4. prednáška

Lineárna algebra IV – Diracov formalizmus lineárnej algebry, bra a ket vektory, diadycký súčin a skalárny súčin, spektrálny rozvoj operátora, funkcia operátora

Paul A. M. Dirac, anglický fyzik a jeden zo spoluzakladateľov kvantovej mechaniky, vo svojej známej knižke *The Principles of Quantum Mechanics* z r. 1930, položil základy moderného formalizmu kvantovej mechaniky, ktorý bol založený na teórii lineárnych priestorov a operátorov. Táto knižka, už viac ako polstoročie patrí medzi nestarnúce knihy, v ktorej jasným, jednoduchým a súčasne presným spôsobom sú formulované základné princípy kvantovej mechaniky.

4.1 Diracov formalizmus

Definícia 4.1.
Nech H je n-rozmerný unitárny lineárny priestor. Definujme dva nové typy vektorov:[1] ***ket vektor*** $|\alpha\rangle$ a ***bra vektor*** $\langle\alpha|$. Nech existuje vzájomne 1-1-značné priradenie

$$\left.\begin{array}{l} |\alpha\rangle \leftrightarrow \alpha \\ \langle\alpha| \leftrightarrow \alpha \end{array}\right\} \quad \forall \alpha \in H \tag{4.1}$$

Pre tieto dva nové typy vektorov základné algebraické operácie sú definované takto:

(1) **Násobenie vektora** komplexným číslom

$$a|\alpha\rangle = |a\alpha\rangle \quad \text{a} \quad a^*\langle\alpha| = \langle a\alpha| \tag{4.2}$$

kde vektory $|a\alpha\rangle$ a $\langle a\alpha|$ sú realizované pomocou (1.37).

(2) **Súčet vektorov**

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\alpha+\beta\rangle \quad \text{a} \quad \langle\alpha| + \langle\beta| = \langle\alpha+\beta| \tag{4.3}$$

kde vektory $|\alpha+\beta\rangle$ a $\langle\alpha+\beta|$ sú realizované pomocou priradenia (4.1).

(3) **Pôsobenie operátora**

$$A|\alpha\rangle = |A\alpha\rangle \quad \text{a} \quad \langle\alpha|A^+ = \langle A\alpha| \tag{4.4}$$

kde vektory $|A\alpha\rangle$ a $\langle A\alpha|$ sú realizované pomocou priradenia (4.1).

[1] Dirac zaviedol túto terminológiu tak, že rozdelil anglické slovo *bracket* - zátvorka, ľavá časť zátvorky je označená *bra* a pravá časť je označená *ket*. Dirac pri návrhu tejto terminológie prejavil aj určitú dávku vtipnosti, *bra* znamená po anglicky špeciálny typ podprsenky bez ramienok.

Pre názornosť poznamenajme, že bra- a ket vektory sú v rámci klasickej lineárnej algebry realizované pomocou riadkových resp. stlpcových vektorov.

Ket-vektory a bra-vektory tvoria množinu vektorov

$$H_K = \{|\alpha\rangle ; \alpha \in H\} \tag{4.5a}$$

$$H_B = \{\langle\alpha| ; \alpha \in V\} \tag{4.5b}$$

Jednoduchým spôsobom možno dokázať, že množiny vektorov H_K a H_B tvoria lineárne priestory nad polom komplexných čísel, pričom priestory H_K, H_B a H sú navzájom izomorfné (pozri príklad 4.1).

Veta 4.1. Binárna operácia medzi bra- a ket-vektormi $H_K \times H_B \to \mathcal{C}$, ktorá dvojici vektorov priradí skalár (komplexné číslo) z $\mathcal{C}$ podľa predpisu

$$\langle\alpha|\beta\rangle = (\alpha,\beta) \tag{4.6}$$

je skalárny súčin, t. j. platia podmienky (1-4) z definície 2.1.

V príklade 4.2 je dokázané, že takto definovaná binárna operácia $\langle\alpha|\beta\rangle$ je skalárny súčin.

