TILLEGG 10

10 Mer generell formulering av kvantemekanikk

Hittil i dette kurset har vi arbeidet mest med posisjons-rom-formuleringen av den kvantemekaniske teorien, og litt med den ekvivalente formuleringen i impulsrommet. I dette Tillegget skal vi se at disse formuleringene er spesialtilfeller av en mer generell teori.

Poenget med denne mer generelle formuleringen er for det første at den er mer elegant og byr på endel tekniske fordeler (etter at en er blitt fortrolig med den). Det viktigste er imidlertid at den tillater oss å behandle systemer som ikke kan beskrives bølgemekanisk, dvs. ved hjelp av bølgefunksjoner i x- eller p-rommet. Et sentralt eksempel er spinn-frihetsgrader.

[Bakgrunnsstoff finner du i Hemmers kapittel 6, kapittel 3 i Griffiths, og kapittel 5 i B&J. En annen referanse er J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, kapittel 1.]

10.1 Vektorer i Hilbert-rommet

10.1.a Rekapitulering

La oss begynne med å rekapitulere noen av de sentrale trekkene ved den teorien som er presentert hittil:

Tilstanden til en partikkel ved et bestemt tidspunkt kan beskrives ved hjelp av en romlig bølgefunksjon $\psi(x)$, dersom vi betrakter et endimensjonalt tilfelle. Verdien av ψ i punktet x gir sannsynlighetsamplituden for å finne partikkelen i dette punktet, i den forstand at $|\psi(x)|^2$ gir sannsynlighetstettheten. Når vi kjenner hele *funksjonen* $\psi(x)$, kjenner vi altså amplitudene for å finne partikkelen i alle mulige punkter x.

Bølgefunksjonen kan om ønskelig utvikles i et hvilket som helst fullstendig sett. Slike fullstendige sett eller basiser finnes det mange av; vi husker at det for hver observabel størrelse finnes en Hermitesk operator med et fullstendig sett av egenfunksjoner. Eksempler er $\widehat{p}_x, \widehat{H}$ og $\widehat{x}$, med egenverdiligninger og egenfunksjoner som følger:

$$\widehat{p}_x\psi_p(x) = p\psi_p(x) \quad ; \qquad \psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}e^{ipx/\hbar};$$

$$\widehat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad ; \qquad \psi_n(x) \text{ avhenger av potensialet } V(x); \tag{T10.1}$$

$$\widehat{x}\psi_{x'}(x) = x'\psi_{x'}(x) \quad ; \qquad \psi_{x'}(x) = \delta(x - x').$$

Her har vi antatt et diskret og ikke-degenerert energispektrum $\{E_n\}$, slik at vi kan bruke ortonermeringsrelasjonen

$$\langle\, \psi_k, \psi_n \,\rangle \equiv \int \psi_k^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{kn}. \tag{T10.2}$$

Alle disse settene er fullstendige, slik at vi kan utvikle den vilkårlige tilstanden $\psi(x)$ i dem. Utviklingen i energiegenfunksjoner blir da en sum, mens utviklingene i impuls- og posisjons-egenfunksjoner blir integraler, siden spektrene $\{x'\}$ og $\{p\}$ er kontinuerlige:

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \int dp\ \phi(p)\psi_p(x); \\
\psi(x) &= \sum_n c_n\psi_n(x); \\
\psi(x) &= \int dx'\ c(x')\psi_{x'}(x).
\end{aligned} \tag{T10.3}$$

Utviklingskoeffisientene $\phi(p)$, c_n og $c(x')$ i disse formlene karakteriserer tilstanden like godt som $\psi(x)$ selv, på samme måte som komponentene av en vektor i en bestemt basis gir en fullgod beskrivelse av vektoren.

Utviklingskoeffisientene i (T10.3) er projeksjonene av ψ på de respektive "basis-vektorene" $\psi_p,\ \ \psi_n$ og $\ \psi_{x'}(x) = \delta(x - x')$:

$$\begin{aligned}
\phi(p) &= (\psi_p, \psi) = \int \psi_p^*(x)\psi(x)dx; \\
c_n &= (\psi_n, \psi) = \int \psi_n^*(x)\psi(x)dx; \\
c(x') &= (\psi_{x'}, \psi) = \int \delta(x' - x)\psi(x)dx = \psi(x').
\end{aligned} \tag{T10.4}$$

La oss gjenta beviset for formelen for c_n, ved å projisere $\ \psi(x) = \sum c_n\psi_n(x)\ $ på ψ_k. Ved å bytte rekkefølge på integral og sum finner vi at

$$\langle\, \psi_k, \psi \,\rangle = \int \psi_k^*(x)\sum_n c_n\psi_n(x) = \sum_n c_n \int \psi_k^*(x)\psi_n(x)dx = \sum_n c_n\delta_{kn} = c_k, \quad \text{q.e.d.} \tag{T10.5}$$

En liten oppgave: Finn impulsbølgefunksjonen $\phi(p)$ ved å projisere ψ på ψ_p. Hint: Bytt rekkefølge på integrasjonene og bruk deltafunksjons-"normeringen"

$$\int \psi_{p'}^*(x)\psi_p(x)dx = \delta(p' - p).$$

Formelen for $c(x')$ kan du tilsvarende finne ved hjelp av formelen

$$\int \delta(x - x'')\delta(x - x')dx = \delta(x' - x'').$$

Men enda enklere er det å bruke identiteten

$$\psi(x) = \int \psi(x')\delta(x - x')dx'.$$

Vi må også huske på den fysiske tolkningen av utviklingskoeffisientene: $\psi(x')$ er (som alt nevnt) sannsynlighetsamplituden for å finne partikkelen i posisjonen x' (i den forstand at $|\psi(x')|^2$ er sannsynlighetstettheten i posisjonsrommet). Tilsvarende er $|\phi(p)|^2$ sannsynlighets-tettheten i impulsrommet, og $|c_n|^2$ er sannsynligheten for å måle energien E_n (og etterlate partikkelen i tilstanden ψ_n). (Alt dette kan du repetere i større detalj ved hjelp av boka eller Tillegg 2.)

10.1.b Tilstandsvektorer i Hilbert-rommet. Dirac-notasjon

Det mest sentrale punktet i den *nye* formuleringen er at:

> Til hver bølgefunksjon $\psi(x)$ svarer det en abstrakt vektor som vi kaller en **tilstandsvektor**. For slike vektorer vil vi bruke symbolet $|\ldots\rangle$, som ble oppfunnet av Dirac. (T10.6)

Denne såkalte **ket**-vektoren kan vi utstyre med passende merkelapper for å indikere hva slags tilstand vi har i tankene. Ket-vektoren som svarer til bølgefunksjonen $\psi(x)$ kan vi f.eks kalle $|\psi\rangle$. Vektoren som svarer til energiegenfunksjonen $\psi_n(x)$ kan vi kalle $|\psi_n\rangle$ (eller $|n\rangle$ eller $|E_n\rangle$). Vektoren som svarer til posisjonsegenfunksjonen $\psi_{x'}(x) = \delta(x - x')$ kan vi passende kalle $|x'\rangle$. Vektoren som svarer til impulsegenfunksjonen $\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$ kan vi kalle $|p\rangle$ eller $|\psi_p\rangle$, osv. Uansett hvilken merkelapp vi velger å bruke har vi altså en én-til-én korrespondanse mellom bølgefunksjoner og tilsvarende abstrakte vektorer:

$$\begin{aligned} \psi(x) \quad &\Longleftrightarrow \quad |\psi\rangle, \\ \psi_n(x) \quad &\Longleftrightarrow \quad |\psi_n\rangle = |n\rangle = |E_n\rangle, \\ \psi_{x'}(x) = \delta(x - x') \quad &\Longleftrightarrow \quad |x'\rangle, \\ \psi_p(x) \quad &\Longleftrightarrow \quad |p\rangle = |\psi_p\rangle, \end{aligned} \tag{T10.7}$$

og så videre.

