrzeni. Skoro zaś jest bazą, to rozkład typu (8.5) jest jednoznaczny.

8.2 Reprezentacje ketów, bra oraz operatorów

8.2.1 Reprezentacje ketów i bra

Analizujemy teraz wektor (ket) $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, w której wybrana została baza ortonormalna $\{|u_\alpha\rangle\}$, czy też innymi słowy, reprezentacja U . Na podstawie relacji (8.3), która jest przedstawieniem wektora $|\psi\rangle$ jako kombinacji liniowej wektorów bazy, możemy wektor ten utożsamić (w reprezentacji U) ze "słupkiem" – kolumną

$$|\psi\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle u_\alpha | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ f(\alpha) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (8.7)$$

w którym każdy z elementów jest liczbą obliczoną z (8.4). Gdy indeks α przebiega zbiór skończony, to kolumna (8.7) ma tyle elementów, ile wynosi wymiar przestrzeni \mathcal{H} . Jeżeli zaś zbiór indeksów jest nieprzeliczalny, to powyższą kolumnę można utożsamić z pewną zwykłą funkcją parametru (zmiennej) α . Relacja (8.7) ściśle łączy się z rozkładem (8.5), tj. $|\psi\rangle = \int_{\mathcal{I}} d\alpha |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha | \psi \rangle$, który można też interpretować jako działanie operatora identyczności, określonego w (8.6) na ket $|\psi\rangle$. Wielkości $\langle u_\alpha | \psi \rangle$ są współczynnikami rozkładu (składowymi) wektora stanu w wybranej bazie – reprezentacji.

Zupełnie analogicznie możemy złożyć bra i operator jednostkowy, a więc utworzyć nowe bra $\langle \phi | \hat{1} \in \mathcal{H}^*$, które działając na wektor $|\psi\rangle$ musi dawać to samo co po prostu $\langle \phi |$. Wobec tego musi być

$$\langle \phi | = \langle \phi | \hat{1} = \int_{\mathcal{I}} d\alpha \langle \phi | u_\alpha \rangle \langle u_\alpha |. \quad (8.8)$$

Interpretując powyższy wzór jako rozkład bra na "składowe", widzimy, że $\langle \phi | u_\alpha \rangle = \langle u_\alpha | \phi \rangle^*$. A więc mamy tu do czynienia ze sprzężeniami zespolonymi współczynników (składowych) keta $|\phi\rangle$ hermitowsko sprzężonego z badanym bra. Otrzymany związek jest przejawem antyliniowej relacji między ketami i bra. Stanowi on rozkład bra $\langle \phi |$ w reprezentacji U . Jeżeli teraz $b(\alpha) = \langle u_\alpha | \varphi \rangle$ będą współczynnikami rozkładu (w reprezentacji U), takimi jak w (8.3), dla wektora (keta) $|\varphi\rangle$, wówczas ze względu na antyliniowość, odpowiednie bra będzie mieć w przestrzeni \mathcal{H}^* rozkład

$$\langle \varphi | = \int_{\mathcal{I}} d\beta b^*(\beta) \langle u_\beta | \quad (8.9)$$

8.2.2 Reprezentacja iloczynu skalarnego

Przechodzimy do dyskusji iloczynu skalarnego dwóch wektorów. Z rozkładów (8.9) i (8.3) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \left(\int_{\mathcal{I}} d\beta b^*(\beta) \langle u_\beta | \right) \left(\int_{\mathcal{I}} d\alpha f(\alpha) |u_\alpha\rangle \right) \\ &= \int_{\mathcal{I}} d\alpha \int_{\mathcal{I}} d\beta b^*(\beta) f(\alpha) \langle u_\beta | u_\alpha \rangle, \end{aligned} \quad (8.10)$$

bo liczby $b^*(\beta)$ i $f(\alpha)$ są przemienne z ketami i bra. I dalej z ortonormalności bazy (8.2)

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int_{\mathcal{I}} d\alpha \int_{\mathcal{I}} d\beta b^*(\beta) f(\alpha) \delta(\beta - \alpha) = \int_{\mathcal{I}} d\alpha b^*(\alpha) f(\alpha). \quad (8.11)$$

