

1. Reprezentáció elmélet

1.1. Vektorok és operátorok mátrix formában

A vektorok és az operátorok mátrixok formájában is felírhatók. A végtelen dimenziós 'ket' vektoroknak végtelen sok sort tartalmazó oszlop mátrix felel meg. A végtelen dimenziós vektortérben értelmezett operátorok végtelen sok sort és oszlopot tartalmazó négyzetes mátrixok lesznek. A vektortérben egy megfigyelhető fizikai mennyiséghez rendelt operátor sajátvektoraiból alkotott bázis meghatároz egy reprezentációt. A választott reprezentációban egy vektort a bázisvektorokra való vetületekkel jellemezzük. Az ortonormált bázisok esetén előnyös ezen vetületeket egy oszlop mátrix formában rendezni. Meglátjuk, hogy így eljárva az operátorok vektorokra való hatása és a vektorokkal illetve operátorokkal végzett műveletek egyszerű mátrixok közti algebrai műveletekké válnak.

Legyen $\hat{Q}$ egy megfigyelhető mennyiség, és ennek sajátérték egyenlete: $\hat{Q}|q_i\rangle = q_i|q_i\rangle$. Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy a sajátértékek nem elfajultak. A $|q_1\rangle, |q_2\rangle, \dots, |q_i\rangle, \dots$ vektorok a $\{Q\}$ reprezentáció bázisvektora. Ezen vektorokra igaz, hogy:

$$\langle q_i | q_j \rangle = \delta_{ij} \quad (1)$$

$$\hat{P}_\epsilon = \sum_{i=1}^{\infty} |q_i\rangle \langle q_i| = \hat{I} \quad (2)$$

Legyen $|v\rangle \in \epsilon$; $|v\rangle = \hat{P}_\epsilon |v\rangle = \sum_{i=1} |q_i\rangle \langle q_i | v \rangle$, vagyis $|v\rangle = \hat{P}_\epsilon |v\rangle = \sum_{i=1} \langle q_i | v \rangle |q_i\rangle$, ahol a $\langle q_i | v \rangle$ a $|v\rangle$ vektor koordinátái a Q reprezentációban. A $|v\rangle$ vektort felírhatjuk tehát egy oszlop mátrixsal.

$$|v\rangle \longrightarrow (v) = \begin{pmatrix} \langle q_1 | v \rangle \\ \langle q_2 | v \rangle \\ \dots \\ \langle q_i | v \rangle \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_i \\ \dots \end{pmatrix} \quad (3)$$

Az ϵ^* duális térben $\langle v| = \langle v | \hat{P}_\epsilon = \sum_i \langle v | q_i \rangle \langle q_i| = \sum_i \langle q_i | v \rangle \langle q_i| = \sum_i \langle q_i | \langle q_i | v \rangle^* = \sum_i \langle q_i | v_i^*$. Ahhoz, hogy a 'ket' és 'bra' vektorok között megtartsuk a létező konjugálási relációt a mátrixokra vonatkozóan is, a bra vektorokat sorvektorral jelöljük: $\langle v| \longrightarrow (v)^+ = [\langle q_1 | v \rangle^*, \langle q_2 | v \rangle^*, \dots, \langle q_i | v \rangle^*, \dots] = [v_1^*, v_2^*, \dots, v_i^*, \dots]$. A 'bra' vektorhoz a (v) konjugált mátrixát rendezjük hozzá tehát, ami a (v^+) .

Lássuk most hogyan alakul az operátorok mátrix alakja. Legyen $\hat{A}$ egy lineáris operátor; $\hat{A} = \hat{P}_\epsilon \hat{A} \hat{P}_\epsilon = \sum_{i,j} |q_i\rangle \langle q_i | \hat{A} | q_j \rangle \langle q_j| = \sum_{i,j} |q_i\rangle A_{ij} \langle q_j|$. Az $A_{ij} = \langle q_i | \hat{A} | q_j \rangle$ tagok meghatározzák az $\hat{A}$ operátort a választott Q reprezentációban.

$$\hat{A} \longrightarrow (A) = \begin{pmatrix} \langle q_1 | \hat{A} | q_1 \rangle & \langle q_1 | \hat{A} | q_2 \rangle & \dots & \langle q_1 | \hat{A} | q_i \rangle & \dots \\ \langle q_2 | \hat{A} | q_1 \rangle & \langle q_2 | \hat{A} | q_2 \rangle & \dots & \langle q_2 | \hat{A} | q_i \rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle q_i | \hat{A} | q_1 \rangle & \langle q_i | \hat{A} | q_2 \rangle & \dots & \langle q_i | \hat{A} | q_i \rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = \quad (4)$$

$$= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1i} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2i} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ii} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (5)$$

