

4 Operatory

4.1 Podstawowe własności i definicje

Operatory a obserwable.

Operatorem na przestrzeni wektorowej V nazywamy odwzorowanie ketu $|\psi\rangle$ w ket $|\varphi\rangle$:

$$\hat{Q}|\psi\rangle = |\varphi\rangle. \quad (4.1)$$

Podobnie jak funkcje, operatory określone są w pewnej *dziedzinie*. Dwa operatory są równe, gdy

$$\hat{Q}_1|\psi\rangle = \hat{Q}_2|\psi\rangle$$

dla wszystkich $|\psi\rangle$ należących do ich dziedzin. W mechanice kwantowej ograniczamy się do pewnej klasy operatorów, mianowicie do operatorów liniowych:

$$\hat{Q}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{Q}|\psi_1\rangle + c_2\hat{Q}|\psi_2\rangle,$$

gdzie $c_{1,2}$ są dowolnymi stałymi. Podobnie suma operatorów

$$(\hat{Q}_1 + \hat{Q}_2)|\psi\rangle = \hat{Q}_1|\psi\rangle + \hat{Q}_2|\psi\rangle.$$

Operator możemy pomnożyć przez liczbę

$$(c\hat{Q})|\psi\rangle = c(\hat{Q}|\psi\rangle).$$

Operatory możemy mnożyć

$$(\hat{Q}_1\hat{Q}_2)|\psi\rangle = \hat{Q}_1(\hat{Q}_2|\psi\rangle),$$

musimy jednak pamiętać, aby ket $|\varphi\rangle = \hat{Q}_2|\psi\rangle$ należał do dziedziny operatora \hat{Q}_1 . Na ogół mnożenie operatorów nie jest przemienne:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}.$$

Zdefiniujemy *komutator*

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Warto wymienić kilka użytecznych własności komutatorów:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= -[\hat{B}, \hat{A}], && \text{antysymetria,} \\ [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}], && \text{liniowość,} \\ [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}], && \text{„łączność”.} \end{aligned}$$

Na koniec podajmy bardzo tżsamość, tzw. *tożsamość Jaobiego*:

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] = 0. \quad (4.2)$$

4.2 Przedstawienie macierzowe, operatory hermitowskie

Łatwo przekonać się, że z wektorów bazowych w przestrzeni wektorowej V można zbudować operator jednostkowy

$$\hat{I} = \sum_i |i\rangle \langle i|. \quad (4.3)$$

Rzeczywiście

$$\hat{I} |\psi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i| \sum_j a_j |j\rangle = \sum_{i,j} a_j |i\rangle \langle i|j\rangle = \sum_j a_j |j\rangle.$$

Podobnie dla przypadku ciągłego mamy

$$\hat{I} = \int dx |x\rangle \langle x|. \quad (4.4)$$

W mechanice kwantowej szczególną rolę odgrywa operator energii zwany hamiltonianem

$$\hat{H} = \sum_i E_i |E_i\rangle \langle E_i|. \quad (4.5)$$

Policzmy wielkość

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_i E_i |\langle \psi | E_i \rangle|^2. \quad (4.6)$$

Ponieważ $\langle E_i | \psi \rangle = a_i$ jest amplitudą prawdopodobieństwa otrzymania w wyniku pomiaru energii układu w stanie $|\psi\rangle$ wartości E_i

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_i E_i p_i = \langle E \rangle. \quad (4.7)$$

Ten wynik łatwo uogólnić na dowolny operator \hat{Q} odpowiadający jakiejś obserwacji, którego spektrum oznaczymy przez $\{q_i\}$. Wówczas stany, dla których z prawdopodobieństwem 1 otrzymamy w wyniku pomiaru wartość q_i , oznaczamy jako $|q_i\rangle$ i operator ma postać

$$\hat{Q} = \sum_i q_i |q_i\rangle \langle q_i|. \quad (4.8)$$

Zauważmy, że

$$\hat{Q} |q_k\rangle = \sum_i q_i |q_i\rangle \langle q_i | q_k \rangle = q_k |q_k\rangle. \quad (4.9)$$

Jest to równanie własne, które pozwala znaleźć zarówno kety $|q_i\rangle$ jak i wartości własne q_i .