Z określenia (8.4) współczynników $b^*(\beta)$ oraz $f(\alpha)$ wynika

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \int_{\mathcal{I}} d\alpha \langle \varphi | u_\alpha \rangle \langle u_\alpha | \psi \rangle \\ &= \langle \varphi | \left(\int_{\mathcal{I}} d\alpha | u_\alpha \rangle \langle u_\alpha | \right) | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Otrzymaliśmy w zasadzie tożsamość, która niewiele wnosi, lecz sprawdza wewnętrzną spójność formalizmu. Formuła (8.26) pozwala jednak na dokonanie ważnego kroku interpretacyjnego. Ponieważ "składowe" keta $f(\alpha) = \langle u_\alpha | \psi \rangle$ uporządkowaliśmy w kolumnę, widzimy, że dla zachowania reguł obliczania iloczynu skalarnego według zasad mnożenia macierzy, należy wziąć "składowe" bra w postaci wiersza

$$\langle \varphi | \longrightarrow (\dots, \langle \varphi | u_\alpha \rangle, \dots) = (\dots, b^*(\alpha), \dots), \quad (8.13)$$

czyli więc bra $\langle \phi |$ w reprezentacji U jest przedstawione za pomocą macierzy jednowierszowej. A zatem w sensie macierzowym ket $|\psi\rangle$ i bra $\langle \psi|$, reprezentowane odpowiednio przez kolumnę i wiersz, są hermitowsko sprzężonymi macierzami (lub ich uogólnieniami na nieskończenie wiele wymiarów).

8.2.3 Uwagi o normowaniu

Probabilistyczna interpretacja mechaniki kwantowej wymaga, aby stan $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ był unormowany. Ze wzoru (8.39) zastosowanego dla $\langle \varphi | = \langle \psi |$ otrzymujemy

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = \int_{\mathcal{I}} d\alpha f^*(\alpha) f(\alpha) = \int_{\mathcal{I}} d\alpha |f(\alpha)|^2. \quad (8.14)$$

Żądanie unormowania stanu $|\psi\rangle$ sprowadza się więc do normowania współczynników rozkładu tego stanu w bazie $\{|u_\alpha\rangle\}$. Oczywiście, w przypadku bazy dyskretnej, całka w (8.14) przechodzi w sumę po dyskretnym indeksie.

8.2.4 Reprezentacja $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$

W poprzednich paragrafach omówiliśmy sposób przyporządkowania ketowi $|\psi\rangle$ jego "składowych" $f(\alpha) = \langle u_\alpha | \psi \rangle$. Rozważmy teraz następującą sytuację. Mamy rozkłady dwóch stanów w reprezentacji U :

$$|\psi\rangle = \int_{\mathcal{I}} d\alpha f(\alpha) |u_\alpha\rangle, \quad \text{gdzie} \quad f(\alpha) = \langle u_\alpha | \psi \rangle \quad (8.15a)$$

$$|\psi'\rangle = \int_{\mathcal{I}} d\beta \tilde{f}(\beta) |u_\beta\rangle, \quad \text{gdzie} \quad \tilde{f}(\beta) = \langle u_\beta | \psi' \rangle \quad (8.15b)$$

Przyjmujemy, że oba rozważane stany (wektory) są powiązane relacją

$$|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle, \quad (8.16)$$

gdzie \hat{A} jest pewnym operatorem liniowym. Powstaje więc pytanie: jak związek (8.16) pomiędzy wektorami przekłada się na relację pomiędzy współczynnikami $f(\alpha)$ i $\tilde{f}(\beta)$ rozwinąć w reprezentacji U ?

Nie jest trudno odpowiedzieć na postawione pytanie. Z definicji współczynników $\tilde{f}(\alpha)$ przekształconego keta, a także z (8.16) mamy

$$\tilde{f}(\alpha) = \langle u_\alpha | \psi' \rangle = \langle u_\alpha | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (8.17)$$

W powyższym wzorze, pomiędzy operator \hat{A} a ket $|\psi\rangle$, wstawiamy rozkład jedyńki (relację zupełności) (8.6). W ten sposób otrzymujemy

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\alpha) &= \langle u_\alpha | \hat{A} \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle = \langle u_\alpha | \hat{A} \left(\int_{\mathcal{I}} d\beta |u_\beta\rangle \langle u_\beta| \right) | \psi \rangle \\ &= \int_{\mathcal{I}} d\beta \langle u_\alpha | \hat{A} | u_\beta \rangle \langle u_\beta | \psi \rangle = \int_{\mathcal{I}} d\beta A_{\alpha\beta} f(\beta), \end{aligned} \quad (8.18)$$

gdzie wprowadziliśmy tzw. elementy macierzowe operatora \hat{A} w reprezentacji U , zdefiniowane jako

$$A_{\alpha\beta} = \langle u_\alpha | \hat{A} | u_\beta \rangle \quad (8.19)$$

Jeśli więc umiemy skonstruować elementy macierzowe, to wzór (8.18) stanowi odpowiedź na postawione powyżej pytanie.