Her må vi nå ikke la oss forvirre av at også bølgefunksjonene er vektorer (jf Tillegg 2). Ket-vektoren $|\psi\rangle$ og bølgefunksjonen $\psi(x)$ er *ikke samme sak*; de hører hjemme i hvert sitt vektor-rom, men slik at det er én-til-én korrespondanse mellom vektorene i de to rommene. Rommet som utspennes av ket-vektorene vil vi fra nå av kalle Hilbert-rommet $\mathcal{H}$, (selv om også bølgefunksjonene $\psi(x)$ er vektorer i et Hilbert-rom, matematisk sett). [1]

En sentral egenskap for Hilbert-rommet (som for *alle* lineære, komplekse vektor-rom) er at en vilkårlig lineærkombinasjon av to vektorer gir en vektor i samme rommet;

$$c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle = |\psi_3\rangle. \tag{T10.8}$$

Spesielt gjelder at $c|\psi\rangle$ gir en ny vektor $|\psi_1\rangle$:[2]

$$c|\psi\rangle = |\psi\rangle c = |\psi_1\rangle. \tag{T10.9}$$

Her svarer $|\psi\rangle$ til bølgefunksjonen $\psi(x)$ og $|\psi_1\rangle$ svarer til $c\psi(x) = \psi(x)c$. Som du vil huske, beskriver $\psi(x)$ og $c\psi(x)$ samme fysiske tilstand. Det samme vil da gjelde for ket-vektorene $|\psi\rangle$ og $|\psi_1\rangle = c|\psi\rangle$.

---

[1] Som du kanskje husker fra Tillegg 2, er impuls-egenfunksjonene $\psi_p(x)$ ikke kvadratisk integrerbare. De er derfor ikke vektorer i det matematiske Hilbert-rommet $L_2(-\infty, \infty)$ av kvadratisk integrerbare funksjoner. Det samme gjelder posisjonsegenfunksjonene $\psi_{x'}(x) = \delta(x - x')$. Ket-vektorene $|\psi_p\rangle$ og $|x'\rangle$ er tilsvarende ikke egentlig medlemmer av Hilbert-rommet $\mathcal{H}$. Men de fungerer utmerket som basis-vektorer for utvikling av vektorer i Hilbert-rommet. Vi kan altså postulere at vektor-settene $\{|\psi_p\rangle\}$ og $\{|x'\rangle\}$, i likhet med settet $\{|\psi_n\rangle\}$, er fullstendige. I kvantemekanikk opererer vi derfor med et slags utvidet Hilbert-rom, hvor vektorene $|x'\rangle$ og $|\psi_p\rangle \equiv |p\rangle$ stort sett kan behandles på lik linje med egentlige vektorer i Hilbert-rommet.

[2] Noen lærebokforfattere bruker også notasjonen $c|\psi\rangle = |\psi\rangle c = |c\psi\rangle$.

10.1.c Det duale Hilbert-rommet. Skalarprodukt

For at den nye formuleringen skal bli ekvivalent med den gamle må vi postulere et skalarprodukt (indreprodukt) mellom ket-vektorer.

Før vi går i gang med dette kan det være instruktivt å se hvordan skalarproduktet defineres for ordinære komplekse vektorer **A** og **B**. I fysikklitteraturen defineres dette som

$$\langle\, \mathbf{A}, \mathbf{B}\,\rangle = \mathbf{A}^{*}\!\cdot\!\mathbf{B} \equiv \sum_i A_i^{*} B_i. \tag{T10.10}$$

Fra denne definisjonen følger det at det (vanligvis) komplekse skalarproduktet oppfyller relasjonen

$$\langle\, \mathbf{A}, \mathbf{B}\,\rangle = \langle\, \mathbf{B}, \mathbf{A}\,\rangle^{*}. \tag{T10.11}$$

Videre er det lett å se at dersom c er et komplekst tall, så har skalarproduktet egenskapene

$$\langle\, \mathbf{A}, c\mathbf{B}\,\rangle = c\,\langle\, \mathbf{A}, \mathbf{B}\,\rangle \qquad \text{og} \qquad \langle\, c\mathbf{A}, \mathbf{B}\,\rangle = c^{*}\,\langle\, \mathbf{A}, \mathbf{B}\,\rangle. \tag{T10.12}$$

Vi sier da at skalarproduktet $\langle\, \mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2\,\rangle$ er **lineært** med hensyn på vektor nr 2 ($\mathbf{V}_2$) og **anti-lineært** med hensyn på vektor nr 1 ($\mathbf{V}_1$). Merk at skalarproduktet mellom funksjoner har akkurat de samme egenskapene:

$$\langle\, f, g\,\rangle = \int f^{*}\, g\, d\tau = \langle\, g, f\,\rangle^{*}; \qquad \langle\, f, cg\,\rangle = c\,\langle\, f, g\,\rangle; \qquad \langle\, cf, g\,\rangle = c^{*}\,\langle\, f, g\,\rangle. \tag{T10.13}$$

For å få en praktisk notasjon for skalarproduktet (indreproduktet) $\langle\; |\psi_1\rangle\,,\, |\psi_2\rangle\;\rangle$ mellom to ket-vektorer i Hilbert-rommet innførte Dirac det såkalte **duale** Hilbert-rommet $\mathcal{H}^{*}$. Dette rommet kommer fram ved at vi til hver ket-vektor $|\psi\rangle$ i $\mathcal{H}$ tilordner en såkalt **dual** vektor $\langle\psi|$ i $\mathcal{H}^{*}$:

$$\langle\psi| \qquad \overset{\text{dual til}}{\longleftrightarrow} \qquad |\psi\rangle. \tag{T10.14}$$

Ved hjelp av disse nye vektorene $\langle\ldots|$, som Dirac kalte **bra**-vektorer, kan vi formulere regneregler og etablere Dirac-notasjonen, som faktisk er enklere å bruke enn bølgefunksjonsformalismen (og som dessuten kan brukes når det ikke *eksisterer* noen bølgefunksjoner, f.eks for spinn).

Poenget med bra-vektoren er at den tillater oss å skrive skalarproduktet mellom $|\psi_1\rangle$ og $|\psi_2\rangle$ som et enkelt produkt av *bra*-vektoren $\langle\psi_1|$ og ket-vektoren $|\psi_2\rangle$:

$$\langle\; |\psi_1\rangle\,,\, |\psi_2\rangle\;\rangle = \langle\psi_1|\cdot|\psi_2\rangle \equiv \langle\psi_1|\psi_2\rangle. \tag{T10.15}$$

Grunnen til at Dirac innførte betegnelsene **bra** og **ket** skjønner du kanskje nå: Den forenklede skrivemåten for skalarproduktet (helt til høyre) har jo formen ⟨bra|ket⟩, som er avledet av det engelske ordet ⟨"**bracket**"⟩. Merk at $\langle\psi_1|$ spiller omtrent samme rolle som $\mathbf{A}^{*}$ i prikkproduktet $\langle\, \mathbf{A}, \mathbf{B}\,\rangle = \mathbf{A}^{*}\!\cdot\!\mathbf{B}$, og som ψ_1^{*} i skalarproduktet $\langle\, \psi_1, \psi_2\,\rangle = \int \psi_1^{*}\psi_2 d\tau$. Men i (T10.15) er vi ekstra "strenge": I slike indreprodukter skal bra-vektoren alltid stå til venstre for ket-vektoren.

Den *fysiske tolkningen* av $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\; |\psi_1\rangle\,,\, |\psi_2\rangle\;\rangle$ — projeksjonen av $|\psi_2\rangle$ på $|\psi_1\rangle$ — er akkurat den samme som for de tilsvarende bølgefunksjonene: Projeksjonen er sannsynlighetsamplituden for at en ved en måling finner systemet i den fysiske tilstanden som svarer til $|\psi_1\rangle$ (og til ψ_1) når systemet i utgangspunktet er i den fysiske tilstanden som svarer til $|\psi_2\rangle$ (og til ψ_2). Vi har altså

$$\boxed{\langle\psi_1|\cdot|\psi_2\rangle \equiv \langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\,\psi_1,\psi_2\,\rangle \equiv \int \psi_1^*\psi_2 d\tau.} \qquad \text{(T10.16)}$$

Fra relasjonen $\langle\,\psi_1,\psi_2\,\rangle = \langle\,\psi_2,\psi_1\,\rangle^*$ følger det da at

$$\langle\psi_2|\cdot|\psi_1\rangle = (\langle\psi_1|\cdot|\psi_2\rangle)^* = \quad \text{komplekst tall},$$

eller

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*. \qquad \text{(T10.17)}$$

Videre har vi at

$$\underline{\langle\psi_1|\cdot c|\psi_2\rangle} = \langle\,\psi_1, c\psi_2\,\rangle = c\,\langle\,\psi_1,\psi_2\,\rangle = \underline{c\langle\psi_1|\cdot|\psi_2\rangle}. \qquad \text{(T10.18)}$$

Skalarproduktet er altså lineært i ket-vektoren (vektor nr 2). Med $|\psi_1\rangle = c|\phi\rangle$ ser vi tilsvarende at

$$\underline{\langle\psi_1|}\cdot|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^* = (c\langle\psi_2|\phi\rangle)^* = \underline{c^*\langle\phi|}\cdot|\psi_2\rangle.$$

Den duale til $|\psi_1\rangle = c|\phi\rangle$ er altså $c^*\langle\phi|$:

$$c^*\langle\phi| \qquad \stackrel{\text{dual til}}{\longleftrightarrow} \qquad c|\phi\rangle, \qquad \text{(T10.19)}$$

i analogi med $(c\mathbf{a})^* = c^*\mathbf{a}^*$. Denne relasjonen kommer vi til å få bruk for ofte. Merk at dette betyr at skalarproduktet er antilineært med hensyn på vektor nr 1, akkurat som $\langle\,f,g\,\rangle = \int f^*\,g\,d\tau$.