Rozważmy element macierzowy operatora \hat{Q} , który ma rzeczywiste wartości własne (wyniki pomiarów fizycznych są liczbami rzeczywistymi) między stanami

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |q_i\rangle, \quad |\varphi\rangle = \sum_j b_j |q_j\rangle \quad (4.10)$$

gdzie

$$\begin{aligned}\langle \varphi | \hat{Q} | \psi \rangle &= \sum_{ij} b_j^* a_i \langle q_j | \hat{Q} | q_i \rangle = \sum_i b_i^* a_i q_i, \\ \langle \psi | \hat{Q} | \varphi \rangle &= \sum_{ij} a_i^* b_j \langle q_i | \hat{Q} | q_j \rangle = \sum_i b_i a_i^* q_i.\end{aligned}\quad (4.11)$$

Z równania (4.11) wynika

$$\langle \varphi | \hat{Q} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{Q} | \varphi \rangle. \quad (4.12)$$

Operator o takiej własności nazywamy operatorem hermitowskim. Zdefiniujemy sprzężenie hermitowskie dowolnego operatora \hat{R} :

$$\langle \varphi | \hat{R}^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{R} | \varphi \rangle. \quad (4.13)$$

Z tego widać, że operatory hermitowskie są samosprężone.

Pokażemy teraz, że operatory hermitowskie posiadają rzeczywiste wartości własne i wektory własne, które tworzą ortogonalną bazę. Obliczmy

$$\langle q_k | \hat{Q} | q_i \rangle = q_i \langle q_k | q_i \rangle \quad \text{oraz} \quad \langle q_i | \hat{Q} | q_k \rangle = q_k \langle q_i | q_k \rangle. \quad (4.14)$$

Ze wzoru (2.38) mamy

$$\langle q_i | q_k \rangle = \langle q_k | q_i \rangle^*$$

a z hermitowskości (4.12)

$$\langle q_k | \hat{Q} | q_i \rangle - \langle q_i | \hat{Q} | q_k \rangle^* = 0 = (q_i - q_k^*) \langle q_k | q_i \rangle. \quad (4.15)$$

Jeżeli $i = k$ to musi być $q_i = q_i^*$ – wartości własne są rzeczywiste. Jeżeli $i \neq k$ to $\langle q_k | q_i \rangle = 0$.

Równanie (4.1)

$$|\varphi\rangle = \hat{R} |\psi\rangle = \sum_j a_j \hat{R} |j\rangle$$

dla dowolnego operatora \hat{R} w dowolnej bazie $|j\rangle$ pomnożmy z lewej strony przez bra $\langle j|$

$$\langle i | \varphi \rangle = \sum_j a_j \langle i | \hat{R} | j \rangle = \sum_j R_{ij} a_j. \quad (4.16)$$

Równanie to definiuje elementy macierzowe operatora \hat{R}

$$\langle i | \hat{R} | j \rangle = R_{ij}. \quad (4.17)$$

Wówczas, jeżeli

$$|\varphi\rangle = \sum_j b_j |j\rangle$$

to

$$b_i = \sum_j R_{ij} a_j. \quad (4.18)$$

Zatem operatorom odpowiadają macierze (skończenie lub nieskończenie wymiarowe). Łatwo wykazać, że

$$\hat{Q}\hat{R} \implies Q_{ij}R_{jk}.$$

Pamiętajmy

$$\left(\hat{Q}\hat{R}\right)^\dagger = \hat{R}^\dagger\hat{Q}^\dagger. \quad (4.19)$$

Podobnie dla transpozycji i odwrotności.