Zanim omówimy elementy macierzowe $\langle u_\alpha | \hat{A} | u_\beta \rangle$ zauważmy, że współczynniki $f(\beta)$ i $\tilde{f}(\alpha)$ przedstawiają wektory $|\psi\rangle$ i $|\psi'\rangle$ w reprezentacji U jako kolumny (8.7). Przyglądając się relacji (8.18) widzimy, że aby zachować zgodność ze standardową notacją macierzową – kolumna przedstawiająca przekształcony wektor musi powstać przez przemnożenie macierzy reprezentującej operator w danej bazie i kolumny "składowych" wektora wyjściowego. Dlatego też wielkości, zwane elementami macierzowymi, rzeczywiście interpretujemy jako macierz kwadratową, w której indeks α numeruje wiersze, zaś indeks β kolumny. Macierz taka może być skończona lub nie, co zależy od wymiaru przestrzeni \mathcal{H} . Taka interpretacja wyjaśnia także nazwę nadaną obiektom wprowadzonym w równaniu (8.19).

Wybierając konkretną bazę w przestrzeni Hilberta najczęściej kierujemy się łatwością obliczeń. Załóżmy więc, że baza $\{|u_\alpha\rangle\}$ jest tak wybrana, że umiemy wyliczyć niezbędne nam elementy macierzowe operatora \hat{A} . Innymi słowy, przyjmujemy, że umiemy zbudować macierz (8.19) przedstawiającą nasz operator w reprezentacji U . Aby efektywnie wykorzystywać relację (8.18) pomiędzy współczynnikami rozkładu dwóch wektorów powiązanych przez operator \hat{A} , warto omówić niektóre własności elementów macierzowych operatora w reprezentacji U .

8.2.5 Reprezentacja iloczynu operatorów

Zobaczmy teraz, jak wprowadzone elementy macierzowe dotyczą iloczynu operatorów. Wychodząc więc wprost z definicji (8.19) i korzystając po drodze z rozkładu jedyńki (8.6) w reprezentacji U , otrzymujemy

$$\begin{aligned} (\hat{A}\hat{B})_{\alpha\beta} &= \langle u_\alpha | \hat{A}\hat{B} | u_\beta \rangle = \langle u_\alpha | \hat{A} \hat{\mathbf{1}} \hat{B} | u_\beta \rangle \\ &= \langle u_\alpha | \hat{A} \left(\int_{\mathcal{I}} d\gamma |u_\gamma\rangle \langle u_\gamma| \right) \hat{B} | u_\beta \rangle \\ &= \int_{\mathcal{I}} d\gamma \langle u_\alpha | \hat{A} | u_\gamma \rangle \langle u_\gamma | \hat{B} | u_\beta \rangle = \int_{\mathcal{I}} d\gamma A_{\alpha\gamma} B_{\gamma\beta} \end{aligned} \quad (8.20)$$

Wprowadzony sposób określania elementu macierzowego iloczynu operatorów w wybranej bazie jest więc konsystentny z metodami obliczania iloczynu macierzy. Potwierdza to słuszność nazwy – elementy macierzowe. Tak więc macierz iloczynu operatorów jest iloczynem odpowiednich macierzy.

Zauważmy, że wyprowadzenie relacji (8.20) moglibyśmy przeprowadzić w dowolnej innej reprezentacji (bazie). Reguła obliczania elementu macierzowego iloczynu operatorów nie zależy więc od wyboru reprezentacji. Praktyczne obliczenia wykonujemy jednak zawsze wybierając jakąś konkretną reprezentację. Jest to sytuacja podobna do tej, w której prawa fizyki klasycznej formułujemy za pomocą wektorów, wielkości geometrycznych, niezależnych od wyboru układu współrzędnych. Faktyczne obliczenia prowadzimy jednak w odpowiednio dobranym układzie odniesienia.

8.2.6 Elementy macierzowe operatora sprzężonego

Rozważmy operator \hat{A}^\dagger hermitowsko sprzężony do operatora \hat{A} . Pytamy jakie są jego elementy macierzowe w reprezentacji U ? Element macierzowy tego operatora jest postaci

$$\left(\hat{A}^\dagger\right)_{\alpha\beta} = \langle u_\alpha | \hat{A}^\dagger | u_\beta \rangle = \langle u_\beta | \hat{A} | u_\alpha \rangle^* = A_{\beta\alpha}^*, \quad (8.21)$$

gdzie, w drugiej równości wykorzystaliśmy, znaną już relację $\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \varphi \rangle$ pomiędzy elementami macierzowymi operatora sprzężonego i wyjściowego. Widzimy więc, że macierz operatora sprzężonego tworzymy z macierzy operatora niesprzężonego poprzez transpozycję i zwykle sprzężenie zespolone. Jeżeli natomiast operator \hat{A} jest hermitowski, wówczas z (8.21) wynika $\left(\hat{A}^\dagger\right)_{\alpha\beta} = \left(\hat{A}\right)_{\alpha\beta} = A_{\alpha\beta}$, a zatem

$$A_{\alpha\beta} = A_{\beta\alpha}^*, \quad \hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad - \text{ hermitowski.} \quad (8.22)$$

