Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική ΙΙ *Α. Καρανίκας και Π. Σφήκας*

Σημειώσεις Ι: Γραμμικοί Διανυσματικοί Χώροι.

1. Εισαγωγικές έννοιες-Εσωτερικό Γινόμενο-Βάσεις.

Ας ξεκινήσουμε θεωρώντας ένα σύνολο, S, αφηρημένων αντικειμένων τα οποία θα συμβολίζουμε $|a\rangle$ [1]. Τα αντικείμενα αυτά ξεχωρίζουν μεταξύ τους με κάποιον δείκτη (ή κάποιους δείκτες αν είναι αναγκαίο). Ο δείκτης αυτός – εδώ ο a – μπορεί να παίρνει είτε διακριτές τιμές (αν το σύνολο των στοιχείων είναι αριθμήσιμο) ή συνεχείς τιμές.
Το πρώτο πράγμα που κάνει κάποιος, προκειμένου να δώσει δομή στο σύνολο αυτό, είναι να ορίσει ένα τρόπο σύνθεσης των αντικειμένων του που τον ονομάζει **άθροιση**. Για να είναι η πράξη αυτή καλά ορισμένη πρέπει να είναι τέτοια ώστε :

$$|a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle \quad \text{και} \quad \left(|a\rangle + |b\rangle\right) + |c\rangle = |a\rangle + \left(|b\rangle + |c\rangle\right)$$

Ορίζουμε και τον **πολλαπλασιασμό** με έναν μιγαδικό αριθμό, που θα είναι μια καλά ορισμένη πράξη αν:

$$1|a\rangle = |a\rangle \ , \ \lambda(\mu|a\rangle) = (\lambda\mu)|a\rangle \ , \ (\lambda+\mu)|a\rangle = \lambda|a\rangle + \mu|a\rangle$$

και
$$\lambda(|a\rangle + |b\rangle) = \lambda|a\rangle + \lambda|b\rangle .$$

Ας πούμε τώρα ότι τα στοιχεία $\{|a\rangle\}$ του συνόλου S είναι τέτοια ώστε :

(α) Εάν $|a\rangle \in S$ και $|b\rangle \in S$ τότε και $\left(|a\rangle + |b\rangle\right) \in S$

(β) Εάν $|a\rangle \in S$ και $\lambda \in \mathbb{Z}$ τότε $\left(\lambda|a\rangle\right) \in S$

(γ) $\exists |0\rangle \in S : |a\rangle + |0\rangle = |a\rangle$

(δ) $\forall |a\rangle \in S \ \exists |a'\rangle \in S \ : |a\rangle + |a'\rangle = |0\rangle$

Σε μια τέτοια περίπτωση θα λέμε το σύνολο S (μιγαδικό) **γραμμικό διανυσματικό χώρο** και τα στοιχεία του **διανύσματα.**

Παραδείγματα.

(1) Υποθέστε ότι το σύνολο S απαρτίζεται από τα γνωστά σας ανύσματα ενός τριδιάστατου χώρου (αυτά που γράφουμε $\vec{a}$) και ότι συμφωνούμε να συμβολίζουμε καθένα από αυτά ως $|\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\rangle$ χρησιμοποιώντας τις προβολές του ανύσματος σε κάποιο ορθοκανονικό σύστημα συντεταγμένων. Αν ορίσουμε

$$|\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\rangle + |\beta_1, \beta_2, \beta_3\rangle = |\alpha_1 + \beta_1, \alpha_2 + \beta_2, \alpha_3 + \beta_3\rangle$$

και
$$\lambda|\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\rangle = |\lambda\alpha_1, \lambda\alpha_2, \lambda\alpha_3\rangle$$

είναι προφανές ότι το σύνολο αυτό θα είναι **πραγματικός διανυσματικός χώρος** αφού μόνο αν $\lambda \in \mathbb{R}$ οι αριθμοί $\lambda\alpha_i$ θα είναι πραγματικοί και επομένως θα μπορούν να είναι προβολές κάποιου άλλου ανύσματος .

[1] Ο συμβολισμός οφείλεται στον Dirac ο οποίος ονόμασε τα αντικείμενα αυτά kets

(2) Ας θεωρήσουμε το σύνολο των μιγαδικών αριθμών $z = x + iy$ και ας συμφωνήσουμε να συμβολίζουμε καθέναν από αυτούς $|x, y\rangle$.

Ορίζουμε πρώτα το άθροισμα $|x_1, y_1\rangle + |x_2, y_2\rangle = |x_1 + x_2, y_1 + y_2\rangle$.

Ο πολλαπλασιασμός με μιγαδικό αριθμό μπορεί να οριστεί αν πρώτα δούμε ότι $\lambda z = |\lambda| e^{i\varphi}(x+iy) = |\lambda|(\cos\varphi + i\sin\varphi)(x+iy) = |\lambda|\left(x\cos\varphi - y\sin\varphi + i(x\sin\varphi + y\cos\varphi)\right) =$

$= |\lambda| x' + i|\lambda| y' = z'$.

Έτσι θα ορίσουμε

$$\lambda|x, y\rangle = \left||\lambda|x', |\lambda|y'\right\rangle \text{ με } x' = x\cos\varphi - y\sin\varphi \text{ και } y' = x\sin\varphi + y\cos\varphi .$$

Με τους ορισμούς αυτούς το σύνολο των μιγαδικών αριθμών μπορεί να θεωρηθεί ένας **μιγαδικός διανυσματικός χώρος.**

(3) Το σύνολο των πινάκων 2×2 με τους συνήθεις κανόνες άθροισης και πολλαπλασιασμού με μιγαδικό αριθμό μπορεί να θεωρηθεί ένας μιγαδικός διανυσματικός χώρος .

(4) Ας θεωρήσομε το σύνολο των συνεχών μιγαδικών συναρτήσεων $f(x)$ με την πραγματική μεταβλητή x να παίρνει τιμές σε κάποιο διάστημα $[a,b]$.

Είναι προφανές ότι αν αθροίσομε δύο τέτοιες συναρτήσεις παίρνομε πάλι μια μιγαδική συνάρτηση που ορίζεται στο ίδιο διάστημα : $f(x) + g(x) = h(x)$.

Αν πολλαπλασιάσομε μια συνάρτηση με ένα μιγαδικό αριθμό παίρνομε και πάλι μια συνάρτηση που ορίζεται στο ίδιο διάστημα : $\lambda f(x) = h(x)$

Είναι επίσης προφανές ότι: $f(x) + 0 = f(x)$ και ότι $f(x) + (-1)f(x) = 0$.

Με άλλα λόγια το σύνολο αυτών των συναρτήσεων αποτελεί ένα **μιγαδικό διανυσματικό χώρο.**

Μετά τα παραδείγματα αυτά ελπίζουμε να έγινε κατανοητό γιατί είναι ανάγκη να ξεφύγουμε από το συνήθη συμβολισμό $\vec{a}$ που χρησιμοποιούμε για τις οντότητες – «βέλη» που χαρακτηρίζονται από μέτρο, διεύθυνση και φορά.

Παρόλο που επιχειρούμε να δούμε όσο πιο γενικά μπορούμε έναν διανυσματικό χώρο είναι χρήσιμο να έχουμε στο μυαλό μας τα συνηθισμένα διανύσματα, αφ'ενός μεν για να κατανοούμε καλύτερα τα βήματα που θα κάνουμε, και αφετέρου γιατί ό,τι πούμε θα πρέπει να εφαρμόζεται και για τον συνήθη τριδιάστατο διανυσματικό χώρο.

Σ' αυτό το πνεύμα θα προτρέξουμε (χωρίς να ακολουθούμε την αυστηρή μαθηματική διαδρομή) και θα θυμηθούμε ότι στον τριδιάστατο χώρο αυτό που γίνεται, σε τελευταία ανάλυση, είναι να συνδέσουμε καθένα από τα διανύσματα $\vec{a}$ με μια τριάδα πραγματικών αριθμών $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}$ που είναι οι προβολές του σε κάποιο σύστημα συντεταγμένων και με την έννοια αυτή *αντιπροσωπεύουν ή αναπαριστούν το αφηρημένο αντικείμενο* $\vec{a}$ *στο συγκεκριμένο σύστημα συντεταγμένων.*

Αυτό θέλουμε να πετύχουμε και για το αφηρημένο αντικείμενο $|a\rangle$ του χώρου S :

Να βρούμε έναν τρόπο να το σχετίσουμε με ένα σύνολο μιγαδικών εν γένει αριθμών

$$|a\rangle \leftrightarrow \{\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_N, ..\} \tag{1.1}$$

οι οποίοι θα το αντιπροσωπεύουν όπως ακριβώς οι συνιστώσες ενός ανύσματος αντιπροσωπεύουν το άνυσμα. Πριν δούμε πώς θα μπορούσαμε να πετύχουμε μια τέτοια αντιστοίχιση βλέπουμε μια πρώτη δυσκολία: αν επιτρέψουμε στους αριθμούς α_i να είναι μιγαδικοί και πιστέψουμε ότι το

σύνολο $\{\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_N,..\}$ αντιπροσωπεύει το άνυσμα $|a\rangle$, τότε το σύνολο $\{\alpha_1^*,\alpha_2^*,...,\alpha_N^*,..\}$, των μιγαδικά συζυγών αριθμών, τι αντιπροσωπεύει;
Η συνεπής απάντηση στο ερώτημα αυτό δίνεται εαν θεωρήσουμε έναν άλλο, διαφορετικό, διανυσματικό χώρο $\tilde{S}$ τα στοιχεία του οποίου θα τα συμβολίζουμε $\langle a|$ (ονομάζονται bra) και τα οποία θα αντιπροσωπεύονται από το σύνολο των αριθμών $\{\alpha_1^*,\alpha_2^*,...,\alpha_N^*,..\}$. Τα στοιχεία και οι πράξεις στο χώρο αυτό, ο οποίος λέγεται ο **δυαδικός** (dual) του S, ορίζονται με έναν πολύ απλό κανόνα :

> Σε κάθε άνυσμα $|a\rangle$ του S θα αντιστοιχούμε ένα άνυσμα $\langle a|$ του $\tilde{S}$ (με την ίδια λογική που σε κάθε μιγαδικό αριθμό μπορούμε να αντιστοιχίσουμε τον συζυγή του μόνο που εδώ σε ένα σύνολο $\{\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_N,..\}$ πρέπει να αντιστοιχίσουμε το σύνολο $\{\alpha_1^*,\alpha_2^*,...,\alpha_N^*,..\}$). Για να είμαστε συνεπείς, στό άνυσμα $\lambda|a\rangle$ θα πρέπει να αντιστοιχεί το $\langle a|\lambda^*$ κλπ.