Tulajdonságok:

→ a $\hat{Q}$ a Q saját-reprezentációban diagonális, $\langle q_i | q_j \rangle = q_j \langle q_i | q_j \rangle = q_j \delta_{ij}$

→ az operátorok és vektorok közötti műveleteknek a megfelelő mátrixok közti operációk felelnek meg:

- a konjugálás (adjungálás) a mátrixok konjugálásának felel meg $\hat{A} \longrightarrow (A) = A_{ij}$, $\hat{A}^+ \longrightarrow (A)^+ = A_{ji}^*$
- Az összeadásnak a mátrixok összeadása felel meg: $\lambda_1 \hat{A} + \lambda_2 \hat{B} \longrightarrow \lambda_1(A) + \lambda_2(B)$
- A szorzásnak a mátrixok szorzása felel meg: $\langle m | \lambda_1 \hat{A} + \lambda_2 \hat{B} | n \rangle \longrightarrow (m)(\lambda_1(A) + \lambda_2(B))(n)$;

$$\langle w | v \rangle \longrightarrow (w)(v) = [w_1^*, w_2^*, \dots, w_i^*, \dots] \cdot \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_i \\ \dots \end{bmatrix} = \sum_i w_i^* v_i \quad (6)$$

Példaképpen vázoljuk, hogyan bizonyíthatók ezek a kijelentések: $\langle w | v \rangle = \langle w | \hat{P}_Q | v \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle w | q_i \rangle \langle q_i | v \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} w_i^* v_i$. Ezt hasonló módon kell alkalmazni operátorokra is: $\langle q_i | \hat{A} \hat{B} | q_j \rangle = \langle q_i | \hat{A} \hat{P}_Q \hat{B} | q_j \rangle = \sum_k \langle q_i | \hat{A} | q_k \rangle \langle q_k | \hat{B} | q_j \rangle = \sum_k A_{ik} A_{kj}$. Az $\hat{A} \hat{B}$ mátrix tagjait az $\hat{A}$ és a $\hat{B}$ mátrixok szorzásával kapjuk meg.

Egy adott reprezentációban a mátrix-formalizmust használva az operátorok és vektorok közötti műveletek tehát egyszerűen definiálhatók és egyszerűen végezhetők el.

1.2. Reprezentáció-csere

A reprezentáció-csere áttérést jelent egyik reprezentációról egy másikra. Minden megfigyelhetőhöz tartozó bázisvektor sokaság egy reprezentációt határoz meg. A feladat: ismerve a vektorok illetve operátorok mátrixát egy adott

reprezentációban, meghatározni a nekik megfelelő mátrixokat egy másik reprezentációban.

Legyen két $(\{N\}$ és $\{Q\})$ megfigyelhető által meghatározott reprezentációnk:

$$\hat{N}|n_i\rangle = n_i|n_i\rangle \quad (7)$$

$$\hat{Q}|q_k\rangle = q_k|q_k\rangle \quad (8)$$

Tekintsük a diszkrét és nem elfajult spektrumok esetét.

$$\langle n_i|n_j\rangle = \delta_{ij} \quad (9)$$

$$\hat{P}_N = \sum_i |n_i\rangle\langle n_i| = \hat{I} \quad (10)$$

$$\langle q_i|q_j\rangle = \delta_{ij} \quad (11)$$

$$\hat{P}_Q = \sum_i |q_i\rangle\langle q_i| = \hat{I} \quad (12)$$

Az egyik reprezentáció bázisvektorai kifejezhetők a másik reprezentáció vektorainak segítségével:

$$|n_i\rangle = \sum_k \langle q_k|n_i\rangle |q_k\rangle \quad (13)$$

$$|q_t\rangle = \sum_i |n_i\rangle\langle n_i|q_t\rangle \quad (14)$$

A $\langle q_k|n_i\rangle$ tagok egy mátrixnak az elemei:

$$(T) = \begin{pmatrix} \langle q_1|n_1\rangle & \langle q_1|n_2\rangle & \dots & \langle q_1|n_i\rangle & \dots \\ \langle q_2|n_1\rangle & \langle q_2|n_2\rangle & \dots & \langle q_2|n_i\rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle q_i|n_1\rangle & \langle q_i|n_2\rangle & \dots & \langle q_i|n_i\rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (15)$$