Macierz operatora hermitowskiego jest więc hermitowska, co chyba nie jest wnioskiem nieoczekiwanym. Odnotujmy jeszcze, że diagonalne elementy macierzowe operatora hermitowskiego są rzeczywiste

$$A_{\alpha\alpha} = A_{\alpha\alpha}^* \in \mathbb{R}, \quad \hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad - \text{ hermitowski,} \quad (8.23)$$

co jest ogólną własnością macierzy hermitowskich.

Podkreślmy ponownie, że rozważania powyższe, dotyczące operatorów i ich sprzężeń są niezależne od wyboru reprezentacji (bazy w przestrzeni \mathcal{H}), to znaczy przebiegają w ten sam sposób w każdej reprezentacji.

8.2.7 Wyrażenie dla $\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle$

Posługujemy się cały czas tymi samymi sposobami. Rozważając element macierzowy, a więc liczbę $\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle$ korzystamy dwukrotnie z rozkładu jedynki (8.6) i mamy

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle &= \langle \varphi | \hat{\mathbf{1}} \hat{A} \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle \\ &= \langle \varphi | \left(\int_{\mathcal{I}} d\alpha | u_\alpha \rangle \langle u_\alpha | \right) \hat{A} \left(\int_{\mathcal{I}} d\beta | u_\beta \rangle \langle u_\beta | \right) | \psi \rangle \\ &= \int_{\mathcal{I}} d\alpha \int_{\mathcal{I}} d\beta \langle \varphi | u_\alpha \rangle \langle u_\alpha | \hat{A} | u_\beta \rangle \langle u_\beta | \psi \rangle \\ &= \int_{\mathcal{I}} d\alpha \int_{\mathcal{I}} d\beta b^*(\alpha) A_{\alpha\beta} f(\beta). \end{aligned} \quad (8.24)$$

Ponieważ współczynniki $b^*(\alpha) = \langle \varphi | u_\alpha \rangle$ tworzą wiersz, zaś $f(\beta) = \langle u_\beta | \psi \rangle$ kolumnę, więc widzimy ponownie, że uzyskane wyrażenia nadal są w pełni zgodne z technikami rachunku macierzowego.

8.3 Operatory rzutowe i rozkład spektralny obserwabli

Niech \mathcal{A} będzie pewną wielkością fizyczną, której odpowiada obserwabla \hat{A} , tj. operator hermitowski, którego wektory własne tworzą w przestrzeni \mathcal{H} bazę ortonormalną. Piszemy więc

$$\hat{A}|f_n^{(i)}\rangle = a_n|f_n^{(i)}\rangle, \quad i = 1, 2, 3, \dots, g_n. \quad (8.25)$$

Liczby $a_n \in \mathbb{R}$ są wartościami własnymi \hat{A} g_n -krotnie zdegenerowanymi, z czego zdaje sprawę indeks (i) . Stany własne $|f_n^{(i)}\rangle$ tworzą bazę więc spełniają relacje

$$\langle f_n^{(i)} | f_m^{(j)} \rangle = \delta_{nm} \delta_{ij}, \quad \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |f_n^{(i)}\rangle \langle f_n^{(i)}| = \hat{1}. \quad (8.26)$$

Dowolny wektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ można rozłożyć w bazie

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} C_n^{(i)} |f_n^{(i)}\rangle, \quad \text{gdzie} \quad C_n^{(i)} = \langle f_n^{(i)} | \psi \rangle. \quad (8.27)$$

Powyższe relacje są analogami formuł (8.2), (8.6) i (8.3). Dla ustalonego n stany $|f_n^{(i)}\rangle$ rozpinają podprzestrzeń \mathcal{H}_n – podprzestrzeń własne o wymiarze $\dim \mathcal{H}_n = g_n$, odpowiadające wartości własnej a_n . Możemy wówczas tworzyć kombinacje liniowe

$$|\psi_n\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} C_n^{(i)} |f_n^{(i)}\rangle \in \mathcal{H}_n, \quad (8.28)$$

i zamiast rozkładu (8.27) pisać

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle. \quad (8.29)$$

Co więcej, dowolny $|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}_n$ jest stanem własnym obserwabli \hat{A} , to jest

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = \hat{A} \sum_{i=1}^{g_n} C_n^{(i)} |f_n^{(i)}\rangle = a_n |\psi_n\rangle. \quad (8.30)$$

Dowód tej równości przeprowadza się zupełnie tak samo jak w przypadku równania (3.49).