Έχοντας τον επιπλέον φορμαλισμό που μας χρειάζεται για να διαπραγματευθούμε μιγαδικούς διανυσματικούς χώρους ας ξαναγυρίσουμε στο παράδειγμα του συνηθισμένου τριδιάστατου χώρου για να θυμηθούμε ότι εδώ χρησιμοποιούμε μια βάση (δηλ. ένα σύστημα συντεταγμένων) $\{\vec{e}_1,\vec{e}_2,\vec{e}_3\}$ με τη βοήθεια της οποίας μπορούμε με **μοναδικό** τρόπο να γράψουμε

$$\vec{a}=\alpha_1\vec{e}_1+\alpha_2\vec{e}_2+\alpha_3\vec{e}_3 \tag{1.2}$$

Με τη βοήθεια της σχέσης αυτής αποκαθίσταται η αντιστοιχία που συζητήσαμε :

$$\vec{a}\leftrightarrow\{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3\}\,. \tag{1.3}$$

Ο δρόμος για τη γενίκευση είναι τώρα προφανής: σε ένα μιγαδικό διανυσματικό χώρο N διαστάσεων θα ονομάζομε ένα σύνολο N διανυσμάτων $\{|1\rangle,|2\rangle,...,|N\rangle\}$"βάση" εάν με **μοναδικό** (δηλ. με ένα και μόνο ένα) τρόπο μπορούμε να γράψουμε ένα τυχαίο άνυσμα του χώρου αυτού:

$$|a\rangle=\alpha_1|1\rangle+\alpha_2|2\rangle+...+\alpha_N|N\rangle=\sum_{n=1}^{N}\alpha_n|n\rangle \tag{1.4}$$

Είναι φανερό ότι στον δυαδικό χώρο, $\tilde{S}$, η βάση θα απαρτίζεται από τα ανύσματα $\{\langle 1|,\langle 2|,...,\langle N|\}$ και η συζυγής έκδοση της (1.4) θα είναι η

$$\langle a|=\sum_{n=1}^{N}\alpha_n^*\langle n|\,.$$

Αν, επομένως, βρούμε μια βάση θα έχουμε καταφέρει να αποκαταστήσουμε τις αντιστοιχίες που θέλουμε : $|a\rangle\leftrightarrow\{\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_N,..\}$, $\langle a|\leftrightarrow\{\alpha_1^*,\alpha_2^*,...,\alpha_N^*,..\}$.

Θα καταλάβουμε καλύτερα τι σημαίνει βάση αν θυμηθούμε ότι τα ανύσματα $\{\vec{e}_1,\vec{e}_2,\vec{e}_3\}$ του τριδιάστατου χώρου πρέπει να είναι γραμμικώς ανεξάρτητα: Να μην μπορεί, δηλαδή, το ένα να εκφραστεί μέσω των άλλων. Μαθηματικά αυτό εκφράζεται ως αδυναμία έκφρασης του ανύσματος ως γραμμικού συνδυασμού των άλλων, δηλ. από την απαίτηση η εξίσωση

$$\alpha_1\vec{e}_1+\alpha_2\vec{e}_2+\alpha_3\vec{e}_3=\vec{0} \tag{1.5}$$

να έχει σαν μόνη λύση την $\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=0$. (Προσέξτε ότι στην (1.5) αν κάποιοι συντελεστές δεν είναι μηδέν – ας πούμε οι α_1 και α_2 αφού δεν είναι δυνατόν μόνον ένας να είναι διάφορος του μηδενός – θα έχουμε $\vec{e}_2=-\dfrac{\alpha_1}{\alpha_2}\vec{e}_1$).

Η σχέση (1.5) είναι απαραίτητη αν θέλουμε το ανάπτυγμα (1.4) να είναι μοναδικό. Πράγματι, αν υποθέσουμε ότι υπάρχει και μία δεύτερη δυνατότητα, η $\vec{a} = \alpha_1{}'\vec{e}_1 + \alpha_2{}'\vec{e}_2 + \alpha_3{}'\vec{e}_3$, βλέπουμε αμέσως ότι $(\alpha_1 - \alpha_1{}')\vec{e}_1 + (\alpha_2 - \alpha_2{}')\vec{e}_2 + (\alpha_3 - \alpha_3{}')\vec{e}_3 = 0$ και επομένως $\alpha_1 = \alpha_1{}', \alpha_2 = \alpha_2{}', \alpha_3 = \alpha_3{}'$. Έτσι το χαρακτηριστικό των ανυσμάτων της βάσης είναι ότι είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους και βέβαια πρέπει να είναι ο *μέγιστος αριθμός* γραμμικά ανεξάρτητων ανυσμάτων του χώρου αφού θέλουμε οποιοδήποτε άλλο άνυσμα να εκφράζεται μέσω αυτών. Μάλιστα, η διάσταση του χώρου είναι ακριβώς ο μέγιστος αριθμός γραμμικά ανεξάρτητων ανυσμάτων.

Γενικεύοντας και πάλι θα λέμε ότι ότι τα ανύσματα $\{|1\rangle, |2\rangle, ..., |N\rangle\}$ θέλουμε να είναι ο μέγιστος αριθμός γραμμικώς ανεξαρτήτων ανυσμάτων

$$\sum_{n=1}^{N} \alpha_n |n\rangle = |0\rangle \Rightarrow \alpha_n = 0 \tag{1.6}$$

ώστε να μπορούμε με μοναδικό τρόπο να γράψουμε για οποιοδήποτε άνυσμα του χώρου αυτού $|a\rangle = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n |n\rangle$.

Ας πάμε και πάλι στον τριδιάστατο χώρο. Θα θυμάστε, βέβαια, ότι τα ανύσματα βάσης είναι **ορθοκανονικά**:

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = |\vec{e}_i||\vec{e}_j|\cos\theta_{ij} = \cos\theta_{ij} = \delta_{ij} \tag{1.7}$$

Στην τελευταία σχέση χρησιμοποιήσαμε το **εσωτερικό γινόμενο** δύο ανυσμάτων το οποίο για δυο τυχαία ανύσματα παίρνει τη μορφή

$$\vec{a} \cdot \vec{\beta} = |\vec{a}||\vec{\beta}|\cos\theta_{a\beta} = (\alpha_1\vec{e}_1 + ...) \cdot (\beta_1\vec{e} + ...) = \alpha_1\beta_1 + \alpha_2\beta_2 + \alpha_3\beta_3 \tag{1.8}$$

Το **μέτρο** ενός ανύσματος είναι ένας αριθμός ≥ 0:

$$\vec{a} \cdot \vec{a} = |\vec{a}|^2 = (\alpha_1\vec{e}_1 + ...)(\alpha_1\vec{e} + ...) = \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 \geq 0 \tag{1.9}$$

Αν συνδυάσουμε τις σχέσεις (2) και (6) μπορούμε να προσδιορίσουμε τους συντελεστές

$$\alpha_1 = \vec{a} \cdot \vec{e}_1, \alpha_2 = \vec{a} \cdot \vec{e}_2, \alpha_3 = \vec{a} \cdot \vec{e}_3 \tag{1.10}$$

ως τις **προβολές** του ανύσματος $\vec{a}$ στους επιμέρους άξονες.

Για να μπορέσουμε να δούμε πώς θα μεταγράψουμε τις παραπάνω σχέσεις στους *N*-διάστατους μιγαδικούς χώρους πρέπει πρώτα να δούμε πώς θα μεταφέρουμε τη έννοια του εσωτερικού γινομένου.