Sammenhengen mellom $|\psi\rangle$ og $\psi(x)$

Mens bølgefunksjonen er et konkret og forhåpentligvis kjent og kjært begrep, vil du antakelig ha store problemer med å forestille deg hva den abstrakte tilstandsvektoren $|\psi\rangle$ er for noe. Etter hvert vil du imidlertid oppdage at denne abstraktheten er til å leve med, og at du som kvantemekaniker får et lykkeligere og kanskje til og med behageligere liv enn før dersom du bare vet hvordan du skal *bruke* disse vektorene. Vi skal nå prøve å gå gjennom de sentrale delene av bruksanvisningen, på en ikke alt for systematisk måte.

To sentrale egenskaper har vi alt nevnt: Den duale tilordningen (T10.14) og (T10.19), samt at skalarproduktet $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ er det samme som mellom de tilsvarende bølgefunksjonene (se lign. (T10.16)). Den **fysiske tolkningen** av det nye skalarproduktet er altså som nevnt akkurat den samme som for det gamle: Skalarproduktet $\langle\psi_n|\psi\rangle$ er eksempelvis sannsynlighetsamplituden for (ved en måling) å finne partikkelen i den tilstanden som er beskrevet av vektoren $|\psi_n\rangle$ (dvs med energien E_n) dersom den (før målingen) er i en tilstand beskrevet ved vektoren $|\psi\rangle$ (dvs ved bølgefunksjonen $\psi(x)$). Tilsvarende er $\langle p|\psi\rangle$ amplituden for å finne partikkelen i tilstanden beskrevet av vektoren $|p\rangle$ (dvs med impuls p).

Slik kan vi fortsette. Vi huskar at vektoren $|x'\rangle$ svarer til at partikkelen med sikkerhet er i posisjonen x' (svarer til bølgefunksjonen $\psi_{x'}(x) = \delta(x-x')$). Skalarproduktet $\langle x'|\psi\rangle$ er derfor amplituden for å finne partikkelen i punktet x' når den er i tilstanden $|\psi\rangle$. Her bør det nå ringe en liten klokke, *for denne amplituden er jo identisk med bølgefunksjonen* $\psi(x')$. Sammenhengen mellom bølgefunksjonen $\psi(x)$ og vektoren $|\psi\rangle$ er altså

$$\boxed{\langle x|\psi\rangle = \psi(x).} \tag{T10.20}$$

Merk også at

$$\langle\psi|x\rangle = \langle x|\psi\rangle^* = \psi^*(x). \tag{T10.21}$$

10.1.d Fullstendighet

Bølgefunksjonen $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ er altså "komponenten av Hilbert-vektoren $|\psi\rangle$ i $|x\rangle$-retning", eller projeksjonen av $|\psi\rangle$ på basis-vektoren $|x\rangle$. Tilsvarende er skalarproduktene $\langle\psi_n|\psi\rangle$ projeksjonene av $|\psi\rangle$ på et annet basis-sett, $|\psi_n\rangle$. Disse settene er (som basis-betegnelsen indikerer) **fullstendige**, akkurat som de tilsvarende bølgefunksjons-settene (se lign. (T10.1)), slik at en vilkårlig vektor $|\psi\rangle$ i Hilbert-rommet kan utvikles i dem, analogt med utviklingene (T10.3):

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \int dp\ \phi(p)|p\rangle, \\
|\psi\rangle &= \sum_n c_n|\psi_n\rangle, \\
|\psi\rangle &= \int dx'\ c(x')|x'\rangle.
\end{aligned} \tag{T10.22}$$

Her må vi vente at koeffisientene er akkurat de samme som i (T10.4),

$$c_n = \langle\,\psi_n,\psi\,\rangle = \langle\psi_n|\psi\rangle, \quad \text{osv.},$$

men la oss kontrollere det, for å få litt regnetrening: Ved å ta projeksjonen av den midterste av ligningene (T10.22) på $|\psi_k\rangle$ (dvs multiplisere fra venstre med $\langle\psi_k|$) finner vi

$$\langle\psi_k|\psi\rangle = \sum_n c_n\langle\psi_k|\psi_n\rangle = \sum_n c_n\delta_{kn} = c_k, \quad \text{q.e.d..}$$

Her har vi brukt (T10.16), som innebærer at settet $|\psi_k\rangle$ er ortonormert, akkurat som settet $\psi_k(x)$:

$$\langle\psi_k|\psi_n\rangle = \langle\,\psi_k,\psi_n\,\rangle = \delta_{kn}. \tag{T10.23}$$

Innsetting i (T10.22) gir nå

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\psi\rangle\,|\psi_n\rangle. \tag{T10.24}$$

De tilsvarende utviklingene i impuls- og posisjons-vektorer er

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \int dp\ \langle p|\psi\rangle\,|p\rangle, \\
|\psi\rangle &= \int dx'\ \langle x'|\psi\rangle\,|x'\rangle.
\end{aligned} \tag{T10.25}$$

Dette vises ved å projisere (T10.22) på henholdsvis $|x''\rangle$ og $|\psi_{p'}\rangle$. Begge disse er kontinuums-sett, med δ-funksjonsnormering, slik at vi i stedet for (T10.23) har [3]

$$\begin{aligned}\langle p'|p\rangle &= \langle\, p', p\,\rangle = \delta(p-p'),\\ \langle x''|x'\rangle &= \langle\, \psi_{x''}, \psi_{x'}\,\rangle = \delta(x''-x').\end{aligned} \tag{T10.26}$$

Dermed blir

$$\langle x''|\psi\rangle = \int dx'\; c(x')\langle x''|x'\rangle = \int dx'\; c(x')\delta(x''-x') = c(x''),$$

slik at

$$|\psi\rangle = \int dx'\; c(x')|x'\rangle = \int dx'\; \langle x'|\psi\rangle\, |x'\rangle = \int dx\; \langle x|\psi\rangle\, |x\rangle, \quad \text{q.e.d..}$$

Tilsvarende har vi at

$$\langle p'|\psi\rangle = \int dp\; \phi(p)\langle p'|p\rangle = \int dp\; \phi(p)\delta(p-p') = \phi(p'), \quad \text{q.e.d..}$$

Merk at

$$\langle p|\psi\rangle = \phi(p) \tag{T10.27}$$

er amplituden for å finne impulsen p, altså impulsbølgefunksjonen (jf Tillegg 2).

Merk også at formlene (T10.24) og (T10.25) er analoge med utviklinger av en vanlig vektor i alternative basis-sett $\hat{\mathbf{e}}_i$ og $\hat{\mathbf{e}}'_i$,

$$\mathbf{A} = \sum A_i\hat{\mathbf{e}}_i = \sum A'_i\hat{\mathbf{e}}'_i\;;$$

komponentene (A_i) avhenger av hvilken basis vi velger, mens selve vektoren $\mathbf{A}$ er en basis-uavhengig størrelse; den er et såkalt (absolutt) geometrisk objekt. Det samme kan vi si om Hilbert-vektoren $|\psi\rangle$.

Fullstendighetsrelasjonen

Ligningene (T10.24) og (T10.25) forutsetter som sagt at de tre basis-settene er fullstendige. En liten omskriving av (T10.24) gir [4]

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sum_n \langle\psi_n|\psi\rangle\, |\psi_n\rangle\\ &= \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\cdot|\psi\rangle\\ &= \left(\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\right)\cdot|\psi\rangle.\end{aligned} \tag{T10.28}$$

Siden dette skal gjelde for en vilkårlig vektor $|\psi\rangle$, har vi at

$$\boxed{\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \mathbb{1}. \qquad \text{(fullstendighetsrelasjonen)}} \tag{T10.29}$$

[3] Vektorer med δ-funksjons-normering (og de tilsvarende bølgefunksjonene) faller som nevnt utenfor det egentlige Hilbert-rommet. I kvantemekanikk arbeider vi derfor med et vektor-rom som vi kan kalle et utvidet Hilbert-rom (vanligvis bare kalt Hilbert-rommet).