8.3.1 Projektory jednowymiarowe

Operatory rzutowania na kierunek wyznaczony przez wektor $|f_n^{(i)}\rangle$

$$\mathbf{P}_n^{(i)} = |f_n^{(i)}\rangle \langle f_n^{(i)}|, \quad (8.31)$$

mają następujące własności.

- Są idempotentne (patrz (7.25)), tj.,

$$(\mathbf{P}_n^{(i)})^2 = \mathbf{P}_n^{(i)}. \quad (8.32)$$

- Oczywista (z definicji (8.31)) jest hermitowskość

$$(\mathbf{P}_n^{(i)})^\dagger = \mathbf{P}_n^{(i)}. \quad (8.33)$$

- Projekторы $\mathbf{P}_n^{(i)}$ są ortogonalne, w tym sensie, że

$$\mathbf{P}_n^{(i)} \mathbf{P}_m^{(j)} = \delta_{nm} \delta_{ij} \mathbf{P}_n^{(i)}. \quad (8.34)$$

Uzasadnienie tej relacji wynika z definicji i z (8.26)

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_n^{(i)} \mathbf{P}_m^{(j)} &= |f_n^{(i)}\rangle \langle f_n^{(i)}| |f_m^{(j)}\rangle \langle f_m^{(j)}| = \delta_{nm} \delta_{ij} |f_n^{(i)}\rangle \langle f_m^{(j)}| \\ &= \delta_{nm} \delta_{ij} |f_n^{(i)}\rangle \langle f_n^{(i)}| = \delta_{nm} \delta_{ij} \mathbf{P}_n^{(i)}. \end{aligned} \quad (8.35)$$

Obecność delt Kroneckera zapewnia zerowanie się prawej strony dla $n \neq m$ i $i \neq j$, poza deltami można jednak położyć $n = m$ i $i = j$, stąd druga linia powyższej formuły. Zauważmy dodatkowo, że z (8.35) wynika także idempotentność operatorów rzutowych.

- Stosując w rozkładzie jedyńki (8.26) oznaczenia (8.31) mamy

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \mathbf{P}_n^{(i)} = \hat{\mathbf{1}}. \quad (8.36)$$

8.3.2 Projekторы wielowymiarowe

Niech \mathbf{P}_n oznacza operator rzutowania na g_N -wymiarową podprzestrzeń \mathcal{H}_n . Zatem

$$\mathbf{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} \mathbf{P}_n^{(i)} \quad (8.37)$$

Własności takich projektorów są takie same.

- Idempotentność $(\mathbf{P}_n)^2 = \mathbf{P}_n$.
- Hermitowskość $\mathbf{P}_n^\dagger = \mathbf{P}_n$.
- Ortogonalność $\mathbf{P}_n \mathbf{P}_m = \delta_{nm} \mathbf{P}_n$.
- Zupełność $\sum_n \mathbf{P}_n = \hat{\mathbf{1}}$.

Dowody tych własności w elementarny sposób wynikają z własności projektorów jednowymiarowych $\mathbf{P}_n^{(i)}$ i faktu, że \mathbf{P}_n jest ich sumą.

8.3.3 Rozkład spektralny obserwabli

Wróćmy do dyskusji obserwabli \hat{A} . Oczywiście możemy napisać

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \hat{\mathbf{1}} \hat{A} \hat{\mathbf{1}} = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |f_n^{(i)}\rangle \langle f_n^{(i)}| \hat{A} \sum_m \sum_{j=1}^{g_m} |f_m^{(j)}\rangle \langle f_m^{(j)}| \\ &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \sum_m \sum_{j=1}^{g_m} |f_n^{(i)}\rangle \langle f_n^{(i)}| \hat{A} |f_m^{(j)}\rangle \langle f_m^{(j)}|. \end{aligned} \quad (8.38)$$

Stany $|f_m^{(j)}\rangle$ są wektorami własnymi obserwabli \hat{A} , więc z ich ortogonalności

$$\langle f_n^{(i)} | \hat{A} | f_m^{(j)} \rangle = a_m \langle f_n^{(i)} | f_m^{(j)} \rangle = a_m \delta_{nm} \delta_{ij}. \quad (8.39)$$

Wobec tego otrzymujemy

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \sum_m \sum_{j=1}^{g_m} |f_n^{(i)}\rangle a_m \delta_{nm} \delta_{ij} \langle f_m^{(j)}| = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} a_n |f_n^{(i)}\rangle \langle f_n^{(i)}| \\ &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} a_n \mathbf{P}_n^{(i)} = \sum_n a_n \mathbf{P}_n. \end{aligned} \quad (8.40)$$

Taki rozkład operatora \hat{A} na operatory rzutowe (w reprezentacji generowanej przez ten operator), z wagami danymi przez odpowiednie wartości własne nazywamy rozkładem spektralnym operatora \hat{A} . Z rozkładu spektralnego wynikają istotne wnioski.