Μπαίνει κανείς στον πειρασμό να πει, με αφετηρία την (1.8), ότι το εσωτερικό γινόμενο δύο ανυσμάτων $|a\rangle$ και $|\beta\rangle$ θα είναι ένας αριθμός που θα τον γράφουμε $(|a\rangle, |\beta\rangle)$ και θα ορίζεται από την $(|a\rangle, |\beta\rangle) = \alpha_1\beta_1 + ... + \alpha_N\beta_N$. Ο αριθμός αυτός είναι, βέβαια, μιγαδικός αλλά αυτό είναι κάτι που θα περιμέναμε αφού ο χώρος για τον οποίο συζητάμε είναι ένας μιγαδικός διανυσματικός χώρος. Αυτό που δεν είναι καλό με τον ορισμό αυτόν είναι ότι και το μέτρο $(|a\rangle, |a\rangle) = \alpha_1^2 + ... + \alpha_N^2$ είναι μιγαδικός αριθμός – και επομένως είναι "αριθμός" που δεν μπορεί να μετρηθεί! Μπορούμε να ξεφύγουμε από το πρόβλημα αν κάνουμε την επόμενη σε πολυπλοκότητα σκέψη. Να ορίσουμε :

$$(|a\rangle, |\beta\rangle) = \alpha_1^*\beta_1 + ... + \alpha_N^*\beta_N \tag{1.11}$$

Με αυτόν τον ορισμό, το μέτρο ενός ανύσματος είναι, όπως στο συνηθισμένο τριδιάστατο χώρο, ένας αριθμός θετικός ή – το πολύ – μηδέν:

$$(|a\rangle, |a\rangle) = |\alpha_1|^2 + ... + |\alpha_N|^2 \geq 0 \tag{1.12}$$

Μια μικρή, πρακτική, "δυσκολία" υπάρχει ακόμα: όπως φαίνεται από την (1.11) η σειρά με την οποία γράφουμε τα ανύσματα στο εσωτερικό γινόμενο έχει σημασία αφού

$$\left(|a\rangle,|\beta\rangle\right)\neq\left(|\beta\rangle,|a\rangle\right)=\left(|a\rangle,|\beta\rangle\right)^* \tag{1.13}$$

Ένας πολύ πρακτικός τρόπος να γράφουμε το εσωτερικό γινόμενο είναι ο εξής. Ορίζουμε το γινόμενο του ανύσματος $\langle a|\in\tilde{S}$ με το άνυσμα $|\beta\rangle\in S$ να είναι ακριβώς ο συνδυασμός (1.11) :

$$\langle a|\beta\rangle=\alpha_1^*\beta_1+...+\alpha_N^*\beta_N=\langle\beta|a\rangle^* \tag{1.14}$$

Ταυτίζουμε, με άλλα λόγια, το εσωτερικό γινόμενο των ανυσμάτων $|a\rangle$ και $|\beta\rangle$ του χώρου S με το γινόμενο των ανυσμάτων $\langle a|\in\tilde{S}$ και $|\beta\rangle\in S$:

$$\left(|a\rangle,|\beta\rangle\right)=\langle a|\beta\rangle=\langle\beta|a\rangle^*=\left(|\beta\rangle,|a\rangle\right)^* \tag{1.15}$$

(Να σημειώσουμε εδώ ότι σε μια «αξιοπρεπή» μαθηματική διαπραγμάτευση ο ορισμός του εσωτερικού γινομένου με βάση την (13) προηγείται της όλης ανάλυσης. Μετά απ' αυτόν έρχεται η έννοια της βάσης και των "συνιστωσών" ενός ανύσματος. Για τις ανάγκες της συζήτησής μας, όμως, η πορεία που ακολουθήσαμε είναι επαρκής. Για εκείνους που ενδιαφέρονται να ακολουθήσουν τη "σωστή" διαδρομή οι παραπομπές στο τέλος των σημειώσεων θα φανούν χρήσιμες.)

Όπως και να έχουν τα πράγματα μπορούμε τώρα να γενικεύσουμε την έννοια της ορθοκανονικότητας των ανυσμάτων της βάσης

$$\langle n|m\rangle=\delta_{n,m}\qquad n,m=1,2,..,N \tag{1.16}$$

και να βρούμε τις «προβολές» [2] του ανύσματος σε κάθε «άξονα»:

$$|a\rangle=\sum_{n=1}^{N}\alpha_n|n\rangle\Rightarrow\langle m|a\rangle=\sum_{n=1}^{N}\alpha_n\langle m|n\rangle=\sum_{n=1}^{N}\alpha_n\delta_{m,n}=\alpha_m \tag{1.17}$$

Πριν κλείσουμε την παράγραφο να πούμε ότι η βασική ιδιότητα των ανυσμάτων της βάσης είναι η γραμμική ανεξαρτησία. Έστω N ανεξάρτητα ανύσματα που δεν είναι ορθοκανονικά: μπορούμε πάντα να βρούμε συνδυασμούς τους που να είναι (ορθοκανικοί).
Αυτό μπορούμε να το δείξομε εύκολα. Θεωρούμε ότι $N=3$ για ευκολία – χωρίς να απώλεια γενίκευσης. Έστω τα ανεξάρτητα ανύσματα $|q_1\rangle,|q_2\rangle,|q_3\rangle$ τα οποία δεν είναι ορθοκανονικά.
Σχηματίζομε τους συνδυασμούς

$$|1\rangle=\alpha_1|q_1\rangle+\alpha_2|q_2\rangle+\alpha_3|q_3\rangle\,,$$
$$|2\rangle=\beta_1|q_1\rangle+\beta_2|q_2\rangle+\beta_3|q_3\rangle\,,$$
$$|3\rangle=\gamma_1|q_1\rangle+\gamma_2|q_2\rangle+\gamma_3|q_3\rangle\,.$$

Θέλουμε να διαλέξουμε τους 9 ($=N^2$) μιγαδικούς συντελεστές έτσι ώστε να ισχύει :

$$\langle 1|1\rangle=\langle 2|2\rangle=\langle 3|3\rangle=1 \text{ και } \langle 1|2\rangle=\langle 2|1\rangle^*=0,\langle 1|3\rangle=\langle 3|1\rangle^*=0,\langle 2|3\rangle=\langle 3|2\rangle^*=0$$

Οι απαιτήσεις αυτές είναι μόνο 6 ($=N(N+1)/2<N^2$) και επομένως μπορούμε να φτιάξουμε την ορθοκανονική βάση που θέλουμε με άπειρους τρόπους!
(Η μέθοδος **Schmidt** είναι ένας συστηματικός τρόπος να λυθεί το πρόβλημα).

[2] Τα εισαγωγικά έχουν να κάνουν με το ότι οι αριθμοί $\langle m|a\rangle$ είναι μιγαδικοί και επομένως δεν μπορούν να είναι προβολές με την έννοια που έχετε συνηθίσει.

2. <u>Γραμμικοί Τελεστές.</u>

Ένας τελεστής $\hat{A}$ είναι ένας μετασχηματισμός (δηλ. μία πράξη) που μετατρέπει ένα άνυσμα $|\alpha\rangle$ σε ένα άλλο άνυσμα: $\hat{A}|\alpha\rangle = |\beta\rangle$. Στην ανάλυσή μας θα περιοριστούμε σε τελεστές οι οποίοι είναι τέτοιοι ώστε η πράξη $\hat{A}|\alpha\rangle$ να έχει νόημα για κάθε άνυσμα του χώρου S και επιπλέον αν $|\alpha\rangle \in S$ τότε και $\hat{A}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \in S$.

- Λέμε ότι ένας τελεστής είναι **γραμμικός** αν
$$\hat{A}\left(\lambda|\alpha\rangle + \mu|\beta\rangle\right) = \lambda\left(\hat{A}|\alpha\rangle\right) + \mu\left(\hat{A}|\beta\rangle\right)$$
ενώ θα λέμε ότι είναι **αντιγραμμικός** αν
$$\hat{A}\left(\lambda|\alpha\rangle + \mu|\beta\rangle\right) = \lambda^*\left(\hat{A}|\alpha\rangle\right) + \mu^*\left(\hat{A}|\beta\rangle\right)$$
- Λέμε ότι δύο τελεστές είναι **ίσοι** μόνο αν $\hat{A}|\alpha\rangle = \hat{B}|\alpha\rangle \ , \ \forall|\alpha\rangle \in S$. Είναι σημαντικό αυτό: η τελευταία σχέση δηλώνει την ισότητα των δύο τελεστών μόνο αν το άνυσμα $|\alpha\rangle$ είναι **τυχαίο.** Αν δεν είναι τότε η σχέση αυτή είναι μια εξίσωση που μας καλεί να βρούμε τα ανύσματα (αν υπάρχουν…) στα οποία η δράση των τελεστών $\hat{A}$ και $\hat{B}$ παράγει το ίδιο αποτέλεσμα.
- Όρίζουμε το άθροισμα $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ και το γινόμενο $\hat{D} = \hat{A}\hat{B}$ δύο τελεστών με τις σχέσεις
$$\hat{C}|\alpha\rangle = (\hat{A}+\hat{B})|\alpha\rangle = \hat{A}|\alpha\rangle + \hat{B}|\alpha\rangle \text{ και } \hat{D}|\alpha\rangle = (\hat{A}\hat{B})|\alpha\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\alpha\rangle) \ \forall|\alpha\rangle \in S.$$
- Η πιο χαρακτηριστική ιδιότητα των τελεστών είναι ότι *γενικά δεν μετατίθενται*. Η σειρά με την οποία δρουν σε κάποιο άνυσμα έχει σημασία :
$$\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle \neq \hat{B}\hat{A}|\alpha\rangle \text{ ή } (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\alpha\rangle \neq |0\rangle$$

Είναι επόμενως πολύ σημαντικό να γνωρίζουμε τον **μεταθέτη** δύο τελεστών :
$$[\hat{A},\hat{B}] \underset{o\rho\sigma}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Πρακτική σημασία έχουν οι ακόλουθες ταυτότητες τις οποίες μπορείτε να ελέγξετε εύκολα (και τις οποίες μπορείτε να επεκτείνετε για οποιοδήποτε αριθμό τελεστών) :
$$[\hat{A}_1 + \hat{A}_2, \hat{B}] = [\hat{A}_1, \hat{B}] + [\hat{A}_2, \hat{B}]$$
Και γενικώτερα:
$$[\hat{A}_1 + \hat{A}_2, \hat{B}_1 + \hat{B}_2] = [\hat{A}_1, \hat{B}_1 + \hat{B}_2] + [\hat{A}_2, \hat{B}_1 + \hat{B}_2] = [\hat{A}_1, \hat{B}_1] + [\hat{A}_1, \hat{B}_2] + [\hat{A}_2, \hat{B}_1] + [\hat{A}_2, \hat{B}_2]$$