[4] Merk at skalarproduktet $\langle\psi_n|\psi\rangle$ er et komplekst tall, som kan flyttes akkurat hvor det passer oss.

Dette er fullstendighetsrelasjonen i Dirac-notasjon (for et diskret vektor-sett). Som vi skal se nedenfor er både venstre og høyre side i denne relasjonen **operatorer**. Størrelsen på høyresiden kan vi kalle **enhetsoperatoren**; $1\!\!1|\psi\rangle = |\psi\rangle$.

For de to kontinuums-settene finner vi tilsvarende:

$$|\psi\rangle = \int dx\ \langle x|\psi\rangle\ |x\rangle = \left(\int dx\ |x\rangle\langle x|\right)\cdot|\psi\rangle, \quad \text{osv.,}$$

slik at fullstendighetsrelasjonene for disse settene er

$$\begin{aligned} \int dx\ |x\rangle\langle x| &= 1\!\!1, \\ \int dp\ |p\rangle\langle p| &= 1\!\!1. \qquad \text{(fullstendighet)} \end{aligned} \tag{T10.30}$$

Vi skal etter hvert se at disse relasjonene er mye enklere å bruke enn de tilsvarende fullstendighets-relasjonene for bølgefunksjonene (jf Tillegg 2):

$$\begin{aligned} \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') &= \delta(x-x'), \\ \int dp\ \psi_p(x)\psi_p^*(x') &= \delta(x-x'), \quad \text{osv.} \end{aligned} \tag{T10.31}$$

Som et eksempel kan vi foreta følgende omskrivinger av $\|\ |\psi\rangle\ \|^2 \equiv \langle\psi|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \langle\psi|1\!\!1|\psi\rangle = \langle\psi|\left(\int dx\ |x\rangle\langle x|\right)|\psi\rangle \\ &= \int dx\ \langle\psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int dx\ \psi^*(x)\psi(x) = \langle\,\psi,\psi\,\rangle\,, \\ \langle\psi|\psi\rangle &= \langle\psi|\left(\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\right)|\psi\rangle \\ &= \sum_n\langle\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_n |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2 \equiv \sum_n |c_n|^2, \\ \langle\psi|\psi\rangle &= \langle\psi|\left(\int dp\,|p\rangle\langle p|\right)|\psi\rangle \\ &= \int dp\ |\langle p|\psi\rangle|^2 \equiv \int dp\ |\phi(p)|^2. \end{aligned} \tag{T10.32}$$

Disse relasjonene er generaliserte Parseval-relasjoner. Merk at skalarproduktet $\langle\psi|\psi\rangle$ alltid er reelt og ≥ 0, slik at vi kan definere normen av $|\psi\rangle$ ved

$$\|\ |\psi\rangle\ \| = \langle\psi|\psi\rangle^{1/2} \geq 0. \tag{T10.33}$$

Den teknikken som vi har brukt her, med å putte inn enhetsoperatorene (T10.29) eller (T10.31) (eller tilsvarende for andre fullstendige sett) der det passer oss, er et knep som vi kommer til å bruke ofte. La oss som enda et eksempel bruke dette knepet til å vise ekvivalensen mellom (T10.29) og (T10.31): Fra normerings-relasjonen (T10.26) har vi:

$$\begin{aligned} \delta(x-x') &= \langle x|x'\rangle = \langle x|1\!\!1\,|x'\rangle \\ &= \langle x|\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|x'\rangle \\ &= \sum_n\langle x|\psi_n\rangle\langle x'|\psi_n\rangle^* = \sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x'), \quad \text{q.e.d.} \end{aligned} \tag{T10.34}$$

10.2 Operatorer, egenvektorer, forventningsverdier, m.m.

10.2.a Generell definisjon av operatorer

Operatorer hadde i den gamle formuleringen egenskapen

$$\text{operator} \cdot \text{bølgefunksjon} = \text{ny bølgefunksjon.} \tag{T10.35}$$

Tilsvarende gjelder i den nye formuleringen: Når vi lar en Hilbert-rom-operator $\widehat{A}$ virke på en Hilbert-vektor $|b\rangle$ så fåes en ny Hilbert-vektor $|c\rangle = \widehat{A}|b\rangle$. Sagt med andre ord: Operatorer avbilder Hilbert-rommet på seg selv. Merk at operatoren står til venstre for en ket-vektor.

Eksempel: Projeksjonsoperator

Uttrykket $P_n \equiv |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ er en operator. Brukt på en vilkårlig vektor $|\psi\rangle$ gir den

$$P_n|\psi\rangle \equiv (|\psi_n\rangle\langle\psi_n|)\,|\psi\rangle = \langle\psi_n|\psi\rangle\;|\psi_n\rangle \equiv c_n|\psi_n\rangle. \tag{T10.36}$$

Operatoren $P_n \equiv |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ projiserer altså ut den delen av vektoren $|\psi\rangle$ som peker i "$|\psi_n\rangle$-retningen", og kalles derfor en **projeksjons-operator**. Merk at

$$\sum_n P_n = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1\!\!1. \quad \text{(fullstendighetsrelasjonen)} \tag{T10.37}$$

Uttrykket på venstresiden i fullstendighetsrelasjonen er derfor en sum av operatorer, som til sammen utgjør enhetsoperatoren. Når vi skal bruke det nevnte knepet med å putte inn enhetsoperatoren $1\!\!1$ der det passer oss, må vi derfor alltid passe på at enhetsoperatoren virker på en ket-vektor, dvs står til venstre for en $|\text{ket}\rangle$. Den kan også stå til høyre for en bra-vektor. Noen ganger kommer vi til å sette den til høyre for en isolert $\langle\text{bra} - \text{vektor}|$; det er da underforstått at $\langle\text{bra} - \text{vektor}| \cdot 1\!\!1$ i neste omgang virker på en $|\text{ket}\rangle$. (Se avsnitt 10.3.b nedenfor.)

10.2.b Operatorer og egenvektorer

Som du kan se i avsnitt 6.4 i Hemmer, er **postulatene** i den nye formuleringen de samme som i den gamle, bortsett fra notasjonen. Også i den nye formuleringen er det slik at det til hver fysisk observabel (f.eks. x, p_x, E osv) svarer en Hermitesk operator. Problemet med disse og andre Hilbert-rom-operatorer er at de er like abstrakte som vektorene — men igjen skal vi se at abstraktheten er til å leve med. Det eneste vi trenger å vite om operatoren $\widehat{p}_x$, f.eks, er at den er *definert* slik at den oppfyller **egenverdi-ligningen**

$$\widehat{p}_x|p\rangle = p|p\rangle. \tag{T10.38}$$

Tilsvarende er operatoren $\widehat{x}$ definert ved at

$$\widehat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle. \tag{T10.39}$$

Posisjonsvektoren $|x'\rangle$ er altså en egenvektor til operatoren $\widehat{x}$ med egenverdi x'.