- Zachodzą relacje komutacyjne

$$[\hat{A}, \mathbf{P}_n^{(i)}] = [\hat{A}, \mathbf{P}_n] = 0, \quad (8.41)$$

bowiem w rozkładzie spektralnym \hat{A} wszystkie inne projektory są ortogonalne do występujących w komutatorach, a te komutują same ze sobą.

- Dla dowolnego $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ stan $\mathbf{P}_n^{(i)}|\psi\rangle$ jest stanem własnym obserwabli \hat{A} odpowiadającym wartości własnej a_n . Istotnie, z rozkładu spektralnego mamy

$$\begin{aligned} \hat{A} \mathbf{P}_n^{(i)}|\psi\rangle &= \sum_k \sum_{j=1}^{g_k} a_k \mathbf{P}_k^{(j)} \mathbf{P}_n^{(i)}|\psi\rangle = \sum_k \sum_{j=1}^{g_k} a_k \delta_{kn} \delta_{ji} \mathbf{P}_n^{(i)}|\psi\rangle \\ &= a_n \mathbf{P}_n^{(i)}|\psi\rangle. \end{aligned} \quad (8.42)$$

- Analogicznie, $\mathbf{P}_n|\psi\rangle$ jest stanem własnym obserwabli \hat{A} z wartością własną a_n

$$\hat{A} \mathbf{P}_n|\psi\rangle = a_n \mathbf{P}_n|\psi\rangle. \quad (8.43)$$

Dowód przebiega identycznie jak w poprzednim punkcie.

Wartość oczekiwana wielkości fizycznej \mathcal{A} , której odpowiada operator \hat{A} dla układu fizycznego znajdującego się w stanie $|\psi\rangle$ wynosi

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} a_n \langle \psi | \mathbf{P}_n^{(i)} | \psi \rangle \\ &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} a_n \langle \psi | f_n^{(i)} \rangle \langle f_n^{(i)} | \psi \rangle = \sum_n a_n \sum_{i=1}^{g_n} |\langle f_n^{(i)} | \psi \rangle|^2, \end{aligned} \quad (8.44)$$

gdzie skorzystaliśmy z rozkładu spektralnego obserwabli \hat{A} . Sumę $\sum_{i=1}^{g_n} |\langle f_n^{(i)} | \psi \rangle|^2$, (zgodnie z postulatami mechaniki kwantowej) interpretujemy jako prawdopodobieństwo tego, że w wyniku pomiaru wielkości fizycznej \mathcal{A} otrzymamy wartość własną a_n . Wynik ten oczywiście odpowiada prawdopodobieństwu (3.64), a w przypadku bez degeneracji (gdy $i \equiv 1$) przechodzi w (3.57). Suma wszystkich prawdopodobieństw musi dawać jedynkę, więc musi być

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |\langle f_n^{(i)} | \psi \rangle|^2 = 1. \quad (8.45)$$

Warunek ten to nic innego niż żądanie unormowania stanu $|\psi\rangle$. Po raz kolejny widzimy więc, że normowanie wektora $|\psi\rangle$ jest rzeczywiście potrzebne.

8.4 Nowa terminologia

Podsumujemy wyżej wyprowadzone pojęcia i zależności pomiędzy nimi. Celem naszym jest nadanie opisanemu formalizmowi terminologii typowej dla mechaniki kwantowej.

8.4.1 Funkcje falowe w reprezentacji U

Niech $\{|u_\alpha\rangle\}$ będzie pewną bazą w przestrzeni Hilberta \mathcal{H} – przestrzeni stanów $|\psi\rangle$. Przyjmujemy, że $\alpha \in \mathcal{I}$ stanowią zbiór mocy continuum, a więc mamy tu całki i delty Diraca. Przejście do przypadku, w którym zbiór \mathcal{I} jest dyskretny nie powinno nastęrczać żadnych trudności, całki przejdą w sumy, a delty Diraca w delty Kroneckera. Wprowadzoną bazę nazwiemy reprezentacją U w danej przestrzeni. Oczywiście wektory bazy muszą spełniać warunki: ortonormalności (8.2) i zupełności (tzw. rozkład jedyńki w reprezentacji U) (8.6). Dowolny stan, wektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ możemy zapisać w bazie (reprezentacji U) w/g (8.3), przy czym współczynniki rozkładu są iloczynami skalarnymi $\langle u_\alpha | \psi \rangle$.