Επίσης:
$$[\hat{A}_1\hat{A}_2, \hat{B}] = \hat{A}_1[\hat{A}_2, \hat{B}] + [\hat{A}_1, \hat{B}]\hat{A}_2$$
Και γενικώτερα:
$$[\hat{A}_1\hat{A}_2, \hat{B}_1\hat{B}_2] = \hat{A}_1[\hat{A}_2, \hat{B}_1\hat{B}_2] + [\hat{A}_1, \hat{B}_1\hat{B}_2]\hat{A}_2 = \hat{A}_1\hat{B}_1[\hat{A}_2, \hat{B}_2] + \hat{A}_1[\hat{A}_2, \hat{B}_1]\hat{B}_2 + \hat{B}_1[\hat{A}_1, \hat{B}_2]\hat{A}_2 + [\hat{A}_1, \hat{B}_1]\hat{A}_2\hat{B}_2$$

- Ο πολλαπλασιασμός με έναν μιγαδικό αριθμό ορίζεται με απλό τρόπο:
$$\lambda\hat{A}|a\rangle = \hat{A}\left(\lambda|a\rangle\right) \qquad \forall|a\rangle \in S$$
- Ένας δεδομένος τελεστής $\hat{A}$ μπορεί να δρά τόσο σε kets όσο και σε bra. Μπορούμε να ορίσουμε τη δράση ενός τελεστή σ΄ένα bra (στα «αριστερά» του) ως εξής:
$$\{\langle b|\hat{A}\}|a\rangle \underset{o\rho\sigma}{=} \langle b|\{\hat{A}|a\rangle\} \equiv \langle b|\hat{A}|a\rangle$$
- Είναι σημαντικό να σημειώσουμε εδώ ότι η δράση ενός τελεστή πάνω σε δυαδικά ανύσματα δεν παράγει, εν γένει, δυαδικά ανύσματα:

Αν $\hat{A}|a\rangle = |b\rangle$ και $\langle a|\hat{A} = \langle c|$ το bra $\langle c|$ **δεν είναι το δυαδικό** του ket $|b\rangle$.

2.1 Παραδείγματα τελεστών.

(1) Ο πιο απλός τελεστής είναι ο **ταυτοτικός**: όταν δράσει επάνω σε οποιοδήποτε άνυσμα δεν το αλλάζει :

$$\hat{I}|a\rangle = |a\rangle \ .$$

Μπορούμε να δούμε αμέσως ένα παράδειγμα ταυτοτικού τελεστή αν χρησιμοποιήσουμε μια βάση στο χώρο μας για να γράψουμε ένα τυχαίο άνυσμά του

$$|a\rangle = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n |n\rangle$$

Οι συντελεστές στο ανάπτυγμα αυτό είναι $\alpha_n = \langle n|a\rangle$ και επομένως διαπιστώνουμε αμέσως ότι

$$|a\rangle = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n|a\rangle = \left\{\sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n|\right\}|a\rangle \qquad (1.18)$$

Είναι προφανές από την έκφραση αυτή ότι ο τελεστής που κλείσαμε στην αγκύλη είναι μια πράξη η οποία όταν εφαρμοστεί πάνω σε ένα τυχαίο άνυσμα δεν το αλλάζει. Είναι, δηλαδή, ο ταυτοτικός τελεστής :

$$\hat{I} = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n| \qquad (1.19)$$

Η σχέση αυτή εκφράζει με πολύ συνεκτικό τρόπο το γεγονός ότι τα ορθοκανονικά ανύσματα $\{|n\rangle\}$ συγκροτούν μία βάση του χώρου: Για οποιοδήποτε άνυσμα του χώρου μπορούμε να γράψομε

$$|a\rangle = \hat{I}|a\rangle = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n|a\rangle = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n |n\rangle \qquad (1.20)$$

Αυτός είναι ο λόγος για τον οποίο η σχέση (1.19) λέγεται **σχέση πληρότητας**.

Αν δούμε τη δράση του κάθε όρου του αθροίσματος (1.19) πάνω σε ένα τυχαίο άνυσμα:

$$\left(|n\rangle\langle n|\right)|a\rangle = |n\rangle\langle n|a\rangle = |n\rangle \alpha_n$$

διαπιστώνουμε ότι «προβάλλει» το άνυσμα $|a\rangle$ στα επιμέρους ανύσματα της βάσης (στους επιμέρους «άξονες»). Γι' αυτό το λόγο οι τελεστές $\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$ λέγονται **προβολικοί** τελεστές .

(2) Ο **αντίστροφος,** $\hat{A}^{-1}$, ενός τελεστή, αν υπάρχει, ορίζεται από τη σχέση:

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{I} \qquad (1.21)$$

Με βάση τον ορισμό αυτό μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε ότι

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1} \qquad (1.22)$$

(3) Έστω ότι $\hat{A}|a\rangle = |b\rangle$. Είπαμε ήδη ότι η δράση του τελεστή στο δυαδικό άνυσμα, δηλαδή στο bra $\langle a|$, δεν παράγει το δυαδικό αποτέλεσμα: δεν παράγει, δηλαδή, το bra $\langle b|$. Ο τελεστής που το κάνει αυτό λέγεται ο **συζυγής** του $\hat{A}$ και γράφεται $\hat{A}^{\dagger}$. Για να τον ορίσουμε ξεκινάμε από την

$$\hat{A}|a\rangle = |b\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle a|\hat{A}^{\dagger} = \langle b|$$

που σημαίνει ότι

$$\langle c|\hat{A}|a\rangle = \langle c|b\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle a|\hat{A}^{\dagger}|c\rangle = \langle b|c\rangle = \langle c|b\rangle^{*}$$

Η τελευταία σχέση μας οδηγεί στον προσδιορισμό:

$$\langle a|\hat{A}^{\dagger}|c\rangle = \langle c|\hat{A}|a\rangle^{*} \qquad (1.23)$$

Σαν άσκηση μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τη σχέση (1.23) για να αποδείξουμε ότι

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger} \qquad (1.24)$$

Αυτό που πρέπει να δείξουμε είναι ότι $\langle a|\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}|c\rangle = \langle c|\hat{A}\hat{B}|a\rangle^{*}$.

Γράφουμε $\hat{B}|a\rangle = |a'\rangle$, $\langle c|\hat{A} = \langle c'|$ και επομένως $\langle c|\hat{A}\hat{B}|a\rangle^{*} = \langle a'|c'\rangle$. Αλλά προφανώς $\langle a|\hat{B}^{\dagger} = \langle a'|$ και $\langle c|\hat{A}^{\dagger} = \langle c'|$ οπότε αμέσως προκύπτει η (1.24).

Στην Κβαντική Μηχανική έχουν πολύ μεγάλη σημασία οι **αυτοσυζυγείς** ή **ερμιτιανοί (**hermitian) τελεστές, που ορίζονται ως οι τελεστές που πληρούν την σχέση: $\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}$

(4) Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχουν στην Κβαντική Μηχανική και οι λεγόμενοι **μοναδιακοί** (unitary) τελεστές:

$$\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{\dagger} = \hat{I} \quad \text{που σημαίνει ότι} \quad \hat{U}^{\dagger} = \hat{U}^{-1}.$$

Οι τελεστές αυτοί αντιπροσωπεύουν πράξεις οι οποίες διατηρούν το μέτρο ενός ανύσματος :

$$\hat{U}|a\rangle = |b\rangle \;\Rightarrow\; \langle b|b\rangle = \langle a|\hat{U}^{\dagger}\hat{U}|a\rangle = \langle a|a\rangle.$$

3. <u>Αναπαράσταση τελεστών από πίνακες</u>

Θα διαπιστώσουμε αργότερα ότι ποσότητες όπως ο αριθμός

$$I_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \tag{1.25}$$

έχουν πολύ μεγάλο ενδιαφέρον γιατί σχετίζονται με μετρήσιμα μεγέθη.

Αλλά, ακόμα και εδώ, μπορεί να καταλάβει κανείς το ενδιαφέρον τους γιατί η ποσότητα $\hat{A}|\alpha\rangle$ είναι ένα αφηρημένο αντικείμενο και δύσκολα θα μπορούσε να σχετιστεί με κάποια φυσική ποσότητα. Αντίθετα η (1.25), ως εσωτερικό γινόμενο, είναι ένας μιγαδικός, εν γένει, αριθμός και επομένως το μέτρο του θα μπορούσε, ίσως, να αντιπροσωπεύει κάτι που θα μπορούσε να μετρηθεί.

Μπορούμε να δούμε τη μορφή που παίρνει η (24) σε μια συγκεκριμένη βάση $\{|n\rangle\}$ αν γράψουμε:

$$I_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \hat{I}\hat{A}\hat{I} | \beta \rangle = \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N} \langle \alpha | n \rangle \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \beta \rangle = \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N} \alpha_n^* A_{nm} \beta_m \tag{1.26}$$

Για να καταλήξουμε στην τελευταία σχέση χρησιμοποιήσαμε τη σχέση πληρότητας (1.19) των ανυσμάτων της βάσης και γράψαμε

$$\langle m | \beta \rangle = \beta_m \;\; , \;\; \langle \alpha | n \rangle = \alpha_n^* \;\; \text{και} \;\; \langle n | \hat{A} | m \rangle \equiv A_{nm} \tag{1.27}$$

Θα καταλάβουμε καλύτερα το αποτέλεσμα (25) αν περιοριστούμε σε $N = 2$ διαστάσεις :

$$I_{\alpha\beta} = \alpha_1^* A_{11}\beta_1 + \alpha_1^* A_{12}\beta_2 + \alpha_2^* A_{21}\beta_1 + \alpha_2^* A_{22}\beta_2 \tag{1.28}$$

Μπορείτε αμέσως να πιστοποιήσετε ότι η τελευταία σχέση μπορεί να ξαναγραφεί

$$I_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \alpha_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \tag{1.29}$$

Βλέπουμε, δηλαδή, ότι σε μια συγκεκριμένη βάση μπορούμε να θεωρούμε ότι ένας τελεστής **αναπαρίσταται από έναν τετραγωνικό πίνακα** $N \times N$ (στη γενική περίπτωση) τα στοιχεία του οποίου διαβάζονται από την (26) (με τον δείκτη n να δηλώνει γραμμή και τον δείκτη m στήλη) :

$$\hat{A} \doteq \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{A}|1\rangle & \langle 1|\hat{A}|2\rangle ... \langle 1|\hat{A}|N\rangle \\ \langle 2|\hat{A}|1\rangle & \langle 2|\hat{A}|2\rangle ... \langle 2|\hat{A}|N\rangle \\ .... & \\ \langle N|\hat{A}|1\rangle & \langle N|\hat{A}|2\rangle ... \langle N|\hat{A}|N\rangle \end{pmatrix} \tag{1.30}$$

Χρησιμοποιήσαμε το σύμβολο $\doteq$ στην παραπάνω σχέση για να υπογραμμίσουμε το γεγονός ότι άλλο πράγμα είναι το αφηρημένο αντικείμενο «τελεστής» και άλλο η αναπαραστασή του σε κάποια βάση. Είναι, βέβαια, προφανές ότι αν χρησιμοποιήσομε μια διαφορετική βάση θά έχομε μια *διαφορετική* αναπαράσταση του *ίδιου* τελεστή.

