3.предавање
Репрезентације у простору стања

1. Дефиниција репрезентације

Према аналогији са класичним векторима из тродимензионог векторског простора, који се могу изразити помоћу базисних вектора $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$, било који кет $|\psi\rangle$ из Хилбертовог простора желимо изразити помоћу комплетног скупа (међусобно) ортонормираних кетова базе. Вектори стања се тада могу репрезентовати помоћу њихових координата у тој бази.

Пример. Вектор $\vec{A} = a\vec{i} + b\vec{j} + c\vec{k}$ се у бази $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ може представити помоћу координата (a,b,c). Слично, кет вектор $|\psi\rangle$ се у некој бази $\{|u_n\rangle\}$, $|\psi\rangle = c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle + \ldots$, може представити коефицијентима развоја по тој бази $(c_1, c_2, \ldots, c_n, \ldots)$.

Под репрезентацијом (представљањем) подразумева се пресликавање апстрактног простора на простор бројева.

Веза између апстрактног простора и бројних репрезената гради се увођењем одређене базе.

Избор репрезентације значи избор неке ортонормиране базе, дисретне или континуалне, у простору стања ε.

Тада се вектори стања и оператори репрезентују матрицама чији елементи зависе од избора базе; **стога кажемо да је репрезентација условљена (или остварена) избором базе**.

Избор репрезентације је произвољан и зависи од разматраног проблема: бира се репрезентација која води најједноставнијим израчунавањима. Репрезентујући стања и операторе матрицама, векторска алгебра уступа место матричној.

2. Репрезентације у дискретној бази

Релације ортонормираности и затварања (комплетности)

Скуп дискретних кетова $\{|u_n\rangle\}$ је ортонормиран ако кетови задовољавају релацију ортонормираности: $\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}$.

Дискретан скуп $\{|u_n\rangle\}$ чини базу ако сваки кет $|\psi\rangle$ који припада ε има јединствен развој по $|u_n\rangle$: $|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle$.

Претпоставимо да је база ортонормирана. Тада важи: $\langle u_k | \psi \rangle = c_k$. Ако заменимо скаларни производ уместо коефицијента c_n у развоју кета $|\psi\rangle$, добијамо:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle = \sum_n \langle u_n|\psi\rangle |u_n\rangle = \sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle = \left(\sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\right)|\psi\rangle,$$

Будући да је $\left|\psi\right\rangle$ произвољан, следи:

$$P_{\{u_n\}} = \sum_n \left|u_n\right\rangle\left\langle u_n\right| = \hat{I}$$

где $\hat{I}$ представља оператор идентичности у простору ε.
Ова релација се зове **релација затварања (*closure relation*, енгл.).** (други назив је „разлагање јединице"). И обрнуто, она изражава чињеницу да скуп $\{\left|u_n\right\rangle\}$ чини базу. Заиста, за сваки кет $\left|\psi\right\rangle$ из ε се може написати:

$$\left|\psi\right\rangle = \hat{I}\left|\psi\right\rangle = \left(\sum_n \left|u_n\right\rangle\left\langle u_n\right|\right)\left|\psi\right\rangle = \sum_n \left|u_n\right\rangle\left\langle u_n \middle|\psi\right\rangle = \sum_n c_n\left|u_n\right\rangle.$$

Матрична репрезентација кетова, браова и оператора

Размотримо дискретну, комплетну и ортонормирану базу која се састоји, у општем случају, од бесконачног скупа кетова $\left|u_1\right\rangle,\left|u_2\right\rangle,\ldots,\left|u_n\right\rangle\ldots$, и означимо је са $\{\left|u_n\right\rangle\}$. (Дискретност подразумева да је бесконачна база пребројива, тј. да се кетови базе могу нанизати.)

Услов ортонормираности кетова базе се изражава са $\left\langle u_n\middle|u_m\right\rangle = \delta_{nm}$, где је δ_{nm} Кронекерова делта функција.