Omówimy teraz dokładnie terminologię, której już użyliśmy, i którą będziemy się posługiwać w dalszym ciągu wykładu.

Dowolny stan $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ można rozłożyć w bazie

$$|\psi\rangle = \int d\alpha |u_\alpha\rangle f(\alpha). \quad (8.46)$$

Liczbową funkcję $f(\alpha)$ parametru α nazwiemy

$$f(\alpha) = \langle u_\alpha | \psi \rangle - \text{funkcją falową stanu } |\psi\rangle \text{ w reprezentacji } U. \quad (8.47)$$

Funkcja falowa $f(\alpha)$ (w reprezentacji U) powinna być unormowana, to jest

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{I}} d\alpha |f(\alpha)|^2 &= \int_{\mathcal{I}} d\alpha \langle u_\alpha | \psi \rangle^* \langle u_\alpha | \psi \rangle \\ &= \int_{\mathcal{I}} d\alpha \langle \psi | u_\alpha \rangle \langle u_\alpha | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1, \end{aligned} \quad (8.48)$$

gdzie przedostatni krok wynika z zupełności wektorów bazy. Dzięki temu możemy utrzymać interpretację probabilistyczną $f(\alpha) = \langle u_\alpha | \psi \rangle$ jako amplitudy (gęstości – dla rozkładów ciągłych) prawdopodobieństwa tego, że układ fizyczny opisany stanem $|\psi\rangle$ w wyniku pomiaru zostanie w stanie $|u_\alpha\rangle$. Reprezentacja U jest dowolna, zatem żądanie unormowania funkcji falowej dotyczy każdej reprezentacji i zapewnia, że interpretacja probabilistyczna jest niezależna od wyboru reprezentacji. Wybór reprezentacji określa natomiast o jakim (czego) prawdopodobieństwie mówimy.

8.4.2 Operatory w reprezentacji U

Niech teraz $f(\alpha)$ i $\tilde{f}(\alpha)$ będą odpowiednio funkcjami falowymi stanów $|\psi\rangle$ i $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ w reprezentacji U , tak jak to mieliśmy w (8.15). Na mocy relacji (8.18) możemy powiązać $\tilde{f}(\alpha)$ – funkcję falową stanu $|\psi'\rangle$ w reprezentacji U , z odpowiednią funkcją falową $f(\alpha)$ stanu wyjściowego $|\psi\rangle$ reprezentacji U

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\alpha) &= \langle u_\alpha | \psi' \rangle = \langle u_\alpha | \hat{A} | \psi \rangle = \int d\beta \langle u_\alpha | \hat{A} | u_\beta \rangle f(\beta) \\ &= \int d\beta A_{\alpha\beta}^{(u)} f(\beta) \end{aligned} \quad (8.49)$$

gdzie $A_{\alpha\beta}^{(u)} = \langle u_\alpha | \hat{A} | u_\beta \rangle$ jest elementem macierzowym operatora \hat{A} w reprezentacji U , co tym razem jawnie zaznaczyliśmy za pomocą górnego indeksu. Jak już wspominaliśmy, prawą stronę relacji (8.49) odczytujemy jako iloczyn macierzy $A_{\alpha\beta}^{(u)}$ i wektora kolumnowego $f(\alpha)$ (por. (8.7)).

Zazwyczaj, gdy operator \hat{A} działa na dowolny stan $|\psi\rangle$ musimy posługiwać się zapisem takim jak w (8.49), tj. używać macierzy i ich elementów macierzowych. Na ogół trudno jest znaleźć taką postać operatora $\hat{A}^{(u)}(\alpha)$ (w reprezentacji U), aby móc napisać relację postaci $\hat{A}^{(u)}(\alpha)f(\alpha) = \tilde{f}(\alpha)$, to jest jedną formułę pozwalającą za pomocą niezbyt skomplikowanych operacji matematycznych obliczyć funkcję falową $\tilde{f}(\alpha)$ na podstawie znajomości funkcji falowej $f(\alpha)$. Innymi słowy, rzadko udaje się skonstruować operator $\hat{A}^{(u)}$ tak, aby mógł on działać bezpośrednio na funkcje falowe $f(\alpha)$ w danej reprezentacji. Czasami jednak taka "sztuczka" się udaje, Przykłady takich sytuacji omówimy w dalszych paragrafach.