Να σημειώσουμε ακόμα ότι η συγκεκριμένη επιλογή που κάναμε σχετικά με το ποιός δείκτης αντιστοιχεί στις γραμμές και ποιός στις στήλες έγινε γιατί θέλουμε η αναπαράσταση του γινομένου δύο τελεστών να γίνεται από το γινόμενο των πινάκων οι οποίοι αντιπροσωπεύουν τον καθένα από αυτούς:

$$\langle n | \hat{A}\hat{B} | m \rangle = \sum_{k=1}^{N} \langle n|\hat{A}|k\rangle \langle k|\hat{B}|m\rangle = \sum_{k=1}^{N} A_{nk}B_{km} = \left(AB\right)_{nm} \tag{1.31}$$

Το τελευταίο βήμα στην (1.31) μπορεί να ερμηνευθεί ως γινόμενο πινάκων μόνο για τη συγκεκριμένη ερμηνεία που δώσαμε στους δείκτες.

Η σχέση (1.29) μας λέει ότι όχι μόνο τους τελεστές μπορούμε, σε μια συγκεκριμένη βάση, να τους βλέπουμε ως πίνακες αλλά και τα ανύσματα: τα kets θα αναπαρίστανται από έναν πίνακα στήλη

$$\left|\beta\right\rangle \doteq \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ . \\ . \\ . \\ \beta_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\beta\rangle \\ \langle 2|\beta\rangle \\ . \\ . \\ . \\ \langle N|\beta\rangle \end{pmatrix} \qquad (1.32)$$

ενώ τα bras από πίνακα γραμμή

$$\langle a| \doteq \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \alpha_2^* \ldots & \alpha_N^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \alpha|1\rangle & \langle \alpha|2\rangle \ldots \langle \alpha|\mathrm{N}\rangle \end{pmatrix} \qquad (1.33)$$

Με τις αντιστοιχίσεις αυτές είναι φανερό ότι τα ανύσματα της βάσης αναπαρίστανται ως εξής :

$$|1\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ . \\ . \\ 0 \end{pmatrix} \ , \ |2\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ . \\ . \\ 0 \end{pmatrix} \ , \ldots, \ |N\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ . \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (1.34)$$

Πριν κλείσουμε την παράγραφο αυτή είναι χρήσιμο να δούμε πώς αναπαρίσταται ο συζυγής ενός τελεστή.

Εάν ακολουθήσουμε την ίδια πορεία με αυτή που μας οδήγησε στη σχέση (1.28) θα δούμε ότι :

$$\langle \alpha|\hat{A}^*|\beta\rangle = \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N} \alpha_n^* (A^\dagger)_{nm} \beta_m \qquad (1.35)$$

Αν χρησιμοποιήσουμε τη σχέση ορισμού (1.23) θα έχουμε

$$\langle \alpha|\hat{A}^\dagger|\beta\rangle = \langle \beta|\hat{A}|\alpha\rangle^* \underset{(1.9)}{=} \left(\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{M} \beta_n^* A_{nm} \alpha_m \right)^* = \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{M} \alpha_m^* A_{nm}^* \beta_n = \sum_{m=1}^{N}\sum_{n=1}^{M} \alpha_n^* A_{mn}^* \beta_m \qquad (1.36)$$

(στο τελευταίο βήμα κάναμε την αλλαγή $n \leftrightarrow m$ η οποία, προφανώς, δεν αλλάζει τα αθροίσματα).
Συγκρίνοντας τις (1.35) και (1.36) βλέπουμε αμέσως ότι :

$$\left(A^\dagger\right)_{nm} = A_{mn}^* \qquad (1.37)$$

Με άλλα λόγια: για να βρούμε τον πίνακα που αναπαριστά τον συζυγή ενός τελεστή είναι αρκετό να πάμε στον πίνακα που αναπαριστά τον τελεστή, να αλλάξουμε τις γραμμές με τις στήλες και να πάρουμε το μιγαδικό συζυγές κάθε στοιχείου.
Βλέπουμε, επίσης, ότι αν ένας τελεστής είναι ερμιτιανός αναπαρίσταται από έναν πίνακα στον οποίο τα στοιχεία της διαγωνίου είναι πραγματικοί αριθμοί ενώ τα εκτός διαγωνίου στοιχεία είναι τέτοια ώστε $A_{nm} = A_{mn}^*$.

4. <u>Αλλαγή Βάσης –Αλλαγή Αναπαράστασης</u>

Σε ένα διανυσματικό χώρο μπορούμε να έχουμε διαφορετικές βάσεις. Για να είμαστε πιο συγκεκριμένοι ας πούμε ότι έχουμε τη βάση $\{|a_1\rangle,|a_2\rangle,...|a_N\rangle\}$ και τη βάση $\{|b_1\rangle,|b_2\rangle,...|b_N\rangle\}$. Για τα ανύσματα κάθε μιας απ' αυτές ισχύουν οι σχέσεις ορθοκανονικότητας και πληρότητας :

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij} \ , \ \sum_{i=1}^{N} |a_i\rangle\langle a_j| = \hat{I} \ \text{και} \ \langle b_i | b_j \rangle = \delta_{ij} \ , \ \sum_{i=1}^{N} |b_i\rangle\langle b_j| = \hat{I}$$

Υπάρχει τρόπος να πάμε από τη μια στην άλλη; Η απάντηση είναι και καταφατική και απλή. Για καθένα από τα ανύσματα $|b_i\rangle$ της δεύτερης απ' αυτές μπορούμε να γράψουμε:

$$|b_i\rangle = \sum_{j=1}^{N} |b_j\rangle \delta_{ij} = \sum_{j=1}^{N} |b_j\rangle\langle a_j | a_i\rangle \tag{1.38}$$

Η τελευταία σχέση μας λέει ότι ο τελεστής

$$\hat{U} = \sum_{j=1}^{N} |b_j\rangle\langle a_j| \tag{1.39}$$

μετασχηματίζει τα ανύσματα της μιας βάσης στα ανύσματα της άλλης:

$$|b_i\rangle = \hat{U}|a_i\rangle \tag{1.40}$$

Ο μετασχηματισμός αυτός πρέπει να διατηρεί το μέτρο των ανυσμάτων και επομένως ο τελεστής $\hat{U}$ πρέπει να είναι μοναδιακός. Πράγματι:

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \left(\sum_{j=1}^{N} |b_j\rangle\langle a_j|\right)\left(\sum_{i=1}^{N} |a_i\rangle\langle b_i|\right) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} |b_j\rangle\langle a_j | a_i\rangle\langle b_i| = \sum_{i=1}^{N} |b_i\rangle\langle b_i| = \hat{I} = \hat{U}^\dagger\hat{U} \tag{1.41}$$

Έτσι μπορούμε να δούμε τη σχέση (1.40) και αντίστροφα:

$$|a_i\rangle = \hat{U}^\dagger|b_i\rangle = \left(\sum_{j=1}^{N} |a_j\rangle\langle b_j|\right)|b_i\rangle \tag{1.42}$$

Την προηγούμενη παρουσίαση μπορούμε να τη διαβάσουμε και από άλλη οπτική:
Έστω η βάση $\{|a_i\rangle\}$ και έστω $\hat{U}$ ένας τελεστής ο οποίος δρα πάνω σε καθένα απ' αυτά και τα τροποποιεί : $|b_i\rangle = \hat{U}|a_i\rangle$. Τα διανύσματα που προκύπτουν θα απαρτίζουν και αυτά μια ορθοκανονική βάση αν ο τελεστής είναι μοναδιακός.
Πράγματι :

$$\langle b_i | b_j \rangle = \langle a_i|\hat{U}^\dagger\hat{U}|a_j\rangle = \langle a_i | a_j\rangle = \delta_{ij} \ , \ \sum_{i=1}^{N} |b_i\rangle\langle b_i| = \sum_{i=1}^{N} \hat{U}|a_i\rangle\langle a_i|\hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$$

Επομένως $\qquad |b_i\rangle = \hat{U}|a_i\rangle \ \Rightarrow \ \sum_{i=1}^{N} |b_i\rangle\langle a_i| = \hat{U}$

και έτσι ο τελεστής $\hat{U}$ είναι η πιο γενική έκφραση που μπορούμε να δώσουμε σε μια πράξη η οποία μας πηγαίνει από μια βάση σε μια άλλη.
Για να αποκτήσουμε αίσθηση του τελεστή αυτού ας δούμε την αναπαράστασή του στη βάση $|a_i\rangle$

$$U_{ik} = \langle a_i|\hat{U}|a_k\rangle = \sum_{j=1}^{N} \langle a_i | b_j\rangle\langle a_j | a_k\rangle = \sum_{j=1}^{N} \langle a_i | b_j\rangle \delta_{jk} = \langle a_i | b_k\rangle \tag{1.43}$$

(παρατηρείστε ότι το ίδιο αποτέλεσμα θα πάρετε και στη βάση $|b_i\rangle$).