Вектор $\left|\psi\right\rangle$ се у наведеној бази може представити са:

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\left|u_n\right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\left\langle u_n\middle|\psi\right\rangle\left|u_n\right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\left|u_n\right\rangle\left\langle u_n\middle|\psi\right\rangle = \left\{\sum_{n=1}^{\infty}\left|u_n\right\rangle\left\langle u_n\right|\right\}\left|\psi\right\rangle$$

при чему коефицијенти развоја, тзв. Фуријеови коефицијенти, $c_n = \left\langle u_n\middle|\psi\right\rangle$, представљају пројекцију $\left|\psi\right\rangle$ на орт $\left|u_n\right\rangle$ (у општем случају су комплексни бројеви).

Према томе, за дату базу $\{\left|u_n\right\rangle\}$, кет $\left|\psi\right\rangle$ се може репрезентовати скупом коефицијената $c_1, c_2, \ldots$ дуж ортова $\left|u_1\right\rangle,\left|u_2\right\rangle,\ldots$, редом. Отуда се **кет** $\left|\psi\right\rangle$ може представити матрицом колоном:

$$\left|\psi\right\rangle \to \begin{pmatrix} \left\langle u_1\middle|\psi\right\rangle \\ \left\langle u_2\middle|\psi\right\rangle \\ \vdots \\ \left\langle u_n\middle|\psi\right\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Према томе, матрице типа $n\times 1$ из простора бројних колона $\mathbb{F}^{n1}$ репрезентују векторе стања.
Бра се представља матрицом врстом:

$$\left\langle\psi\right| \to \left(\left\langle u_1\middle|\psi\right\rangle^* \quad \left\langle u_2\middle|\psi\right\rangle^* \quad \cdots \quad \left\langle u_n\middle|\psi\right\rangle^* \quad \cdots\right) = \left(c_1^* \quad c_2^* \quad \cdots \quad c_n^* \quad \cdots\right).$$

Матрица бра вектора се добија из матрице кет вектора када се транспонује и комплексно конјугује, другим речима ове матрице су међусобно ермитски конјуговане.

Користећи наведену репрезентацију, видимо да је *бра-кет* $\langle\psi|\varphi\rangle$ комплексни број једнак матричном производу матрице врсте (која представља бра) и матрице колоне (која представља кет):

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & \cdots & c_n^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_n c_n^* b_n$$

Оператори.

За сваки оператор $\hat{A}$ можемо писати:

$$\hat{A} = \hat{I}\hat{A}\hat{I} = \left(\sum_{n=1}^{\infty} |u_n\rangle\langle u_n|\right)\hat{A}\left(\sum_{m=1}^{\infty} |u_m\rangle\langle u_m|\right) = \sum_{nm} |u_n\rangle\langle u_n|\hat{A}|u_m\rangle\langle u_m| = \sum_{nm} A_{nm} |u_n\rangle\langle u_m|$$

(распишите овај израз за неку коначну базу.)

Коефицијенти развоја $\hat{A}$ по операторима $|u_n\rangle\langle u_m|$, у ознаци A_{nm}, могу се представити као елементи квадратне матрице која репрезентује оператор $\hat{A}$.

Матрични елемент оператора $\hat{A}$ је:

$$A_{nm} = \langle u_n|\hat{A}|u_m\rangle$$

Оператор $\hat{A}$ у бази $\{|u_n\rangle\}$ се репрезентује квадратном матрицом:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

На пример, јединични оператор је представљен јединичном матрицом $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$.

Да сумирамо, кетови се представљају матрицом колоном, браови матрицом врстом, а оператори квадратним матрицама.