Ponieważ nie jest łatwo znaleźć ogólne wyrażenia dla niezbędnych elementów macierzowych dlatego wygodnie jest przyjąć następującą konwencję notacyjną.

$$\hat{A}^{(u)} f(\alpha) = \hat{A}^{(u)} \langle u_\alpha | \psi \rangle \quad (8.50a)$$

$$\equiv \langle u_\alpha | \hat{A} | \psi \rangle \quad (8.50b)$$

$$\equiv \int d\beta \langle u_\alpha | \hat{A} | u_\beta \rangle f(\beta) \quad (8.50c)$$

gdzie $\hat{A}^{(u)}$ to tak zwany operator \hat{A} w reprezentacji U . Operator ten działa na funkcję falową $f(\alpha) = \langle u_\alpha | \psi \rangle$ (w tejże reprezentacji), w sensie określonym przez element macierzowy w drugiej linii. Trzecia linia definiuje sens elementu macierzowego.

Podkreślmy tutaj, że relacje (8.50) definiujące pojęcie operatora w reprezentacji U mają charakter dystrybucyjny (wyrażenia całkowe jak w (8.50c)), co nie ułatwia praktycznych obliczeń. W konkretnych sytuacjach tak staramy się wybrać reprezentacje (czyli bazy) w przestrzeni stanów, aby możliwie uprościć obliczenia. Przede wszystkim chodzi o efektywne obliczanie elementów macierzowych operatorów, a następnie całek (8.50c).

8.4.3 Uwagi dodatkowe

Niekiedy zdarza się, że w odpowiednio dobranej reprezentacji element macierzowy operatora można przedstawić w postaci

$$A_{\alpha\beta}^{(u)} = \delta(\alpha - \beta) \hat{A}^{(u)}(\beta) \quad (8.51)$$

gdzie $\hat{A}^{(u)}(\beta)$ jest wtedy operatorem \hat{A} w reprezentacji U działającym bezpośrednio na funkcje falowebrane w tejże reprezentacji. Dystrybucyjna (całkowa) relacja (8.49) daje wówczas

$$\tilde{f}(\alpha) = \int d\beta A_{\alpha\beta}^{(u)} f(\beta) = \int d\beta \delta(\alpha - \beta) \hat{A}^{(u)}(\beta) f(\beta) = \hat{A}^{(u)}(\alpha) f(\alpha), \quad (8.52)$$

W takiej sytuacji trudność, o której mówiliśmy przed wprowadzeniem konwencji notacyjnej (8.50) zostaje ominięta. Obliczenie $\tilde{f}(\alpha)$ na podstawie $f(\alpha)$ staje się możliwe, o ile tylko potrafimy skonstruować operator $\hat{A}^{(u)}(\alpha)$ w reprezentacji U .

Zwróćmy uwagę, że w operatorze $\hat{A}^{(u)}(\alpha)$ wyrażonym w reprezentacji U na ogół występuje zmienna – parametr α charakteryzujący wybraną reprezentację. Łącząc wyrażenie (8.51) z trzecim członem relacji (8.49) lub z (8.50c), możemy napisać

$$\begin{aligned} \langle u_\alpha | \hat{A} | \psi \rangle &= \int d\beta \delta(\alpha - \beta) \hat{A}^{(u)}(\beta) f(\beta) = \hat{A}^{(u)}(\alpha) f(\alpha) \\ &= \hat{A}^{(u)}(\alpha) \langle u_\alpha | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (8.53)$$

Tak więc, w pewnych wypadkach możliwe jest zapisanie działania operatora \hat{A} w wybranej reprezentacji w postaci zwartej, bez odwoływania się do zapisu dystrybucyjnego – całkowego, jak w ostatnim członie (8.49), lub w (8.50c). Jeśli więc potrafimy wyznaczyć operator $\hat{A}^{(u)}(\alpha)$ w reprezentacji U (w sensie relacji (8.51)), to możemy element macierzowy w (8.53) wyrazić poprzez bezpośrednie działanie $\hat{A}^{(u)}(\alpha)$ na funkcję falową stanu $|\psi\rangle$ w danej reprezentacji. Znalezienie jawnej postaci $\hat{A}^{(u)}(\alpha)$ – operatora \hat{A} w reprezentacji U często nie jest sprawą ani prostą, ani łatwą. Wymaga to najpierw obliczenia elementu macierzowego $A_{\alpha\beta} = \langle u_\alpha | \hat{A} | u_\beta \rangle$, a następnie dokonania odpowiednich manipulacji tak, aby otrzymać wzór typu (8.51).

* * * * *