Maticový element operátora A medzi bra- a ket-vektormi je definovaný vzťahom

$$\langle\alpha|A|\beta\rangle = (\alpha, A\beta) \tag{4.7}$$

Substitúciou $A \to A^+$ a použitím základných vlastností skalárneho súčinu $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ dostaneme dôležitý výraz pre maticový element hermitovsky združeného operátora

$$\langle\alpha|A^+|\beta\rangle = (\alpha, A^+\beta) = (A\alpha,\beta) = (\beta, A\alpha)^* = \langle\beta|A|\alpha\rangle^* \tag{4.8}$$

Operátor A je lineárnym operátorom v priestoroch H_K a H_B

$$\begin{aligned} A(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) &= A|\alpha+\beta\rangle = |A(\alpha+\beta)\rangle \\ &= |A\alpha + A\beta\rangle = |A\alpha\rangle + |A\beta\rangle = A|\alpha\rangle + A|\beta\rangle \end{aligned} \tag{4.9}$$

Definícia 4.2. Medzi bra- a ket-vektormi sa postulujú tieto jednoduché vzťahy

$$(A|\alpha\rangle)^+ = \langle\alpha|A^+ \tag{4.10a}$$

$$(|\alpha\rangle)^+ = \langle\alpha| \tag{4.10b}$$

Pri operácii hermitovského združenia môžeme bra- a ket-vektory chápať ako operátory.

Definujme operátor $\Omega_{\varphi\psi}$ pomocou maticových elementov

$$\langle\alpha|\Omega_{\varphi\psi}|\beta\rangle = \langle\alpha|\varphi\rangle\langle\psi|\beta\rangle \qquad \forall\alpha \in H_B, \forall\beta \in H_K \tag{4.11}$$

Použitím (8) dostaneme

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\Omega^+_{\varphi\psi}|\beta\rangle &= \langle\beta|\Omega_{\varphi\psi}|\alpha\rangle^* = \langle\beta|\varphi\rangle^*\langle\psi|\alpha\rangle^* = \\ &= \langle\alpha|\psi\rangle\langle\varphi|\beta\rangle \end{aligned} \tag{4.12}$$

Tieto dve vlastnosti operátora $\Omega_{\varphi\psi}$ môžeme formálne vyjadriť pomocou tzv. ***dyadického súčinu***

$$\Omega_{\varphi\psi} = |\varphi\rangle\langle\psi| \quad \text{a} \quad \Omega^+_{\varphi\psi} = |\psi\rangle\langle\varphi| \tag{4.13}$$

Aplikáciou dyadického súčinu na ket-vektor dostaneme ket-vektor (to znamená, že dyadický produkt svojim pôsobením na vektory je ekvivalentný operátoru)

$$\Omega_{\varphi\psi}|\alpha\rangle = |\varphi\rangle\langle\psi|\alpha \quad \text{a} \quad \langle\alpha|\Omega_{\psi\varphi} = \langle\alpha|\psi\rangle\langle\varphi| \tag{4.14}$$

Pomocou diadyckého súčinu definujme operátor

$$P = |\tau\rangle\langle\tau| \tag{4.15}$$

kde $|\tau\rangle$ je normalizovaný ket-vektor, $\langle\tau|\tau\rangle = 1$. Operátor P vyhovuje nutnej a postačujúcej podmienke projekčného operátora

$$P^2 = P \tag{4.16a}$$

$$P^+ = P \tag{4.16b}$$

Veta 4.2. Operátor P je projektorom na podpriestor indukovaný vektorom $|\tau\rangle$, $H_\tau = span\{|\tau\rangle\}$. Podobne, operátor 1-$P$ je projektor na ortogonálny doplnok $H_\tau^\perp$.

Definujme v n-rozmernom unitárnom priestore V ortonormálny systém vektorov

$$\mathcal{B} = \{|\varepsilon_1\rangle, |\varepsilon_2\rangle, \dots, |\varepsilon_n\rangle\} \tag{4.17}$$

kde

$$\langle\varepsilon_i|\varepsilon_j\rangle = \delta_{ij} \tag{4.18}$$

Postulát ***úplnosti*** systému (4.17) znamená, že ľubovolný vektor $|\varepsilon\rangle \in V$ môžeme vyjadriť ako lineárnu kombináciu jeho vektorov

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |\varepsilon_i\rangle \tag{4.19a}$$

$$a_i = \langle\varepsilon_i|\psi\rangle \tag{4.19b}$$

Použitím jazyka klasickej lineárnej algebry predpoklad úplnosti ortonormálneho systému (4.17) znamená, že počet prvkov tohto systému je totožný s dimenziou unitárneho priestoru V, alebo ináč, systém (4.17) tvorí bázu priestoru V.