Az $\langle n_i|q_t\rangle$ tagok az ezzel adjungált mátrixnak lesznek az elemei:

$$(T^+) = \begin{pmatrix} \langle n_1|q_1\rangle & \langle n_1|q_2\rangle & \dots & \langle n_1|q_i\rangle & \dots \\ \langle n_2|q_1\rangle & \langle n_2|q_2\rangle & \dots & \langle n_2|q_i\rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle n_i|q_1\rangle & \langle n_i|q_2\rangle & \dots & \langle n_i|q_i\rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (16)$$

Felhasználva, hogy

$$\sum_i \langle q_t | n_i \rangle \langle n_i | q_s \rangle = \langle q_t | q_s \rangle = \delta_{ts} \quad (17)$$

$$\sum_s \langle n_i | q_s \rangle \langle q_s | n_j \rangle = \langle n_i | n_j \rangle = \delta_{ij}, \quad (18)$$

Azonnal belátható a (T) és (T^+) mátrixokról, hogy:

$$TT^+ = T^+T = 1 \quad (19)$$

Vagyis a T egy unitér mátrix (de nem operátor, mivel a mátrixelemei különböző bázisokon értelmezett vektorok skaláris szorzataiból áll). Legyen $|v\rangle \in \epsilon$.

$$(v)_N = \begin{pmatrix} \langle n_1 | v \rangle \\ \langle n_2 | v \rangle \\ \dots \\ \langle n_i | v \rangle \\ \dots \end{pmatrix}; (v)_Q = \begin{pmatrix} \langle q_1 | v \rangle \\ \langle q_2 | v \rangle \\ \dots \\ \langle q_i | v \rangle \\ \dots \end{pmatrix} \quad (20)$$

$$|v\rangle = \sum_i |n_i\rangle \langle n_i | v \rangle \quad (21)$$

$$\langle q_s | v \rangle = \sum_i \langle q_s | n_i \rangle \langle n_i | v \rangle \quad (22)$$

$$\Rightarrow (v)_Q = T \cdot (v)_N \quad (23)$$

$$\langle v | = \sum_i \langle v | n_i \rangle \langle n_i | \quad (24)$$

$$\langle v | q_s \rangle = \sum_i \langle v | n_i \rangle \langle n_i | q_s \rangle \quad (25)$$

$$\Rightarrow (v^+)_Q = (v^+)_N \cdot T^+ \quad (26)$$

Látható tehát hogyan transzformáljuk egy tetszőleges 'ket' és 'bra' vektor mátrixalakját egyik reprezentációból a másikba a (T) mátrix segítségével.

1.3. Az operátorok transzformációja

Legyen $\hat{L}$ egy lineáris operátor. $\hat{L} = \hat{P}_\epsilon \hat{L} \hat{P}_\epsilon = \sum_{i,j} |n_j\rangle \langle n_j | \hat{L} | n_i \rangle \langle n_i |$. Ekkor: $\langle q_s | \hat{L} | q_t \rangle = \sum_{i,j} \langle q_s | n_j \rangle \langle n_j | \hat{L} | n_i \rangle \langle n_i | q_t \rangle$, vagyis $L_{st}^Q = \sum_{i,j} T_{sj} L_{ji}^N T_{it}^+$. Mátrix alakban felírva:

$$(L)_Q = T \cdot (L)_N \cdot T^+ \quad (27)$$

Így transzformálódnak tehát a $\langle T \rangle$ mátrix segítségével az operátorok. Egy fontos megjegyzést tehetünk itt: egy operátor sajátérték-egyenletének a megoldása egy adott $\{N\}$ reprezentációban $\Leftrightarrow$ megkeresni azt a $\langle T \rangle$ reprezentáció-transzformációt (reprezentációcsere) amely során az új reprezentációban az **operátor mátrixa diagonális**.

A T reprezentációcsere mátrixa a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

- a sorok tagjai a $\langle q_s |$ 'bra' vektorokat adják az $\{N\}$ reprezentációban:
 $(q_s^+) = [\langle q_s | n_1 \rangle \langle q_s | n_2 \rangle \dots \langle q_s | n_i \rangle \dots]$
- az oszlopok tagjai az $|n_i\rangle$ 'ket' vektorokat adják a $\{Q\}$ reprezentációban:

$$(n_i)_Q = \begin{bmatrix} \langle q_1 | n_i \rangle \\ \langle q_2 | n_i \rangle \\ \dots \\ \langle q_i | n_i \rangle \\ \dots \end{bmatrix}$$