Έστω τώρα κάποιο τυχαίο άνυσμα $|f\rangle$. Στη βάση $|a_i\rangle$ γράφεται $|f\rangle = \sum_{i=1}^{N} f_i|a_i\rangle$

όπου $f_i = \langle a_i | f \rangle$ οι συνιστώσες του. Στη βάση $|b_i\rangle$ το ίδιο άνυσμα θα γράφεται $|f\rangle = \sum_{i=1}^{N} f_i' |b_i\rangle$ και οι συνιστώσες του θα είναι οι

$$f_i' = \langle b_i | f \rangle = \sum_{j=1}^{N} \langle b_i | a_j \rangle \langle a_j | f \rangle = \sum_{j=1}^{N} U_{ji}^* f_j \tag{1.44}$$

με τη μορφή πινάκων η τελευταία γράφεται

$$\begin{pmatrix} f_1' \\ f_2' \\ . \\ . \\ . \\ f_N' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle b_1|a_1\rangle & \langle b_1|a_2\rangle & \ldots & \langle b_1|a_N\rangle \\ \langle b_2|a_1\rangle & \langle b_2|a_2\rangle & \ldots & \langle b_2|a_N\rangle \\ . & . & & \\ . & . & \ldots & . \\ . & . & \ldots & . \\ \langle b_N|a_1\rangle & \langle b_N|a_2\rangle & \ldots & \langle b_N|a_N\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ . \\ . \\ . \\ f_N \end{pmatrix} \tag{1.45}$$

επομένως ο συζυγής του πίνακα (1.43) μας δίνει το πώς αλλάζουν οι προβολές ενός ανύσματος όταν αλλάζει το σύστημα συντεταγμένων.

Ας δούμε τώρα τι θα προκύψει αν ο τελεστής (1.39) δράσει επάνω στο άνυσμα $|f\rangle$:

$$|\tilde{f}\rangle = \hat{U}|f\rangle \;\Rightarrow\; |\tilde{f}\rangle = \sum_{j=1}^{N} |b_j\rangle\langle a_j | f\rangle = \sum_{j=1}^{N} |b_j\rangle f_j \;\Rightarrow\; \langle a_i | \tilde{f}\rangle = \sum_{j=1}^{N} \langle a_i | b_j\rangle f_j \tag{1.46}$$

Με άλλα λόγια οι συνιστώσες του *νέου* ανύσματος $\tilde{f}_i = \langle a_i | \tilde{f}\rangle$ συνδέονται με τις συνιστώσες του *παλιού,* $f_i = \langle a_i | f\rangle$, ακριβώς μέσω του πίνακα (1.43):

$$\begin{pmatrix} \tilde{f}_1 \\ \tilde{f}_2 \\ . \\ . \\ . \\ \tilde{f}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle a_1|b_1\rangle & \langle a_1|b_2\rangle & \ldots & \langle a_1|b_N\rangle \\ \langle a_2|b_1\rangle & \langle a_2|b_2\rangle & \ldots & \langle a_2|b_N\rangle \\ . & . & & \\ . & . & \ldots & . \\ . & . & \ldots & . \\ \langle a_N|b_1\rangle & \langle a_N|b_2\rangle & \ldots & \langle a_N|b_N\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ . \\ . \\ . \\ f_N \end{pmatrix} \tag{1.47}$$

Το γεγονός ότι οι πίνακες που εμφανίζονται στις (1.45) και (1.47) είναι ο ένας αντίστροφος του άλλου (σύμφωνα με την (1.41)) δηλώνει το προφανές: ότι αλλαγή του ανύσματος είναι ισοδύναμη με την «αντίστροφη» αλλαγή του συστήματος συντεταγμένων.

Ως εφαρμογή σκεφθείτε ένα διάνυσμα $\vec{A}$ του συνηθισμένου Ευκλείδιου διδιάστατου χώρου. Στη βάση $|a_1\rangle = \vec{x}$, $|a_2\rangle = \vec{y}$ οι συνιστώσες του είναι A_x, A_y.Ας πούμε τώρα ότι *στρέφουμε το άνυσμα* κατά γωνία φ (θετική θεωρείται η γωνία όταν διαγράφεται αντίθετα από την κίνηση των δεικτών του ρολογιού). Προφανώς το ίδιο αποτέλεσμα θα πέρναμε αν *στρέφαμε το σύστημα συντεταγμένων κατά γωνία* $-\varphi$.

Η σχέση (1.47) μας λέει ποιές είναι οι συνιστώσες του *στραμμένου ανύσματος* στην αρχική βάση αν γνωρίζουμε ποιές είναι οι προβολές των ανυσμάτων της στραμμένης (κατά $-\varphi$) βάσης στην αρχική:

$$\begin{pmatrix} A_x' \\ A_y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{x}\cdot\vec{x}' & \vec{x}\cdot\vec{y}' \\ \vec{y}\cdot\vec{x}' & \vec{y}\cdot\vec{y}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} \tag{1.48}$$

Την παραπάνω ανάλυση μπορούμε να την εφαρμόσουμε και για την αναπαράσταση τελεστών από πίνακες σε κάποια βάση. Ας πούμε ότι γνωρίζουμε την αναπαράσταση ενός τελεστή $\hat{T}$ στη βάση $\left|a_i\right\rangle$: $T_{ij}=\left\langle a_i\middle|\hat{T}\middle|a_j\right\rangle$. Μπορούμε να βρούμε την αναπαράστασή του στη βάση $\left|b_i\right\rangle$ αν ξέρουμε τον πίνακα (1.43):

$$T_{ij}{}'=\left\langle b_i\middle|\hat{T}\middle|b_j\right\rangle=\sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}\left\langle b_i\middle|a_k\right\rangle\left\langle a_k\middle|\hat{T}\middle|a_l\right\rangle\left\langle a_l\middle|b_j\right\rangle=\sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}U_{ik}^{*}T_{kl}U_{lj} \qquad (1.49)$$

Πριν κλείσουμε την παράγραφο ακόμα μια παρατήρηση.
Έχουμε ήδη πει ότι φυσικό ενδιαφέρον στην Κβαντική Μηχανική έχουν ποσότητες της μορφής $T_{fg}=\left\langle f\middle|\hat{T}\middle|g\right\rangle$ όπου $\left|f\right\rangle$ και $\left|g\right\rangle$ τυχαία ανύσματα του χώρου για τον οποίο συζητάμε . Ας πούμε τώρα ότι τα ανύσματα αυτά αλλάζουν σύμφωνα με την (34) . Η ποσότητα που μας ανδιαφέρει, εν γένει, θα αλλάξει:

$$T_{f'g'}=\left\langle f'\middle|\hat{T}\middle|g'\right\rangle=\left\langle f\middle|\hat{U}^{\dagger}\hat{T}\hat{U}\middle|g\right\rangle=\left\langle f\middle|\hat{T}'\middle|g\right\rangle=T'_{fg} \qquad (1.50)$$

Η τελευταία σχέση μας λέει ότι παράγεται το ίδιο αποτέλεσμα (σε ότι αφορά στην αλλαγή της ποσότητας που συζητάμε) είτε αλλάζοντας τα ανύσματα σύμφωνα με την (1.35) είτε *αλλάζοντας τους τελεστές* σύμφωνα με την

$$\hat{T}'=\hat{U}^{\dagger}\hat{T}\hat{U} \qquad (1.51)$$

Όταν δύο τελεστές συνδέονται με την (1.51) τότε λέμε ότι συνδέονται με έναν μετασχηματισμό ομοιότητας **(*similarity transformation)*** στον οποίο θα αναφερθούμε και πάλι σε λίγο.

5. Το πρόβλημα των ιδιοτιμών και των ιδιοανυσμάτων

Το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοανυσμάτων ενός τελεστή συνοψίζεται στην εξίσωση

$$\hat{A}\left|a\right\rangle = \lambda_a \left|a\right\rangle \tag{1.52}$$

η οποία εντοπίζει εκείνα από τα διανύσματα του χώρου επάνω στα οποία εάν δράσει ο εν λόγω τελεστής θα τα πολλαπλασιάσει με έναν (μιγαδικό εν γένει) αριθμό. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει για μας η εξίσωση (1.52) όταν ο τελεστής είναι ερμιτιανός.

Οι λόγοι είναι σημαντικοί και από την πλευρά των μαθηματικών και από την πλευρά της φυσικής. Ο πρώτος είναι εύκολο να αποδειχθεί εδώ:

Οι ιδιοτιμές ενός ερμιτιανού τελεστή είναι πραγματικοί αριθμοί.

Πράγματι: $\hat{A}\left|a\right\rangle = \lambda_a \left|a\right\rangle \Rightarrow \left\langle a\right|\hat{A}\left|a\right\rangle = \lambda_a \left\langle a|a\right\rangle \Rightarrow \left\langle a\right|\hat{A}\left|a\right\rangle^* = \lambda_a^* \left\langle a|a\right\rangle$

και αφού $\left\langle a\right|\hat{A}\left|a\right\rangle^* = \left\langle a\right|\hat{A}^\dagger\left|a\right\rangle = \left\langle a\right|\hat{A}\left|a\right\rangle$ προκύπτει αμέσως ότι $\lambda_a^* = \lambda_a$.

Ο δεύτερος είναι αρκετά πιο δύσκολο να αποδειχθεί (ο ενδιαφερόμενος μπορεί να χρησιμοποιήσει τις αναφορές μας –και όχι μόνο):

Τα ιδιοανύσματα ενός ερμιτιανού τελεστή συγκροτούν μια πλήρη και ορθοκανονική βάση (στο διανυσματικό χώρο Ν διαστάσεων).