Definujme projektory

$$P_i = |\varepsilon_i\rangle\langle\varepsilon_i| \qquad (\text{pre } i = 1,2,3,\dots) \tag{4.20a}$$

ktoré vyhovujú vzťahom

$$P_i^+ = P_i \tag{4.20b}$$

$$P_i P_j = \delta_{ij} P_i \tag{4.20c}$$

Veta 4.3. Podmienka úplnosti systému $\mathcal{B}$ (4.17) je ekvivalentná formule

$$\sum_i P_i = 1 \tag{4.21}$$

kde ´1´ je jednotkový operátor v priestore V_K.

Aplikovaním (21) na ľubovolný ket-vektor dostaneme podmienku úplnosti (19)

$$1|\psi\rangle = \sum_i P_i|\psi\rangle = \sum_i |\varepsilon_i\rangle\langle\varepsilon_i|\psi\rangle = \sum_i a_i|\varepsilon_i\rangle \tag{4.22}$$

Definujme operátor

$$P_o = \sum_{i\in M_o} P_i \tag{4.23}$$

kde množina M_o obsahuje d indexov, $M_o = \{i_1, i_2, \dots, i_d\}$. Takto definovaný operátor P_o je projektorom na podpriestor H_0 generovaný vektormi $\{|\varepsilon_i\rangle; i \in M_o\}$, $H_0 = span\{|\varepsilon_i\rangle; i \in M_o\}$.

Stopa operátora A v báze (4.17) je definovaná ako suma diagonálnych maticových elementov (pozri (2.16))

$$Tr(A)=\sum_i\langle\varepsilon_i|A|\varepsilon_i\rangle \tag{4.24}$$

Stopa operátora je invariantná vzhľadom k výberu systému vektorov (17), má nasledujúcu hodnotu

$$\begin{aligned}Tr(P_o)&=\sum_i\langle\varepsilon_i|P_o|\varepsilon_i\rangle=\sum_i\langle\varepsilon_i|\left(\sum_{j\in M_o}|\varepsilon_j\rangle\langle\varepsilon_j|\right)|\varepsilon_i\rangle=\\&=\sum_i\sum_{j\in M_o}\langle\varepsilon_i|\varepsilon_j\rangle\langle\varepsilon_j|\varepsilon_i\rangle=\sum_i\sum_{j\in M_o}\delta_{ij}\delta_{ij}=d\end{aligned} \tag{4.25}$$

Veta 4.4. Stopa projekčného operátora sa rovná dimenzii podpriestoru, vzhľadom ku ktorému je projekčný operátor definovaný

$$dim(V_o)=Tr(P_o) \tag{4.26}$$

Nech A je hermitovský operátor, $A^+=A$, vlastný problém tohto operátora má tvar

$$A|\varepsilon_{i,a}\rangle=\lambda_i|\varepsilon_{i,a}\rangle \qquad (a=1,2,...,d_i) \tag{4.27}$$

kde λ_i je i-tá vlastná hodnota a index $\alpha=1,2,\dots,d_i$ popisuje multiplicitu (degenerovanosť) charakteristickej hodnoty λ_i. Vlastné z (27) sú vybrané tak, že tvoria ortonormálny systém

$$\langle\alpha_{i,a}|\alpha_{j,b}\rangle=\delta_{ij}\delta_{ab} \tag{4.28}$$

Projekčný operátor na podpriestor indukovaný vlastnými vektormi s vlastnou hodnotou λ_i má tvar

$$P_i=\sum_{a=1}^{d_i}|\varepsilon_{i,a}\rangle\langle\varepsilon_{i,a}| \tag{4.29}$$

pričom $Tr(P_i)=d_i$, t.j. dimenzia podpriestoru definovaného projektorom P_i sa rovná multiplicite vlastnej hodnoty λ_i. Projektor P_i sa nazýva ***vlastný projektor*** priradený *i*-tej vlastnej hodnote λ_i.