1.4. Vektorok tenzoriális szorzata

Ahhoz, hogy ezt a műveletet megértsük, tekintsünk először egy konkrét példát. Legyen egy elektronunk amelynek az állapotát úgy a spinváltozók, mint az orbitális változók határozzák meg. Az orbitális változók vektortere legyen ϵ_o (végtelen dimenziós vektortér) és a spinváltozók vektortere legyen ϵ_s (két dimenziós vektortér, melynek bázisvektorait $|+\rangle$ és $|-\rangle$ -al jelöljük). Az elektron stacionárius állapotát az ϵ_o téren jellemzzék az $|\epsilon_i\rangle$ típusú vektorok, az ϵ_s téren meg a $|\pm\rangle$ típusú vektorok. Az elektron teljes állapotát az $|\epsilon_i\rangle$ és a $|\pm\rangle$ típusú vektorok együttesen jellemzik. Ezáltal a teljes állapotokat tartalmazó vektortérnek tartalmaznia kell a két (ϵ_o és ϵ_s) vektorterek állapotainak az összes lehetséges kombinációit. Azt mondjuk, hogy a teljes állapotokat tartalmazó ϵ vektortér az ϵ_o és ϵ_s vektorterek *tenzoriális szorzata*—.

Matematikailag és általánosan értelmezve: ha van egy ϵ_1 (d_1 dimenziós) vektortérünk és egy ϵ_2 (d_2 dimenziós) vektortérünk, értelmezünk a két vektortér elemei között egy műveletet amely eredményeképpen egy $d_1 \cdot d_2$ dimenziós vektortérnek az elemét kapjuk

$$|q^{(1)}\rangle \in \epsilon_1; |r^{(2)}\rangle \in \epsilon_2 \quad (28)$$

$$|q^{(1)}\rangle, |r^{(2)}\rangle \longrightarrow |q^{(1)}\rangle \otimes |r^{(2)}\rangle \in \epsilon \quad (29)$$

úgy, hogy a következő tulajdonságok igazak legyenek:

$$1. \quad (\lambda |q^{(1)}\rangle) \otimes |r^{(2)}\rangle = \lambda(|q^{(1)}\rangle \otimes |r^{(2)}\rangle) = |q^{(1)}\rangle \otimes (\lambda |r^{(2)}\rangle) \quad (30)$$

$$2. \quad |q^{(1)}\rangle \otimes (|r^{(2)}\rangle + |v^{(2)}\rangle) = |q^{(1)}\rangle \otimes |r^{(2)}\rangle + |q^{(1)}\rangle \otimes |v^{(2)}\rangle \quad (31)$$

A fentiek alapján bevezetett műveletet tenzoriális szorzatnak nevezzük és azt mondjuk, hogy az ϵ vektortér az ϵ_1 és ϵ_2 vektorterek tenzoriális szorzata. Megjegyezzük itt, hogy az 1^o és 2^o tulajdonságok azt is jelentik, hogy ha képezzük az egyik vektortér egy lerögzített elemének a szorzatát a másik tér összes elemeivel, akkor a második vektortérrel izomorf teret generálunk.

Általában a $|q^{(1)}\rangle \otimes |v^{(2)}\rangle$ elemet egyszerűen $|q^{(1)}\rangle |v^{(2)}\rangle$ vagy még egyszerűbben $|q^{(1)}v^{(2)}\rangle$ formában jelöljük.

Most lássuk, hogy hatnak az ϵ_1 és ϵ_2 vektorterek értelmezett operátorok az $\epsilon = \epsilon_1 \otimes \epsilon_2$ vektortéren. Az ϵ_1 és ϵ_2 vektorterek értelmezett bármely lineáris operátornak megfelel egy operátor az $\epsilon_1 \otimes \epsilon_2$ vektortéren amely a következő tulajdonságoknak tesz eleget. Ha $|a^{(1)}\rangle \in \epsilon_1$ és $|a^{(2)}\rangle \in \epsilon_2$, és

$$\hat{A}^{(1)}|a^{(1)}\rangle = |b^{(1)}\rangle; \hat{A}^{(2)}|a^{(2)}\rangle = |b^{(2)}\rangle, \quad (32)$$

akkor:

$$(\hat{A}^{(1)} \otimes \hat{A}^{(2)})|a^{(1)}a^{(2)}\rangle = \hat{A}^{(1)}|b^{(1)}\rangle \otimes \hat{A}^{(2)}|b^{(2)}\rangle; \quad (33)$$

Nyilvánvalóan minden $\hat{A}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)}$ operátor kommutál minden $\hat{I}^{(1)} \otimes \hat{A}^{(2)}$ operátorral.

