4 Operatory

4.1 Podstawowe własności i definicje

Operatory a obserwable.

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

$$\hat{Q}\,|\psi\rangle = |\varphi\rangle\,. \tag{4.1}$$

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:

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

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

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

Operator możemy pomnożyć przez liczbę

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

Operatory możemy mnożyć

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

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

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

Zdefiniujmy *komutator*

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

Warto wymienić kilka użytecznych własności komutatorów:

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

Na koniec podajmy bardzo tżsamo sć, tzw. *tożsamo sć Jaobiego*:

$$\left[\left[\hat{A},\hat{B}\right],\hat{C}\right] + \left[\left[\hat{B},\hat{C}\right],\hat{A}\right] + \left[\left[\hat{C},\hat{A}\right],\hat{B}\right] = 0. \tag{4.2}$$

4.2 Przedstawienie macierzowe, operatory hermitowskie

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

$$\hat{I} = \sum_i |i\rangle \langle i| . \tag{4.3}$$

Rzeczywiście

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

Podobnie dla przypadku ciągłego mamy

$$\hat{I} = \int dx\ |x\rangle \langle x| . \tag{4.4}$$

W mechanice kwantowej szczególną rolę odgrywa operator energii zwany hamiltonianem

$$\hat{H} = \sum_i E_i\, |E_i\rangle \langle E_i| . \tag{4.5}$$

Policzmy wielkość

$$\langle\psi|\, \hat{H}\, |\psi\rangle = \sum_i E_i\, |\langle\psi|\, E_i\rangle|^2 . \tag{4.6}$$

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

$$\langle\psi|\, \hat{H}\, |\psi\rangle = \sum_i E_i p_i = \langle E\rangle . \tag{4.7}$$

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

$$\hat{Q} = \sum_i q_i\, |q_i\rangle \langle q_i| . \tag{4.8}$$

Zauważmy, że

$$\hat{Q}\, |q_k\rangle = \sum_i q_i\, |q_i\rangle \langle q_i|\, q_k\rangle = q_k\, |q_k\rangle . \tag{4.9}$$

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

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i\, |q_i\rangle\, ,\ |\varphi\rangle = \sum_j b_j\, |q_j\rangle \tag{4.10}$$

gdzie

$$\langle\varphi|\,\hat{Q}\,|\psi\rangle = \sum_{ij} b_j^* a_i \,\langle q_j|\,\hat{Q}\,|q_i\rangle = \sum_i b_i^* a_i\, q_i,$$

$$\langle\psi|\,\hat{Q}\,|\varphi\rangle = \sum_{ij} a_i^*\, b_j\,\langle q_i|\,\hat{Q}\,|q_j\rangle = \sum_i b_i a_i^*\, q_i. \tag{4.11}$$

Z równania (4.11) wynika

$$\langle\varphi|\,\hat{Q}\,|\psi\rangle^* = \langle\psi|\,\hat{Q}\,|\varphi\rangle\,. \tag{4.12}$$

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

$$\langle\varphi|\,\hat{R}^\dagger\,|\psi\rangle^* = \langle\psi|\,\hat{R}\,|\varphi\rangle\,. \tag{4.13}$$

Z tego widać, że opertory hermitowskie są samosprzężone.

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

$$\langle q_k|\,\hat{Q}\,|q_i\rangle = q_i\,\langle q_k\,|q_i\rangle \;\text{ oraz }\; \langle q_i|\,\hat{Q}\,|q_k\rangle = q_k\,\langle q_i\,|q_k\rangle\,. \tag{4.14}$$

Ze wzoru (2.38) mamy

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

a z hermitowskości (4.12)

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

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 $|j\rangle$ pomnóżmy z lewej strony przez bra $\langle j|$

$$\langle i\,|\varphi\rangle = \sum_j a_j\,\langle i|\,\hat{R}\,|j\rangle = \sum_j R_{ij} a_j. \tag{4.16}$$

Równanie to definiuje elemnty macierzowe operatora $\hat{R}$

$$\langle i|\,\hat{R}\,|j\rangle = R_{ij}. \tag{4.17}$$

Wówczas, jeżeli

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

to

$$b_i = \sum_j R_{ij} a_j. \tag{4.18}$$

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

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

Pamiętajmy

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

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 wzkaźniki

$$\hat{Q} \implies \langle x| \hat{Q} |x'\rangle . \tag{4.20}$$

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

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

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

$$f(x) = \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)} x^n,$$

$$f(\hat{Q}) = \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)} \hat{Q}^n. \tag{4.22}$$

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

Szczególną funkcją jest $1/x$:

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

Pomnóżmy

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

Czyli

$$\frac{1}{\hat{Q}} = \hat{Q}^{-1}. \tag{4.25}$$

Wyliczmy

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

(człon z $n = 0$ znika). Jeżeli

$$\left[\left[\hat{A}, \hat{B}\right], \hat{B}\right] = 0 \tag{4.27}$$

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

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

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

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

Pokażemy teraz, że jeśli

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0 \tag{4.30}$$

to operatory te mają wspólny układ stanów własnych.

$$\hat{A} \left|a_i\right\rangle = a_i \left|a_i\right\rangle, \quad \hat{B} \left|b_i\right\rangle = b_i \left|b_i\right\rangle. \tag{4.31}$$

Czyli

$$\left|b_i\right\rangle = \sum_n \left|a_n\right\rangle \alpha_{ni}. \tag{4.32}$$

Rozważmy

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B} \left|b_i\right\rangle &= b_i \hat{A} \sum_n \left|a_n\right\rangle \alpha_{ni} = b_i \sum_n \left|a_n\right\rangle a_n \alpha_{ni} = b_i \left|\psi\right\rangle \\ \hat{B}\hat{A} \left|b_i\right\rangle &= \hat{B} \sum_n \left|a_n\right\rangle a_n \alpha_{ni} = \hat{B} \left|\psi\right\rangle. \end{aligned} \tag{4.33}$$

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

$$\hat{B} \left|\psi\right\rangle = b_i \left|\psi\right\rangle \tag{4.34}$$

czyli

$$\left|\psi\right\rangle = c \left|b_i\right\rangle \implies \alpha_{ni} = c\delta_{ni}. \tag{4.35}$$

Zatem

$$\left|b_i\right\rangle = c \left|a_n\right\rangle. \tag{4.36}$$

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