W zależności od wyboru bazy $|i\rangle$ mówimy o operatorze Q w *reprezentacji* $|i\rangle$. Do najczęściej używanych reprezentacji należą: reprezentacja energetyczna, położeniowa lub pędowa. Zauważmy, że w reprezentacji położeniowej „macierz” operatora ma ciągłe wskaźniki

$$\hat{Q} \implies \langle x | \hat{Q} | x' \rangle. \quad (4.20)$$

Funkcja od operatora. Mamy daną funkcję liczbową $f(x)$. Wówczas

$$f(\hat{Q}) = \sum_i f(q_i) |i\rangle \langle i|. \quad (4.21)$$

Jeżeli znamy rozwinięcie w szereg Taylora funkcji $f(x)$

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)} x^n, \\ f(\hat{Q}) &= \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)} \hat{Q}^n. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Ostatnie wyrażenie ma sens, bo operatory umiemy mnożyć. Można pokazać, że z (4.22) wynika (4.21).

Szczególną funkcją jest $1/x$:

$$\frac{1}{\hat{Q}} = \sum_i \frac{1}{q_i} |i\rangle \langle i|. \quad (4.23)$$

Pomnóżmy

$$\frac{1}{\hat{Q}}\hat{Q} = \sum_{i,j} \frac{q_j}{q_i} |i\rangle \underbrace{\langle i | j \rangle}_{\delta_{ij}} \langle j| = \sum_i |i\rangle \langle i| = \hat{I}. \quad (4.24)$$

Czyli

$$\frac{1}{\hat{Q}} = \hat{Q}^{-1}. \quad (4.25)$$

Wyliczmy

$$\left[\hat{A}, f(\hat{B})\right] = \sum_{n=1} \frac{1}{n!} f^{(n)} \left[\hat{A}, \hat{B}^n\right] \quad (4.26)$$

(człon z $n = 0$ znika). Jeżeli

$$\left[\left[\hat{A}, \hat{B} \right], \hat{B} \right] = 0 \quad (4.27)$$

np. $\left[\hat{A}, \hat{B} \right]$ jest liczbą, to

$$\left[\hat{A}, \hat{B}^n \right] = n \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \hat{B}^{n-1} \quad \text{dla } n > 1. \quad (4.28)$$

Wynika to ze wzoru

$$\left[\hat{A}, \hat{B}^n \right] = \left[\hat{A}, \hat{B} \hat{B}^{n-1} \right] = \hat{B} \left[\hat{A}, \hat{B}^{n-1} \right] + \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \hat{B}^{n-1}$$

Wtedy

$$\begin{aligned} \left[\hat{A}, f(\hat{B}) \right] &= \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \left(f^{(1)} + f^{(2)} \hat{B} + \dots + \frac{1}{(n-1)!} f^{(n)} \hat{B}^{n-1} \dots \right) \\ &= \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \frac{df}{d\hat{B}}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Pokażemy teraz, że jeśli

$$\left[\hat{A}, \hat{B} \right] = 0 \quad (4.30)$$

to operatory te mają wspólny układ stanów własnych.

$$\hat{A} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle, \quad \hat{B} |b_i\rangle = b_i |b_i\rangle. \quad (4.31)$$

Czyli

$$|b_i\rangle = \sum_n |a_n\rangle \alpha_{ni}. \quad (4.32)$$

Rozważmy

$$\begin{aligned} \hat{A} \hat{B} |b_i\rangle &= b_i \hat{A} \sum_n |a_n\rangle \alpha_{ni} = b_i \sum_n |a_n\rangle a_n \alpha_{ni} = b_i |\psi\rangle \\ \hat{B} \hat{A} |b_i\rangle &= \hat{B} \sum_n |a_n\rangle a_n \alpha_{ni} = \hat{B} |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Ponieważ $\hat{A} \hat{B} = \hat{B} \hat{A}$

$$\hat{B} |\psi\rangle = b_i |\psi\rangle \quad (4.34)$$

czyli

$$|\psi\rangle = c |b_i\rangle \implies \alpha_{ni} = c \delta_{ni}. \quad (4.35)$$

Zatem

$$|b_i\rangle = c |a_n\rangle. \quad (4.36)$$

Z warunku unormowania $c = 1$. Wartości własne komutujących operatorów mogą służyć do kompletnego numerowania stanów.