Vi skal se at (T10.38) og (T10.39) er tilstrekkelige til å bestemme virkningen av operatorene $\widehat{x}$ og $\widehat{p}_x$ på en vilkårlig vektor $|\psi\rangle$. Ved å bruke fullstendighetsrelasjonen for egenvektor-settet til $\widehat{p}_x$ har vi

$$|\psi\rangle = \int dp\, |p\rangle\langle p|\psi\rangle. \qquad \text{(T10.40)}$$

Ved hjelp av (T10.38) finner vi da at operatoren $\widehat{p}_x$ virker slik:

$$\begin{aligned}\widehat{p}_x|\psi\rangle &= \widehat{p}_x \int dp\, |p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int dp\, \widehat{p}_x|p\rangle\langle p|\psi\rangle \\ &= \left(\int dp\, p|p\rangle\langle p|\right)\cdot|\psi\rangle. \qquad \text{(T10.41)}\end{aligned}$$

Da denne gjelder for alle $|\psi\rangle$, har vi altså et veldefinert uttrykk for operatoren $\widehat{p}_x$:

$$\widehat{p}_x = \int dp\, |p\rangle p\langle p|, \qquad \text{(T10.42)}$$

der *tallet* p kan puttes både foran, bak eller mellom, alt etter hva en finner for godt. Dette uttrykket kalles den **spektrale representasjonen** for operatoren $\widehat{p}_x$; merk at integralet over p løper over hele spektret til operatoren. Med samme metode finner vi

$$\widehat{x} = \int dx'\, |x'\rangle x'\langle x'|. \qquad \text{(T10.43)}$$

Tilsvarende program kan åpenbart gjennomføres for alle Hermiteske operatorer (som har fullstendige egenvektor-sett). En operator $\widehat{F}$ med et kontinuerlig spektrum $\{f\}$ og egenvektorer $|f\rangle$ kan skrives

$$\widehat{F} = \int df\, |f\rangle f\langle f|. \qquad \text{(T10.44)}$$

En operator $\widehat{A}$ med et diskret egenverdi-spektrum $\{a_n\}$ og egenvektorer $|a_n\rangle$ kan tilsvarende skrives

$$\widehat{A} = \sum_n |a_n\rangle a_n\langle a_n|. \qquad \text{(T10.45)}$$

Samme oppskrift kan også brukes til å finne et uttrykk for en vilkårlig potens av en Hermitesk operator. Ved å bruke $\widehat{p}_x$ én gang til i (T10.41) finner vi f.eks at

$$\widehat{p}_x^2 = \int dp\, |p\rangle p^2\langle p|,$$

og tilsvarende for høyere potenser av $\widehat{p}_x$. Dermed kan vi også finne et uttrykk for en **operator-funksjon** $\widehat{F}(\widehat{p}_x)$. Slike operatorfunksjoner er nemlig pr definisjon gitt ved en Taylor-utvikling av funksjonen F i potenser av argumentet. Operatoren $\widehat{F}(\widehat{p}_x)$ kan altså skrives

$$\widehat{F}(\widehat{p}_x) = \int dp\, |p\rangle F(p)\langle p|, \qquad \text{(T10.46)}$$

der $F(p)$ er funksjonen F av *tallet* p. Tilsvarende er f.eks operatorfunksjonen som svarer til potensialet $V(x)$ gitt ved

$$\widehat{V}(\widehat{x}) = \int dx'\, |x'\rangle V(x')\langle x'|. \qquad \text{(T10.47)}$$

10.2.c Adjungert

Vi har allerede snakket om Hermiteske operatorer, men uten å definere Hermitesitet i Dirac-notasjon. Den nye definisjonen skal selvsagt være helt ekvivalent med den gamle, dvs vi må kreve at operatoren er **selvadjungert.** Vi har tidligere definert den adjungerte $\widehat{A}^\dagger$ til en operator $\widehat{A}$ ved

$$\int (\widehat{A}\psi_1)^* \psi_2 d\tau \equiv \int \psi_1^* \widehat{A}^\dagger \psi_2 d\tau, \tag{T10.48}$$

som også kan skrives slik:

$$\int \psi_1^* \widehat{A}^\dagger \psi_2 d\tau = \left(\int \psi_2^* \widehat{A}\psi_1 d\tau \right)^*,$$

eller

$$(\psi_1, \widehat{A}^\dagger \psi_2) = (\psi_2, \widehat{A}\psi_1)^*.$$

Den ekvivalente definisjonen i Dirac-notasjon er

$$\boxed{\langle a|\widehat{A}^\dagger|b\rangle = \langle b|\widehat{A}|a\rangle^*, \qquad (\text{def. } \widehat{A}^\dagger)} \tag{T10.49}$$

hvor vi til avveksling bruker betegnelsene $|a\rangle$ og $|b\rangle$ for de to vilkårlige vektorene. Kaller vi vektoren $\widehat{A}|a\rangle$ for $|c\rangle$, så har vi fra (T10.49):

$$\underline{\langle a|\widehat{A}^\dagger}|b\rangle = \langle b|c\rangle^* = \underline{\langle c|}b\rangle.$$

Den duale til vektoren $|c\rangle = \widehat{A}|a\rangle$ er altså $\langle a|\widehat{A}^\dagger$:

$$\boxed{\langle a|\widehat{A}^\dagger \qquad \stackrel{\text{dual til}}{\longleftrightarrow} \qquad \widehat{A}|a\rangle.} \tag{T10.50}$$

For en selvajungert (dvs Hermitesk) operator $\widehat{A} = \widehat{A}^\dagger$ ser vi at

$$\langle a|\widehat{A}|b\rangle = \langle b|\widehat{A}|a\rangle^*. \quad (\widehat{A} \text{ Hermitesk}) \tag{T10.51}$$

Nedenfor skal vi se at forventningsverdiene av Hermiteske operatorer, og egenverdiene deres, er reelle, slik vi også fant ved hjelp av den gamle formalismen.

Ekvivalensen mellom den gamle definisjonen (T10.48) av adjungert og den nye (T10.49) innebærer at de regnereglene vi fant for adjungering i Tillegg 2 også gjelder for Hilbert-rom-operatorer. Vi har blant annet:

$$\begin{aligned} (\widehat{A}\widehat{B})^\dagger &= \widehat{B}^\dagger \widehat{A}^\dagger \, ; \\ (\widehat{A}\widehat{B}\widehat{C})^\dagger &= \widehat{C}^\dagger \widehat{B}^\dagger \widehat{A}^\dagger \, , \ \text{osv.}; \\ (c\widehat{F})^\dagger &= c^* \widehat{F}^\dagger \, , \ (c \text{ komplekst tall}). \end{aligned} \tag{T10.52}$$

Vi tar også med regelen

$$(\widehat{A}^\dagger)^\dagger = \widehat{A}, \tag{T10.53}$$

som følger ved å bruke (T10.51) to ganger:

$$\langle a|(\widehat{A}^\dagger)^\dagger|b\rangle = \langle b|\widehat{A}^\dagger|a\rangle^* = \langle a|\widehat{A}|b\rangle.$$

Bra-vektoren $\langle a|$, som er dual til ket-vektoren $|a\rangle$, kalles ofte **den adjungerte** til $|a\rangle$ (og omvendt):

$$(|a\rangle)^\dagger = \langle a| \,, \qquad (\langle a|)^\dagger = |a\rangle. \tag{T10.54}$$

Et vilkårlig sammensatt uttrykk av konstanter, operatorer og ket- og bra-vektorer kan da **adjungeres etter følgende regler**:

$$\begin{array}{lcll} c & \longrightarrow & c^* \,; & \text{(konstant)} \\ \widehat{A} & \longrightarrow & \widehat{A}^\dagger \,; & \text{(operator)} \\ |\ \rangle & \longrightarrow & \langle\ | \,; & (\text{ket} \to \text{bra}) \\ \langle\ | & \longrightarrow & |\ \rangle \,; & (\text{bra} \to \text{ket}) \end{array} \tag{T10.55}$$

rekkefølgen snues, men merk at konstanter og skalarprodukter av typen $\langle a|b\rangle$ og $\langle a|\widehat{A}|b\rangle$ kan flyttes fritt, da de alle er komplekse tall. Eksempler:

(i) Den adjungerte til operatoren $c\langle u|\widehat{A}|v\rangle\ |\phi\rangle\langle\psi|$ er

$$|\psi\rangle\langle\phi|\ \langle v|\widehat{A}^\dagger|u\rangle c^* = c^*\langle v|\widehat{A}^\dagger|u\rangle\ |\psi\rangle\langle\phi|.$$

(ii) Den adjungerte til ket-vektoren $c|u\rangle\langle v|w\rangle$ er bra-vektoren

$$\langle w|v\rangle\ \langle u|c^* = c^*\langle w|v\rangle\ \langle u|.$$

10.2.d Forventningsverdier

Forventningsverdien av en størrelse F er i Dirac-notasjon gitt ved

$$\langle\, F\,\rangle_\psi = \langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle. \qquad \text{(forventningsverdi)} \tag{T10.56}$$

La oss kontrollere at denne definisjonen er ekvivalent med den gamle (se Postulat C i Tillegg 2): Vi prøver med $\widehat{F} = \widehat{x}$ og bruker standard-knepet vårt:

$$\begin{aligned} \langle\, x\,\rangle_\psi &= \langle\psi|\widehat{x}\cdot 1\!\!1|\psi\rangle = \langle\psi|\widehat{x}\int dx'\ |x'\rangle\langle x'|\psi\rangle \\ &= \int dx'\ \langle\psi|x'\rangle x'\langle x'|\psi\rangle = \int dx'\ \psi^*(x')\,x'\,\psi(x'), \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

(Du kan utlede samme resultat mer direkte ved å bruke (T10.43)).