Матрични елемент ермитски конјугованог (или **адјунгованог**) оператора, према дефиницији матричног елемента оператора, једнак је

$$(\hat{A}^\dagger)_{nm} = \langle u_n|\hat{A}^\dagger|u_m\rangle = \langle u_m|\hat{A}|u_n\rangle^* = A_{mn}^*.$$

Према томе, за адјунговану матрицу која репрезентује адјунгован оператор важи $\boxed{A^\dagger = (A^T)^*}$, тј. адјунгована матрица се добија тако што се матрица оператора $\hat{A}$ транспонује, па затим комплексно конјугује:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^{+} = \begin{pmatrix} A_{11}^{*} & A_{21}^{*} & A_{31}^{*} & \cdots \\ A_{12}^{*} & A_{22}^{*} & A_{32}^{*} & \cdots \\ A_{13}^{*} & A_{23}^{*} & A_{33}^{*} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Ако је оператор $\hat{A}$ **ермитски**, његова матрица задовољава услов $(A^T)^* = A$, или $A_{mn}^{\ *} = A_{nm}$. Таква квадратна матрица се зове **ермитска матрица**; то је матрица у којој су било која два елемента, која су симетрична у односу на главну дијагоналу, међусобно комплексни конјугати. Према томе, дијагонални елементи ермитске матрице су увек реални бројеви.

Инверзни оператори се репрезентују инверзном матрицом.

Унитарни оператор се репрезентује унитарном матрицом. Матрица U је унитарна ако је инверзна једнака адјунгованој (као и за операторе): $U^{-1} = U^{+}$ или $UU^{+} = U^{+}U = I$.

Матрична репрезентација $|\psi\rangle\langle\psi|$ се добија производом матрице колоне и матрице врсте при чему се добија квадратна матрица. Видимо да је $|\psi\rangle\langle\psi|$ заиста оператор; производ кета и бра се некад зове *спољашњи производ* (за разлику од скаларног производа који се још зове *унутрашњи производ*).

Траг оператора, у ознаци $Tr(\hat{A})$, у ортонормираној бази $\{|u_n\rangle\}$, дефинисан је са $Tr(\hat{A}) = \sum_n \langle u_n|\hat{A}|u_n\rangle = \sum_n A_{nn}$, дакле представља суму дијагоналних елемената матрице.

Траг оператора не зависи од избора базе. Може се показати и да $Tr(\hat{A}\hat{B}) = Tr(\hat{B}\hat{A})$. Примери на вежбама.

Матрична репрезентација $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$:

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{I}\hat{A}\hat{I}|\psi\rangle = \langle\varphi|\left(\sum_{n=1}^{\infty}|u_n\rangle\langle u_n|\right)\hat{A}\left(\sum_{m=1}^{\infty}|u_m\rangle\langle u_m|\right)|\psi\rangle = \sum_{nm} b_n^{\ *} A_{nm} c_m$$

Добија се комплексни (или реални) број.

Сада се одмах види да су производи типа $|\psi\rangle|\phi\rangle$, $\langle\psi|\langle\phi|$, $\hat{A}\langle\psi|$ или $|\psi\rangle\hat{A}$ недефинисани (за кетове из истог простора). Они се не могу матрично репрезентовати јер се такве матрице не могу множити (матрице се могу множити када је број колона прве једнак броју врста друге матрице).

Сумирајмо називе матрица:
Матрица је:
реална ако $A = A^*$ или $A_{mn} = A_{mn}^{\ *}$
имагинарна ако $A = -A^*$ или $A_{mn} = -A_{mn}^{\ *}$
симетрична ако $A = A^T$ или $A_{mn} = A_{nm}$

антисиметрична ако $A=-A^T$ или $A_{mn}=-A_{nm}$ са $A_{mm}=0$

ермитска ако $A=A^+$ или $A_{mn}=A_{nm}{}^*$ (реална ермитска је симетрична матрица)

анти-ермитска ако $A=-A^+$ или $A_{mn}=-A_{nm}{}^*$

ортогонална ако $A^T=A^{-1}$ или $AA^T=I$ или $(AA^T)_{mn}=\delta_{mn}$

унитарна ако $A^+=A^{-1}$ или $AA^+=I$ ии $(AA^+)_{mn}=\delta_{mn}$ (реална унитарна је ортогонална).