Εδώ μπορούμε να σημειώσουμε ένα βήμα από μια τέτοια απόδειξη:

Ιδιοανύσματα ερμιτιανού τελεστή που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι κάθετα μεταξύ τους:

Έστω $\hat{A}\left|a\right\rangle = \lambda_a \left|a\right\rangle$ και $\hat{A}\left|a'\right\rangle = \lambda_{a'} \left|a'\right\rangle$ με $\lambda_a \neq \lambda_{a'}$.

Επομένως $\left\langle a'\right|\hat{A}\left|a\right\rangle = \lambda_a \left\langle a'|a\right\rangle$ και αφού $\left\langle a'\right|\hat{A}^\dagger = \left\langle a'\right|\hat{A} = \lambda_{a'}^* \left\langle a'\right| = \lambda_{a'} \left\langle a'\right|$

αμέσως προκύπτει ότι $(\lambda_a - \lambda_{a'})\left\langle a'|a\right\rangle = 0 \Rightarrow \left\langle a'|a\right\rangle = 0$

Το σημαντικό εδώ είναι να δούμε την πληρότητα των ιδιοανυσμάτων (ή ιδιοκαταστάσεων όπως λέγονται) των ερμιτιανών τελεστών όχι μόνο από την πλευρά των μαθηματικών όσο από την πλευρά της Κβαντικής Μηχανικής:

Σε κάθε καλώς ορισμένο μέγεθος της Φυσικής (όπως η θέση, η ορμή, η ενέργεια ενός κλειστού συστήματος, η στροφορμή, ο αριθμός των σωματιδίων κλπ.) αντιστοιχεί ένας ερμιτιανός τελεστής (ας πούμε $\hat{A}$).

Η κατάσταση του συστήματός μας αντιστοιχεί σε κάποιο από τα ανύσματα του χώρου στον οποίο ορίζεται ο εν λόγω τελεστής.

Σε μια μέτρηση του μεγέθους A αυτό το οποίο θα προκύψει θα είναι κάποια (ας πούμε η λ_a) από τις ιδιοτιμές του αντίστοιχου τελεστή (οι οποίες, ως πειραματικώς προσδιορίσιμες ποσότητες, είναι πραγματικοί αριθμοί). Αμέσως μετά την μέτρηση η κατάσταση του συστηματός μας αντιπροσωπεύεται από το ιδιοάνυσμα $\left|a\right\rangle$ του τελεστή.

Πριν από τη μέτρηση το μόνο που μπορούμε να πούμε είναι ότι η κατάσταση του συστήματός μας είναι γραμμικός συνδυασμός όλων των ιδιοανυσμάτων του τελεστή $\hat{A}$.

Είναι,δηλαδή, μια επαλληλία όλων των δυνατών αποτελεσμάτων που μπορούν να προκύψουν αν μετρηθεί το μέγεθος A.

Αυτό το οποίο δεχόμαστε είναι ότι η κατ'αυτόν τον τρόπο οριζόμενη κατάσταση εξαντλεί όλη την πληροφορία που μπορούμε να έχουμε για το υπό μελέτη σύστημα και το περιγράφει πλήρως. Δεχόμαστε, δηλαδή, ότι η φυσική δεν μπορεί να αναφερθεί σε χαρακτηριστικά ενός συστήματος τα οποία δεν μπορούν να μετρηθούν**. Η παραδοχή αυτή διατυπωμένη αλλιώς, μας λέει ότι τα ιδιοανύσματα του τελεστή πρέπει να σχηματίζουν ένα πλήρες σύνολο ανυσμάτων.**

Ας ξαναγυρίσουμε όμως στα μαθηματικά.

Ένας τρόπος να διαχειριστούμε το πρόβλημα (1.52) είναι να χρησιμοποιήσουμε κάποια βάση $\{|n\rangle\}$ και να γράψει $|a\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n |n\rangle$. Έτσι η (1.52) θα πάρει τη μορφή

$$\sum_{n=1}^{N} c_n \hat{A}|n\rangle = \lambda \sum_{n=1}^{N} c_n |n\rangle \;\Rightarrow\; \sum_{n=1}^{N} c_n \langle m|\hat{A}|n\rangle = \lambda \sum_{n=1}^{N} c_n \langle m|n\rangle = \lambda c_m$$

ή
$$\sum_{n=1}^{N} c_n A_{mn} = \lambda c_m \;\Rightarrow\; \sum_{n=1}^{N} c_n \left(A_{mn} - \lambda \delta_{mn}\right) = 0 \tag{1.53}$$

(δεν έχουμε κρατήσει τον δείκτη στις ιδιοτιμές αφού η ανάλυση αφορά οποιαδήποτε απ' αυτές). Τις εξισώσεις (1.53) μπορούμε να τις καταλάβουμε καλύτερα αν τις γράψομε μέσω πινάκων. Υποθέτοντας (για οικονομία) ότι $N = 2$:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \qquad \text{ή} \qquad \begin{pmatrix} A_{11}-\lambda & A_{12} \\ A_{21} & A_{22}-\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} c_1(A_{11}-\lambda) + c_2 A_{12} = 0 \\ c_1 A_{21} + c_2 (A_{22}-\lambda) = 0 \end{cases} \tag{1.54}$$

Το τελευταίο ομογενές σύστημα εξισώσεων έχει λύση μόνο αν η ορίζουσα των συντελεστών μηδενίζεται :

$$\det(A_{mn} - \lambda\delta_{mn}) = 0 \quad \text{ή} \quad (\text{για } N = 2\,) \quad (A_{11}-\lambda)(A_{22}-\lambda) - A_{12}A_{21} = 0 \tag{1.55}$$

Η απαίτηση αυτή οδηγεί σε μια *χαρακτηριστική εξίσωση* τάξης N από τη λύση της οποίας θα προσδιορίσουμε τις ιδιοτιμές. Γνωρίζοντάς τις μπορούμε να γυρίσουμε στις εξισώσεις (1.54) (ή (1.53) στη γενική περίπτωση) και να προσδιορίσουμε τον έναν από τους δύο συντελεστές c_1 , c_2 (ή όλους εκτός από έναν στη γενική περίπτωση). Αυτό, βέβαια, συμβαίνει γιατί το σύστημα (1.54) είναι αόριστο. Τον τελευταίο από τους συντελεστές μπορούμε να τον βρούμε ζητώντας τα αντίστοιχα ιδιοανύσματα να είναι κανονικοποιημένα:

$$\begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 1 .$$

Πρόβλημα στην πορεία αυτή θα συναντήσουμε αν εμφανιστούν ρίζες της (1.55) πολλαπλότητας μεγαλύτερης από1. Σε μια τέτοια περίπτωση στην ίδια ιδιοτιμή θα αντιστοιχούν περισσότερα από ένα ιδιοανύσματα τα οποία θα είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους. Θα έχουμε, δηλαδή, **εκφυλισμό**. Αλλά στο θέμα αυτό θα έλθουμε σε λίγο. Για την ώρα ας δούμε κάποιες από τις πτυχές αυτών που έχουμε ήδη πει με τη βοήθεια ενός παραδείγματος.

Ας πούμε ότι έχουμε τον ερμιτιανό τελεστή $\hat{H}$ ο οποίος δρα σε χώρο δύο διαστάσεων. Έστω $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ τα ανύσματα μίας βάσης στο χώρο αυτό. Στη βάση αυτή ο τελεστής αναπαρίσταται από τον πίνακα

$$\hat{H} \doteq \begin{pmatrix} 1 & e^{i\varphi} \\ e^{-i\varphi} & -1 \end{pmatrix} \tag{1.56}$$

Για να βρούμε τα ιδιοανύσματά του θα χρησιμοποιήσουμε την

$$\begin{pmatrix} 1 & e^{i\varphi} \\ e^{-i\varphi} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1-\lambda & e^{i\varphi} \\ e^{-i\varphi} & 1-\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0 \qquad (1.57)$$

Η χαρακτηριστική εξίσωση έχει τη μορφή

$$(A_{11}-\lambda)(A_{22}-\lambda) - A_{12}A_{21} = (1-\lambda)^2 - 1 = 0 \qquad (1.58)$$

και επομένως βρίσκουμε τις ιδιοτιμές $\lambda_+ = 2$ και $\lambda_- = 0$. Θα έχουμε τώρα να λύσουμε το σύστημα $(1-\lambda_\pm)c_1 + e^{i\varphi}c_2 = 0$, $e^{-i\varphi}c_1 + (1-\lambda_\pm)c_2 = 0$ το οποίο είναι αόριστο (οι δύο εξισώσεις είναι οι ίδιες) λόγω της (1.58). Αν χρησιμοποιήσουμε τη δεύτερη από αυτές θα πάρουμε $c_1 = -e^{i\varphi}(1-\lambda_\pm)c_2$ και επομένως τα ιδιοανύσματα του $\hat{H}$ θα αναπαρίστανται, στη βάση $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, από τις στήλες :

$$|+\rangle \doteq c_2 \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{και} \qquad |-\rangle \doteq c_2 \begin{pmatrix} -e^{i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (1.59)$$

Τον συντελεστή θα τον βρούμε από την απαίτηση της ορθοκανονικότητας:

$$\langle + | + \rangle = |c_2|^2 \,(e^{-i\varphi} \;\; 1)\begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix} = |c_2|^2\, 2 = 1$$

και επομένως διαλέγοντας $c_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$ έχουμε την πλήρη απάντηση.

Να θέσουμε εδώ την εύλογη ερώτηση: τα προηγούμενα αποτελέσματα τα βρήκαμε σε μια συγκεκριμένη βάση.