Videre har vi fra (T10.27) og (T10.42):

$$\begin{aligned} \langle\, \widehat{p}_x\,\rangle_\psi &= \langle\psi|\widehat{p}_x|\psi\rangle = \int dp\,\langle\psi|p\rangle\,p\,\langle p|\psi\rangle \\ &= \int dp\,\phi^*(p)\,p\,\phi(p) = \int dp\,|\phi(p)|^2\,p, \end{aligned} \tag{T10.57}$$

der $\langle p|\psi\rangle = \phi(p)$ er amplituden for å finne impulsen p (impuls-bølgefunksjonen) og $|\phi(p)|^2$ er sannsynlighetstettheten i impulsrommet. Dette stemmer med resultatene i Tillegg 2.

Mer generelt har vi for en (Hermitesk) operator $\widehat{A}$ med egenverdier a_n og egenvektorer $|a_n\rangle$ (jf (T10.45)):

$$\begin{aligned}\langle\, A\,\rangle_\psi &= \langle\psi|\widehat{A}|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\sum_n |a_n\rangle a_n\langle a_n|\psi\rangle \\ &= \sum_n \langle a_n|\psi\rangle^* a_n\langle a_n|\psi\rangle \\ &= \sum_n |\langle a_n|\psi\rangle|^2 a_n \equiv \sum_n P(a_n)a_n, \end{aligned} \tag{T10.58}$$

der $\;P(a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2\;$ er sannsynligheten for å måle a_n.

Merk at Hermitesiteten til $\widehat{A}$ innebærer at $\langle\, A\,\rangle_\psi$ blir reell for alle $|\psi\rangle$ (jf (T10.51)). Setter vi spesielt $|\psi\rangle = |a_n\rangle$, gir (T10.58)

$$\langle\, A\,\rangle_{|a_n\rangle} = a_n,$$

slik at alle egenverdiene a_n er reelle, slik vi også har sett før.

10.3 Tilstandssligningen. Posisjons- og impuls-representasjonene

10.3.a Tilstandsligningen

Vi har hittil ikke diskutert tidsavhengigheten til tilstandsvektorene. En tidsavhengig bølgefunksjon $\Psi(x,t)$ svarer til en tidsavhengig Hilbert-vektor $|\Psi(t)\rangle$:

$$\Psi(x,t) = \langle x|\Psi(t)\rangle. \tag{T10.59}$$

Vi skal postulere at den kvantemekaniske bevegelsesligningen for $|\Psi(t)\rangle$, eller tilstandsligningen, generelt har samme form som Schrödingerligningen,

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \widehat{H}\,|\Psi(t)\rangle, \tag{T10.60}$$

også for systemer som *ikke* lar seg beskrive ved hjelp av vanlige bølgefunksjoner (jf spinnfrihetsgrader). Denne ligningen kan vi også kalle en generalisert Schrödingerligning. Her er $\widehat{H}$ systemets Hamilton-operator, som bestemmer hvordan $|\Psi(t)\rangle$ utvikler seg med tiden. Dersom vi forutsetter at $\widehat{H}$ er Hermitesk, kan vi si at $|\Psi(t)\rangle$ "roterer" i Hilbert-rommet, idet normen da er konstant. Dette følger fra (T10.60):

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle &= (\frac{d}{dt}\langle\Psi|)\cdot|\Psi\rangle + \langle\Psi|\cdot\frac{d}{dt}|\Psi\rangle \\ &= \frac{1}{-i\hbar}\langle\Psi|\widehat{H}^\dagger|\Psi\rangle + \langle\Psi|\frac{1}{i\hbar}\widehat{H}|\Psi\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|(\widehat{H}^\dagger - \widehat{H})|\Psi\rangle = 0, \quad \text{q.e.d.}, \end{aligned} \tag{T10.61}$$

siden $\widehat{H}^\dagger = \widehat{H}$ når $\widehat{H}$ er Hermitesk.

10.3.b Posisjons- og impuls-representasjonene

For systemer som *lar* seg beskrive ved hjelp av bølgefunksjoner, må (T10.60) selvsagt være ekvivalent med Schrödingerligningen, noe formen bærer tydelig preg av. Vi skal se at Schrödingerligningen og posisjonsrom-formuleringen av kvantemekanikk, som vi kaller posisjons-representasjonen, følger ved å projisere (T10.60) ned på $|x\rangle$-basisen. Tilsvarende vil impuls-representasjonen følge ved å projisere (T10.60) på impuls-basisen $|p\rangle$.

Vi begynner med å etablere noen enkle formler, som er nyttige redskaper både her og i andre sammenhenger:

$$\langle x'|\widehat{x} = x'\langle x'| \; ; \tag{T10.62}$$

$$\langle x'|\widehat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'| \; ; \tag{T10.63}$$

$$\langle p|\widehat{p}_x = p\langle p| \; ; \tag{T10.64}$$

$$\langle p|\widehat{x} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\langle p| \; . \tag{T10.65}$$

Tilsvarende gjelder for potenser av operatorene $\widehat{x}$ og $\widehat{p}_x$ og for operator-funksjoner som lar seg Taylor-utvikle i potenser:

$$\begin{aligned} \langle x'|\widehat{F}(\widehat{x},\widehat{p}_x) &= \widehat{F}(x',\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'})\langle x'| \; ; & \text{(T10.66)} \\ \langle p|F(\widehat{x},\widehat{p}_x) &= \widehat{F}(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p},p)\langle p| \; . & \text{(T10.67)} \end{aligned}$$

I alle disse uttrykkene er det underforstått at vi kommer til å la dem virke fra venstre på en ket-vektor.

Bevis:

(T10.62) og (T10.64) følger ved adjungering av egenvektorligningene (T10.39) og (T10.38) (jf reglene (T10.55)). Formel (T10.63) viser vi slik: Fra relasjonen

$$\langle x'|p\rangle = \psi_p(x') = (2\pi\hbar)^{-1/2}\, e^{ipx'/\hbar} = \langle p|x'\rangle^* \tag{T10.68}$$

har vi identitetene

$$p\langle x'|p\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p\rangle \qquad \text{og} \qquad x'\langle p|x'\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\langle p|x'\rangle. \tag{T10.69}$$

Ved hjelp av fullstendighetsrelasjonen finner vi da

$$\begin{aligned} \langle x'|\widehat{p}_x \cdot 1\!\!1 &= \langle x'|\widehat{p}_x \int dp\,|p\rangle\langle p| \\ &= \langle x'|\int dp\; p|p\rangle\langle p| \\ &= \int dp\,\langle x'|p\rangle p\langle p| \\ &= \int dp\,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p\rangle\langle p| \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\int dp\,|p\rangle\langle p| = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\cdot 1\!\!1, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned} \tag{T10.70}$$

(Merk at vi kunne ha spart oss de første trinnene i utledningen ved å bruke uttrykket (T10.42) for operatoren $\widehat{p}_x$). Ligning (T10.65) bevises på tilsvarende måte.

Beviset (T10.70) for (T10.63) lar seg trivielt utvide til vilkårlige potenser av $\widehat{p}_x$, slik at en potens $\widehat{p}_x^n$ til høyre for $\langle x'|$ kan erstattes med samme potens $(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'})^n$ til venstre for $\langle x'|$. Tilsvarende gjelder for alle de fire relasjonene (T10.62)–(T10.65). Dette holder også for en sum av potenser, altså for en Taylor-rekke. Dermed er også (T10.66) og (T10.67) bevist.

Det er nå en triviell sak å utlede Schrödingerligningen fra den generelle tilstandsligningen (T10.60). Ved å projisere denne på $|x'\rangle$ finner vi fra (T10.66):

$$i\hbar \left.\frac{d}{dt}\right|_{x'} \langle x'|\Psi(t)\rangle = \langle x'|\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p}_x)|\Psi(t)\rangle = \widehat{H}(x', \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'})\langle x'|\Psi(t)\rangle,$$

eller

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x',t) = \widehat{H}(x', \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'})\Psi(x',t), \tag{T10.71}$$

som er Schrödingerligningen i posisjons-representasjonen.