Pomocou projektorov (4.29) vlastný problém (4.27) môže byť prepísaný do tvaru

$$AP_i=P_iA=\lambda_iP_i \tag{4.30}$$

ktorý sa nazýva operátorový vlastný problém.

Predpokladajme, že systém vlastných vektorov $\{|\varepsilon_{i,a}\rangle\}$ operátora A tvorí úplný systém, potom (pozri vetu 4.3)

$$\sum_i P_i=1 \tag{4.31}$$

$$A=A1=A\sum_i P_i=\sum_i AP_i=\sum_i\lambda_iP_i \tag{4.32}$$

Definícia 4.3. ***Spektrálny rozvoj*** hermitovského operátora A má tvar

$$A=\sum_i\lambda_iP_i \tag{4.33a}$$

alebo v zovšeobecnenom tvare

$$f(A)=\sum_i f(\lambda_i)P_i \tag{4.33b}$$

pričom sa predpokladá, že funkcia $f(z)$ je definovaná pre každú vlastnú hodnotu operátora A.

Predpokladajme, že funkcia $f(z)$ je analytická funkcia na nejakej oblasti, potom na tejto oblasti komplexných čísel môže sa vyjadriť pomocou rozvoja

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \tag{4.34}$$

Alternatívna formula pre funkciu operátora $f(A)$ má tvar

$$f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n \tag{4.35}$$

kde rozvojové koeficienty c_n sú rovnaké ako v (4.34). Ukážeme za akých podmienok môže byť funkcia $f(A)$ definovaná (4.34) ekvivalentná s definíciou (4.33). Pre mocniny operátora A^n zo spektrálneho rozvoja (4.32) dostaneme

$$A^n = \sum_i \lambda_i^n P_i \tag{4.36}$$

Dosadením tohoto vzťahu do (35) dostaneme

$$f(A) = \sum \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n \lambda^n \right) P_i \tag{1.37}$$

Tento výraz je totožný s (33) za predpokladu, že všetky charakteristické hodnoty operátora A ležia v oblasti analytičnosti funkcie $f(z)$.Táto skutočnosť má význam vtedy, ak rozvíjame funkciu operátora do mocninného radu. Tak napríklad, študujme funkciu operátora

$$f(A) = (1-A)^{-1} \tag{4.38}$$

ktorá zodpovedá funkcii $f(z)=(1-z)^{-1}$. Táto funkcia je analytická len pre $|z|<1$, potom

$$f(A) = (1-A)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} A^n \tag{4.39}$$

platí len vtedy, ak vlastné hodnoty operátora A ležia vo vnútri jednotkovej kružnici, $|\lambda_i|<1$.

Operátorový rozvoj exponenciály

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n \tag{4.40}$$

platí pre každý operátor, pretože funkcia $f(z)=e^z$ je analytická pre každé z.

Pomocou spektrálneho rozvoja (4.33b) môžeme pomocou hernitovského operátora H zostrojiť unitárny operátor U takto

$$U = e^{iH} = \sum_{k=1}^{n} e^{i\lambda_k} P_k \tag{4.41}$$

Z tejto formule bezprostredne vyplýva veta 3.4 pre unitárny operátor, t. j. vlastné hodnoty ležia na jednotkovej kružnici a vlastné vektory sú navzájom ortonormálne.

Veta 4.5. Pre každý unitárny operátor U existuje taký hermitovský operátor H, že $U = e^{iH}$.

Dôkaz vety 4.5 je vykonaný v príklade 4.3.

Príklady

Príklad 4.1. Dokážte, že množiny H_B a H_K (4.5a-b) sú lineárne priestory, pričom trojica H, H_B a H_K tvorí navzájom izomorfné priestory.

Príklad 4.2. Dokážte, že binárna operácia $\langle \alpha | \beta \rangle$ vyhovuje podmienkam skalárneho súčinu (1-4) z definície 2.1.

Príklad 4.3. Dokážte vetu 4.5.