Матрична репрезентација проблема својствених вредности

Решити проблем својствених вредности значи одредити својствене вредности a и својствене векторе $|\psi\rangle$ оператора $\hat{A}$ тако да важи:

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

где је a у општем случају комплексни број. Ако убацимо јединични оператор између $\hat{A}$ и $|\psi\rangle$ и напишемо га у облику релације комплетности, формула се може написати као

$$\hat{A}\left(\sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\right)|\psi\rangle = a|\psi\rangle .$$

Када помножимо затим обе стране једнакости са леве стране са браом $\langle u_m|$ добија се

$$\langle u_m|\hat{A}\left(\sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\right)|\psi\rangle = a\langle u_m|\psi\rangle .$$

Заменимо $\langle u_m|\psi\rangle$ са $\sum_n \langle u_n|\psi\rangle\delta_{mn}$. Тада се коначно добија једнакост

$$\sum_n A_{mn}\langle u_n|\psi\rangle = a\sum_n \langle u_n|\psi\rangle\delta_{mn} .$$

Она се још може написати у облику:

$$\sum_n [A_{mn}-a\delta_{mn}]\langle u_n|\psi\rangle = 0$$

Ова једнакост представља у општем случају бесконачан, хомоген систем једначина за коефицијенте $\langle u_n|\psi\rangle$, при чему број једначина зависи од броја базисних кетова. Систем једначина има нетривијална решења $\langle u_n|\psi\rangle \neq 0$ само ако је детерминанта коефицијената уз $\langle u_n|\psi\rangle$ једнака нули:

$$\det\left(A_{mn}-a\delta_{mn}\right)=0$$

Проблем који се може јавити јесте да је у случају пребројиво бесконачне базе детерминанта бесконачна. Тада се избаце чланови базе тако да она садржи само N чланова, где N мора бити довољно велико. Тада се решава детерминанта N тог степена:

$$\begin{vmatrix} A_{11}-a & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22}-a & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN}-a \end{vmatrix} = 0 .$$

Ова једначина је позната као *карактеристична* (или секуларна) *једначина*. Њеним решавањем се добија N својствених вредности $a_1, a_2, ..., a_N$, јер је са леве стране једначине полином N тог степена по a (неке од тих вредности a могу бити исте).
Скуп ових N својствених вредности се зове **спектар оператора** $\hat{A}$ **.**

Познајући скуп својствених вредности $a_1, a_2, ..., a_N$, можемо одредити одговарајући скуп својствених вектора $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, ..., |\psi_N\rangle$: убацујући једну по једну својствену вредност a_m од $\hat{A}$ у систем једначина добијамо сваки пут N компоненти $\langle u_1|\psi\rangle, \langle u_2|\psi\rangle, ..., \langle u_N|\psi\rangle$ одговарајућег својственог вектора $|\psi_m\rangle$.

Када је a_m једнострук корен карактеристичне једначине, тада јој кореспондира само један својствени вектор (до на константан фактор) и својствена вредност је недегенерисана.

Међутим, када је a_m вишеструки корен, може се радити о дегенерацији својствене вредности. (Разни примери се раде на вежбама).
Када је оператор **ермитски**, може се показати да је степен дегенерације неке својствене вредности увек једнак мултиплетности одговарајућег корена у карактеристичној једначини. Код њих, дакле, да бисмо знали димензије потпростора треба само да знамо мултиплетност сваког корена у карактеристичној једначини.
Према томе, у простору коначне димензије N, ермитски оператор увек има N линеарно независних својствених вектора (они се могу бирати да буду ортонормирани) и овај оператор се може дијагонализовати.

Сад смо дошли до једног од кључних резултата. У случају када је *скуп својствених вектора* $\{|\psi_n\rangle\}$ од $\hat{A}$ комплетан и ортонормиран, овај скуп се може користити као *база простора*. Шта мислите како у овој *својственој бази* изгледа матрица оператора $\hat{A}$? У овој бази матрица која представља оператор A је дијагонална:

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & a_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

што се лако може извести из дефиниције матричних елемената оператора у својственој бази:

$$A_{ij} = \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle = \langle \psi_i | a_j | \psi_j \rangle = a_j \delta_{ij} .$$

Својствене вредности ермитске матрице су реалне, а својствени вектори образују ортонормирану базу.