At også Schrödingerligningen i impuls-representasjonen kan utledes fra (T10.60), trenger vi nå egentlig ikke å vise, for den ble jo utledet fra posisjons-representasjonen i Tillegg 2. Men la oss gjøre det likevel, for å få litt trening: Ved å projisere (T10.60) på $|p\rangle$-basisen har vi fra (T10.67)

$$i\hbar \left.\frac{d}{dt}\right|_{p} \langle p|\Psi(t)\rangle = \langle p|\widehat{H}(\widehat{x},\widehat{p}_x)|\Psi(t)\rangle = \widehat{H}(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}, p)\langle p|\Psi(t)\rangle.$$

Her er $\langle p|\Psi(t)\rangle$ amplituden for å finne impulsen p ved tiden t, som er identisk med impuls-bølgefunksjonen $\Phi(p,t)$. Vi har altså

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(p,t) = \widehat{H}(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}, p)\Phi(p,t), \tag{T10.72}$$

som er Schrödingerligningen i impuls-representasjonen (jf Tillegg 2).

Utledningen av (T10.71) og (T10.72) viser at $\widehat{x}$ og $\widehat{p}_x$ (og dermed også $\widehat{H}$) i posisjons- og impuls-representasjonene kan leses rett ut av høyresidene i ligningene (T10.62)–(T10.67). Lar vi nemlig f.eks $\widehat{p}_x$ virke på en vektor $|\psi\rangle$, så fås en ny vektor som vi kan kalle $|\tilde{\psi}\rangle$. Denne vektoren svarer til bølgefunksjonen

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(x') &= \langle x'|\tilde{\psi}\rangle = \langle x'|\widehat{p}_x|\psi\rangle \overset{\text{(T10.63)}}{=} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\psi\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\psi(x'). \end{aligned} \tag{T10.73}$$

Dette viser at impulsoperatoren i posisjons-representasjonen er $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}$; noe vi altså kan lese rett ut fra høyresiden i (T10.63).

La oss til slutt, som en liten øvingsoppgave, vise at Hilbert-rom-operatorene $\widehat{x}$ og $\widehat{p}_x$ oppfyller kommutator-relasjonen

$$[\widehat{x}, \widehat{p}_x] = i\hbar\mathbb{1}. \tag{T10.74}$$

Dette kan gjøres på flere måter, f.eks ved å bruke fullstendighetsrelasjonen samt (T10.62) og (T10.63) slik:

$$
\begin{aligned}
&\widehat{x}\widehat{p}_x - \widehat{p}_x\widehat{x} \\
&= \int dx'\, |x'\rangle\langle x'|(\widehat{x}\widehat{p}_x - \widehat{p}_x\widehat{x}) \\
&= \int dx'\, |x'\rangle(\langle x'|\widehat{x}\widehat{p}_x - \langle x'|\widehat{p}_x\widehat{x}) \\
&= \int dx'\, |x'\rangle \left(x'\langle x'|\widehat{p}_x - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\widehat{x} \right) \\
&= \int dx'\, |x'\rangle \left(x'\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'| - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}x'\langle x'| \right) \\
&= \int dx'\, |x'\rangle \left(x'\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'| - \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial x'}{\partial x'}\right)\langle x'| - x'\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'| \right) \\
&= \int dx'\, |x'\rangle\, i\hbar\, \langle x'| = i\hbar \mathbb{1}, \quad \text{q.e.d.}
\end{aligned}
$$

Merk rekkefølgen:

$$
\begin{aligned}
\langle x'|\widehat{x}\widehat{p}_x &= x'\langle x'|\widehat{p}_x = x'\,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\,; \\
\langle x'|\widehat{p}_x\widehat{x} &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\widehat{x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'}\,x'\langle x'|.
\end{aligned}
$$

10.4 Matrisemekanikk

Posisjons- og impuls-representasjonene i forrige avsnitt framkom som vi så ved å projisere tilstandsligningen (T10.60) på henholdsvis $|x\rangle$- og $|p\rangle$-basisene, som begge er kontinuums-sett. Dette er bare to av mange mulige representasjoner. I dette avsnittet skal vi se hvordan formalismen blir når vi projiserer ned på en *diskret* basis.

10.4.a Matrise-representasjoner av vektorer og operatorer

Vi tenker oss et diskret sett av basisvektorer $|1\rangle, |2\rangle$, osv., som er ortonormert;

$$\langle k|n\rangle = \delta_{kn}. \tag{T10.75}$$

En vektor

$$|a\rangle = \mathbb{1}|a\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|a\rangle = \sum_k \langle k|a\rangle|k\rangle$$

kan da representeres av komponentene (eller "koordinatene") $\langle k|a\rangle$, som vi kan kalle a_k;

$$\langle k|a\rangle \equiv a_k \quad ; \qquad |a\rangle = \sum_k a_k|k\rangle. \tag{T10.76}$$

Disse komponentene er det naturlig å samle i en søyle-matrise a, mens bra-vektoren

$$\langle a| = \sum_k a_k^* \langle k|$$

representeres av rekkematrisen

$$\mathrm{a}^\dagger = (a_1^*, a_2^*, \ldots).$$

Merk at denne framkommer ved adjungering (eller Hermitesk konjugering) av søylematrisen a. [5] Dermed får f.eks skalarproduktet formen

$$\begin{aligned}
\langle b|a\rangle &= \langle b|1\!\!1|a\rangle = \sum_k \langle b|k\rangle\langle k|a\rangle = \sum_k b_k^* a_k \\
&= (b_1^*, b_2^*, \ldots)\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \mathrm{b}^\dagger \mathrm{a}. \qquad \text{(T10.77)}
\end{aligned}$$

En operator $\widehat{A}$ representeres nå ved en matrise. Dette innser vi ved f.eks. å betrakte komponentene av vektoren $|c\rangle = \widehat{A}|a\rangle$, som er

$$\langle k|c\rangle = \langle k|\widehat{A}|a\rangle = \sum_n \langle k|\widehat{A}|n\rangle\langle n|a\rangle,$$

dvs

$$c_k = \sum_n A_{kn} a_n,$$

eller på matriseform:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & & \\ \vdots & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \qquad \text{(T10.78)}$$

Tilsvarende er

$$\begin{aligned}
\langle b|\widehat{A}|a\rangle &= \sum_{k,n} \langle b|k\rangle\langle k|\widehat{A}|n\rangle\langle n|a\rangle \\
&= (b_1^*, b_2^*, \ldots)\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & & \\ \vdots & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \\
&\equiv \mathrm{b}^\dagger \mathcal{A} \mathrm{a}. \qquad \text{(T10.79)}
\end{aligned}$$

Et produkt av to operatorer representeres av produktet av de to matrisene. Vi har nemlig

$$(\widehat{A}\widehat{B})_{kn} = \langle k|\widehat{A}\widehat{B}|n\rangle = \sum_m \langle k|\widehat{A}|m\rangle\langle m|\widehat{B}|n\rangle = \sum_m A_{km} B_{mn},$$

dvs

$$(\mathcal{AB}) = (\mathcal{A})(\mathcal{B}). \qquad \text{(T10.80)}$$

For den adjungerte til en operator $\widehat{A}$ har vi fra (T10.49)

$$(\widehat{A}^\dagger)_{kn} = \langle k|\widehat{A}^\dagger|n\rangle = \langle n|\widehat{A}|k\rangle^* = A_{nk}^*, \quad \text{eller}$$

$$\mathcal{A}^\dagger = \tilde{\mathcal{A}}^*. \qquad \text{(T10.81)}$$

Operatoren $\widehat{A}^\dagger$ representeres altså av den adjungerte eller Hermitesk konjugerte matrisen.

[5] Adjungering, eller Hermitesk konjugering, av en matrise svarer til transponering og komplekskonjugering; $M^\dagger \equiv \tilde{M}^*$.