Τι θα γινόταν αν διαπραγματεύομασταν το ίδιο πρόβλημα σε μια άλλη βάση;

(ας πούμε την $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$)

Το πρώτο που θα άλλαζε, βέβαια, θα ήταν η μορφή του πίνακα ο οποίος αναπαριστά τον τελεστή $\hat{H}$. Με ποιό τρόπο; μ'αυτόν που βρήκαμε στη σχέση (1.47):

$$H'_{ij} = \sum_{k=1}^{2}\sum_{l=1}^{2} U^*_{ik} H_{kl} U_{lj} \qquad (1.60)$$

Εδώ τα στοιχεία H_{kl} διαβάζονται από την (1.56) και

$$(U_{ij}) = \begin{pmatrix} \langle 1|\alpha\rangle & \langle 1|\beta\rangle \\ \langle 2|\alpha\rangle & \langle 2|\beta\rangle \end{pmatrix} \qquad (1.61)$$

σύμφωνα με την (1.43). Επομένως, αν ξέρομε την αναπαράσταση ενός τελεστή σε κάποια βάση, τότε μπορούμε να βρούμε την αναπαράστασή του σε οποιαδήποτε άλλη βάση αρκεί να ξέρομε τον πίνακα μετασχηματισμού (1.61). Μπορούμε να δούμε αμέσως ότι οι ιδιοτιμές του τελεστή δεν θα αλλάξουν γιατί δεν πρόκειται να αλλάξει η χαρακτηριστική εξίσωση:

$$\det\left[H'_{ij} - \lambda\delta_{ij}\right] = \det\left[\sum_{k=1}^{2}\sum_{l=1}^{2} U^*_{ik}(H_{kl} - \lambda\delta_{kl})U_{lj}\right] = \det\left[H_{ij} - \lambda\delta_{ij}\right] = 0 \qquad (1.62)$$

Σο τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε:

$$\det\left(A^{-1}BA\right) = (\det A^{-1})(\det B)(\det A) = \det B = (\det A)^{-1}(\det B)(\det A)\,.$$

Το αποτέλεσμα (1.62) είναι σημαντικό : ***Οι ιδιοτιμές του τελεστή δεν εξαρτώνται από τη βάση στην οποία κάνουμε τον υπολογισμό τους***. Το αποτέλεσμα αυτό είναι κάτι που θα έπρεπε να περιμένουμε αφού οι ιδιοτιμές ορίζονται από την (1.52) και επομένως δεν έχουν αναφορά σε κάποια συγκεκριμένη βάση.

Λέμε, λοιπόν, ότι τα ανύσματα $|\pm\rangle$ είναι ιδιοανύσματα του τελεστή $\hat{H}$ με ιδιοτιμές $\lambda_\pm$ και αυτή η δήλωση είναι ανεξάρτητη από το σύστημα αναφοράς.

Τα εν λόγω ανύσματα, στη βάση $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ αναπαρίστανται από τα

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle 1|+\rangle \\ \langle 2|+\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{και} \qquad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle 1|-\rangle \\ \langle 2|-\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -e^{i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{1.63}$$

Στη βάση $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$ η αναπαράσταση αυτή θα αλλάξει και αυτό θα γίνει σύμφωνα με την (1.45):

$$|\pm\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle \alpha|\pm\rangle \\ \langle \beta|\pm\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \alpha|1\rangle & \langle \alpha|2\rangle \\ \langle \beta|1\rangle & \langle \beta|2\rangle \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \langle 1|\pm\rangle \\ \langle 2|\pm\rangle \end{pmatrix} \tag{1.64}$$

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει η περίπτωση που χρησιμοποιούμε ως βάση τα ιδιοανύσματα του τελεστή. Στη βάση αυτή ο τελεστής αναπαρίσταται από διαγώνιο πίνακα με τα στοιχεία της διαγωνίου να είναι οι ιδιοτιμές του τελεστή.

Πράγματι : Έστω $\hat{A}|a_i\rangle = \lambda_{a_i}|a_i\rangle$ οι ιδιοτιμές και τα ιδιοανύσματα του τελεστή.

Είναι προφανές ότι

$$A_{ij} = \langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle = \lambda_{a_i}\langle a_i|a_j\rangle = \lambda_{a_i}\delta_{ij} \tag{1.65}$$

Στο συγκεκριμένο παράδειγμα που συζητήσαμε ο τελεστής $\hat{H}$ αναπαρίσταται από τον πίνακα

$$\hat{H} \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Αν το σκεφθείτε λίγο τα παραπάνω θα καταλάβετε γιατί η δήλωση ότι τα ιδιοανύσματα ενός τελεστή απαρτίζουν μια πλήρη βάση είναι ισοδύναμη με τη δήλωση ότι *υπάρχει σύστημα συντεταγμένων στο οποίο ο τελεστής αναπαρίσταται από διαγώνιο πίνακα.* Επειδή, όπως έχουμε δει, η αλλαγή βάσης γίνεται μέσω του τελεστή $\hat{U}$ και της γενικής σχέσης (1.39) (στο συγκεκριμένο παράδειγμα που συζητάμε μέσω της (1.60)) είναι φανερό ότι αν υπάρχει ένας μοναδιακός μετασχηματισμός ο οποίος να μπορεί να διαγωνοποιήσει την αναπαράσταση ενός τελεστή τότε ο τελεστής αυτός έχει ένα πλήρες σύνολο ιδιοανυσμάτων. Μπορεί να αποδειχθεί ότι σε ένα χώρο πεπερασμένων διαστάσεων πάντα μπορεί να βρεθεί ένας τέτοιος μετασχηματισμός για έναν ερμιτιανό τελεστής ο οποίος, ως εκ τούτου, μας παρέχει βάσεις μέσω των ιδιοανυσμάτων του.

Κλείνομε παρατηρώντας ότι αν δύο τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{A}'$ συνδέονται με μετασχηματισμό ομοιότητας, δηλ. αν $\hat{A}' = \hat{U}^\dagger \hat{A}\hat{U}$, τότε έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές.

Πράγματι :

$$\hat{A}|a\rangle = \lambda_a|a\rangle \Rightarrow \hat{U}^\dagger\hat{A}|a\rangle = \lambda_a\hat{U}^\dagger|a\rangle \Rightarrow \hat{U}^\dagger\hat{A}(\hat{U}\hat{U}^\dagger)|a\rangle = \lambda_a\hat{U}^\dagger|a\rangle \Rightarrow$$
$$\Rightarrow \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}(\hat{U}^\dagger|a\rangle) = \lambda_a(\hat{U}^\dagger|a\rangle) \Rightarrow \hat{A}'|a'\rangle = \lambda_a|a'\rangle \tag{1.66}$$

όπου γράψαμε $|a'\rangle = \hat{U}^\dagger|a\rangle$.

Αν, μάλιστα, οι τελεστές $\hat{A}$ και $\hat{A}'$ είναι ερμιτιανοί ο μετασχηματισμός ομοιότητας διαβάζεται και αντίστροφα : $\hat{A} = \hat{U}^\dagger\hat{A}'\hat{U}$. Σε μια τέτοια περίπτωση λέμε (στην αργκό της Κβαντομηχανικής) ότι οι εν λόγω τελεστές αναπαριστούν *μοναδιακώς* ***ισοδύναμα παρατηρήσιμα μεγέθη*** *(unitary equivalent observables)*.

Ας δούμε όλο το σκηνικό με το παράδειγμα ενός σωματίου με spin $1/2$.

Έστω ότι ο τελεστής $\hat{A}$ είναι ο τελεστής $\hat{S}_z$ και ο τελεστής $\hat{A}'$, ο $\hat{S}_x$. Όπως είναι προφανές, η φύση δεν έχει κάποια ιδιαίτερη προτίμηση στη συγκεκριμένη ονομασία των αξόνων. Αν κάποιος μετρήσει την προβολή του spin στον άξονα z θα βρεί $\pm\hbar/2$ και το ίδιο ακριβώς θα βρεί αν μετρήσει την προβολή του στον άξονα x: *Οι ιδιοτιμές των δύο τελεστών είναι οι ίδιες*. Εν τούτοις οι τελεστές κάθε άλλο παρά ταυτίζονται αφού δεν μετατίθενται μεταξύ τους. *Συνδέονται όμως με έναν* *μετασχηματισμό ομοιότητας*. Είναι αυτός που θα προκύψει αν στρέψουμε το σύστημα συντεταγμένων έτσι ώστε οι άξονες z και x αλλάξουν αμοιβαία θέση[3]:

$$\hat{U} = \exp(-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{S}_x)\exp(-\frac{i}{\hbar}\frac{\pi}{2}\hat{S}_y) .$$

Χρησιμοποιώντας τους πίνακες του Pauli ο παραπάνω τελεστής αναπαρίσταται από τον πίνακα

$$\hat{U} \doteq \frac{-i}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Με τη βοήθεια του μπορείτε εύκολα να διαπιστώσετε ότι $\hat{U}^\dagger\hat{S}_z\hat{U} = \hat{S}_x$ και $\hat{U}^\dagger\hat{S}_x\hat{U} = \hat{S}_z$. Επομένως οι εν λόγω τελεστές αντιπροσωπεύουν *μοναδιακώς ισοδύναμα παρατηρήσιμα μεγέθη*. Ο μοναδιακός τελεστής σας λέει επίσης (δείτε και τη συζήτηση στην παράγραφο 4) πώς συνδέονται τα ιδιοανυσματά τους : $\left|s_x = \pm 1/2\right\rangle = \hat{U}^\dagger\left|s_z = \pm 1/2\right\rangle$.

[3] Αυτό γίνεται με στροφή κατά *π/2* γύρω από τον άξονα *y* και στη συνέχεια στροφή κατά *π* γύρω από τον άξονα *x*.