10.4.b Skifte av basis ***[6]

Friheten i valget av basis gjør det interessant å se hvordan et **skifte av basis** virker. Anta at vi vil skifte fra det opprinnelige settet $|k\rangle$ (som vi markerer med latinske merkelapper) til et nytt diskret sett $|\alpha\rangle$ ($\alpha = 1, 2, \ldots$), som vi markerer med greske merkelapper, for å holde gammelt og nytt fra hverandre. De nye basis-vektorene kan uttrykkes ved de gamle:

$$|\alpha\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|\alpha\rangle \equiv \sum_k |k\rangle S_{k\alpha}. \tag{T10.82}$$

Her er $S_{k\alpha} \equiv \langle k|\alpha\rangle$ komponentene av de nye i den gamle basisen. Disse tenker vi oss samlet i en matrise S. Vi har altså

$$\begin{aligned} \langle k|\alpha\rangle &= S_{k\alpha}, \\ \langle \alpha|k\rangle &= \langle k|\alpha\rangle^* = S^*_{k\alpha} = (S^\dagger)_{\alpha k}. \end{aligned} \tag{T10.83}$$

Dersom også det nye settet skal være ortonormert, må vi ha

$$\delta_{\beta\alpha} \stackrel{!}{=} \langle\beta|\alpha\rangle = \sum_k \langle\beta|k\rangle\langle k|\alpha\rangle = \sum_k S^\dagger_{\beta k} S_{k\alpha} = (S^\dagger S)_{\beta\alpha}. \tag{T10.84}$$

Tilsvarende er

$$\delta_{kn} = \langle k|n\rangle = \sum_\alpha \langle k|\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle = \sum_\alpha S_{k\alpha} S^\dagger_{\alpha n} = (SS^\dagger)_{kn}.$$

Matrisen S må altså være **unitær**:

$$S^\dagger S = SS^\dagger = \mathbb{1}; \qquad S^\dagger = S^{-1}, \qquad \text{(unitaritet)}. \tag{T10.85}$$

Det er naturlig å kalle S for transformasjons-matrisen, fordi den gir forbindelsen mellom matrise-representasjonene av vektorer og operatorer i den gamle og den nye basisen. De nye matrise-elementene av operatoren $\widehat{A}$ er f.eks

$$\begin{aligned} A_{\beta\alpha} &\equiv \langle\beta|\widehat{A}|\alpha\rangle = \sum_{k,n} \langle\beta|k\rangle\langle k|A|n\rangle\langle n|\alpha\rangle \\ &= \sum_{k,n} S^\dagger_{\beta k} A_{kn} S_{n\alpha}, \end{aligned}$$

eller på matriseform:

$$\mathcal{A}_{\text{ny}} = S^\dagger \mathcal{A} S. \tag{T10.86}$$

Videre representeres vektoren

$$|a\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|a\rangle$$

i den nye basisen av komponentene

$$a_\alpha \equiv \langle\alpha|a\rangle = \sum_k \langle\alpha|k\rangle\langle k|a\rangle = \sum_k S^\dagger_{\alpha k} a_k,$$

eller på matriseform:

$$\mathrm{a}_{\text{ny}} = S^\dagger \mathrm{a}. \tag{T10.87}$$

[6] Ikke pensum

For en bra-vektor har vi tilsvarende

$$\begin{aligned} b_\beta^* &= \langle b|\beta\rangle = \sum_n \langle b|n\rangle\langle n|\beta\rangle = \sum_n \langle n|b\rangle^*\langle n|\beta\rangle \\ &= \sum_n b_n^* S_{n\beta}, \end{aligned}$$

eller på matriseform

$$\mathrm{b}_{\mathrm{ny}}^\dagger = \mathrm{b}^\dagger S. \tag{T10.88}$$

Slike unitære transformasjoner (basis-skifter) endrer selvsagt ikke noe på fysikken i et problem. For eksempel vil alle skalarprodukter være bevart under transformasjonen: Ved å kombinere (T10.75) – (T10.78) finner vi at

$$\mathrm{b}_{\mathrm{ny}}^\dagger \mathcal{A}_{\mathrm{ny}} \mathrm{a}_{\mathrm{ny}} = (\mathrm{b}^\dagger S)(S^\dagger \mathcal{A} S)(S^\dagger \mathrm{a}) = \mathrm{b}^\dagger \mathcal{A} \mathrm{a},$$

slik det må være, siden dette skalarproduktet er lik $\langle b|\widehat{A}|a\rangle$, som er basis-uavhengig.

Diagonalisering

Noen ganger ønsker en at de nye basisvektorene $|\alpha\rangle$ skal være egenvektorer til en operator $\widehat{A}$,

$$\widehat{A}|\alpha\rangle = a_\alpha|\alpha\rangle, \tag{T10.89}$$

slik at matrisen $\mathcal{A}_{\mathrm{ny}}$ blir diagonal:

$$A_{\beta\alpha} = \langle\beta|\widehat{A}|\alpha\rangle = a_\alpha\delta_{\beta\alpha}. \tag{T10.90}$$

Å finne egenverdiene til operatoren $\widehat{A}$ er derfor ekvivalent med å diagonalisere $\mathcal{A}$-matrisen. Dette diagonaliseringsproblemet, altså å finne komponentene $\langle k|\alpha\rangle$ (lik $S_{k\alpha}$) av de ønskede vektorene $|\alpha\rangle$, kan i prinsippet løses ved å ta utgangspunkt i den ikke-diagonale matrisen A_{kn} i den opprinnelige basisen. En slik framgangsmåte kan være aktuell når en arbeider med et vektor-rom med endelig dimensjon N (et under-rom av Hilbert-rommet). Fra (T10.89) har vi da:

$$\begin{aligned} &\sum_{n=1}^N \langle k|\widehat{A}|n\rangle\langle n|\alpha\rangle = a_\alpha\langle k|\alpha\rangle, \quad \text{dvs.} \\ &\sum_n A_{kn}S_{n\alpha} = a_\alpha S_{k\alpha}\ ; \quad \alpha = 1, 2, \cdots, N; \end{aligned}$$

eller på matriseform:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & & & \\ \vdots & & & \\ A_{N1} & \cdots & & A_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{1\alpha} \\ S_{2\alpha} \\ \vdots \\ S_{N\alpha} \end{pmatrix} = a_\alpha \begin{pmatrix} S_{1\alpha} \\ S_{2\alpha} \\ \vdots \\ S_{N\alpha} \end{pmatrix}. \tag{T10.91}$$

Søyle nr. α i S-matrisen er altså en "egenvektor" til A_{kn}-matrisen. Ved å løse dette egenverdiproblemet for de N egenverdiene a_α finner en de N søylene i S-matrisen. Merk at de N egenverdiene finnes ved å sette **systemdeterminanten** lik null:

$$\det[\mathcal{A} - a_\alpha \cdot \mathbb{1}] = 0. \tag{T10.92}$$

Siden determinanten er et polynom i a_α av grad N, har denne såkalte **karakteristiske ligningen** N røtter, som er egenverdiene $a_\alpha;\ \alpha = 1, 2, \cdots, N$. Dersom en bare er interessert i egenverdiene, kan en nøye seg med å bestemme disse røttene. Ønsker en også å finne vektorene $|\alpha\rangle$, så må (T10.91) som nevnt løses for de N egenverdiene a_α, slik at en får bestemt komponentene $S_{n\alpha} = \langle n|\alpha\rangle$ av $|\alpha\rangle$.

10.4.c Bevegelsesligningen på matriseform

Projeksjonen av tilstandsligningen (T10.60) på $|k\rangle$-basisen gir ligningen

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle k|\Psi(t)\rangle = \langle k|\widehat{H}|\Psi(t)\rangle = \sum_n \langle k|\widehat{H}|n\rangle\langle n|\Psi(t)\rangle,$$

eller

$$i\hbar\frac{d}{dt}\Psi_k(t) = \sum_n H_{kn}\Psi_n(t). \tag{T10.93}$$

De tidsavhengige "$|k\rangle$-komponentene" $\Psi_k(t)$ av $|\Psi(t)\rangle$ er altså gitt av et koblet sett av 1.-ordens differensialligninger i t. På matriseform:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\Psi_1(t)\\ \Psi_2(t)\\ \vdots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}H_{11} & H_{12} & \cdots\\ H_{21} & & \\ \vdots & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1(t)\\ \Psi_2(t)\\ \vdots\end{pmatrix}. \tag{T10.94}$$

Merk at dersom en diagonaliserer denne Hamilton-matrisen, så er diagonalelementene (egenverdiene til $\mathcal{H}$-matrisen) energiene E_α til de stasjonære løsningene for det aktuelle systemet. Disse finnes fra lign. (T10.92):

$$\det[\mathcal{H} - E_\alpha \cdot \mathbb{1}] = 0. \tag{T10.95}$$

Ved hjelp av metoden som vi beskrev foran kan en også finne de tilsvarende egenvektorene $|\alpha\rangle$ til $\widehat{H}$, som svarer til de stasjonære tilstandene for systemet.

Matriseformuleringen av kvantemekanikken kalles matrisemekanikk, og er faktisk den formuleringen som ble oppdaget først, av Werner Heisenberg i 1925, kort tid før Schrødinger presenterte sin bølgemekanikk.