Értelmezzük továbbá a skaláris szorzatot az $\epsilon = \epsilon_1 \otimes \epsilon_2$ vektortéren a következő tulajdonságokkal. Legyen $|a^{(1)}\rangle$ és $|b^{(1)}\rangle \in \epsilon_1$, ugyanakkor $|a^{(2)}\rangle$ és $|b^{(2)}\rangle \in \epsilon_2$. Ilyen esetben igaz kell legyen, hogy:

$$(\langle b^{(1)}| \otimes \langle b^{(2)}|) \cdot (|a^{(1)}\rangle \otimes |a^{(2)}\rangle) = \langle b^{(1)}|a^{(1)}\rangle \cdot \langle b^{(2)}|a^{(2)}\rangle \quad (34)$$

1.5. Operátorok és vektorok unitér transzformációja

Lássuk most hogyan értelmezhető a reprezentációcsere egy operátor segítségével.

Legyen $\hat{U}$ egy lineáris operátor. Legyenek $|n_i\rangle$ és $|q_i\rangle$ a két reprezentáció bázisvektorai.

Az $\hat{U}$ operátort úgy értelmezzük, mint:

$$|n_i\rangle = \hat{U}|q_i\rangle \quad (35)$$

Az $\hat{U}$ felírható mint:

$$\hat{U} = \hat{U} \left(\sum_i |q_i\rangle \langle q_i| \right) = \sum_i \hat{U} |q_i\rangle \langle q_i| = \sum_i |n_i\rangle \langle q_i| \quad (36)$$

$$\hat{U}^+ = \sum_i |q_i\rangle \langle n_i| \quad (37)$$

$$(38)$$

Látható, hogy,

$$\hat{U}\hat{U}^+ = \sum_{i,j} |n_i\rangle \langle q_i| q_j \rangle \langle n_j| = \sum_{i,j} |n_i\rangle \delta_{ij} \langle n_j| = \sum_{i,j} |n_i\rangle \langle n_i| = \hat{I} \quad (39)$$

$$\hat{U}^+\hat{U} = \sum_{i,j} |q_i\rangle \langle n_i| n_j \rangle \langle q_j| = \sum_{i,j} |q_i\rangle \delta_{ij} \langle q_j| = \sum_{i,j} |q_i\rangle \langle q_i| = \hat{I}, \quad (40)$$

vagyis $\hat{U}$ egy unitér operátor! Ha képezhető a fenti módon értelmezett unitér operátor, akkor vizsgáljuk most ezen operátornak a vektorokra való hatását. Legyen $|v\rangle$ egy 'ket' vektor. Ilyen esetben

$$|v\rangle = \sum_i |n_i\rangle \langle n_i|v\rangle \quad (41)$$

$$|v\rangle = \sum_i |q_i\rangle \langle q_i|v\rangle, \quad (42)$$

és

$$\hat{U}|v\rangle = \sum_i |n_i\rangle \langle q_i|v\rangle. \quad (43)$$

A fenti egyenlet alapján látható, hogy az $\hat{U}|v\rangle$ vektor $[N]$ reprezentációbeli vektorelemei egyenlők a $|v\rangle$ vektor $[Q]$ reprezentációbeli elemeivel. Az $\hat{U}$ operátor tehát a két reprezentáció bázisvektorait egymásba transzformálja, és a vektorokat elforgatja a vektortérben.

Elemezzük most a (T) mátrixsal és az $\hat{U}$ -val való transzformációk közötti különbséget:

a [T]-vel való transzformálás azzal ekvivalens, hogy elforgatjuk a koordinátarendszert.

A vektoroknak megváltoznak ezáltal a koordinátái.

az $[\hat{U}]$ -val való transzformáció során elforgatjuk a vektorokat úgy, hogy az $\hat{U}$ -t meghatározó két bázis vektorait egymásba forgatjuk (ez egy valódi operátor).

Lássuk most ha a vektortér elemeire alkalmazzuk az $\hat{U}$ transzformációt, hogyan transzformálódnak a vektortéren értelmezett operátorok. Tekintsünk egy $\hat{L}$ operátort amelyre igaz, hogy:

$$\hat{L}|v\rangle = |t\rangle \quad (44)$$

Ilyen esetben az $\hat{U}$ -val transzformált vektortérre igaz kell legyen, hogy:

$$\hat{L}'(\hat{U}|v\rangle) = \hat{U}|t\rangle \quad (45)$$

Figyelembe véve, hogy $\hat{U}$ unitér operátor, a (45) egyenletet $\hat{U}^+$ -al balról beszorozva, azonnal adódik, hogy:

$$\hat{L}' = \hat{U}\hat{L}\hat{U}^+ = \sum_{i,j} |n_i\rangle \langle q_i|\hat{L}|q_j\rangle \langle n_j| \quad (46)$$

ahol $\hat{L} = \sum_{i,j} |q_i\rangle \langle q_i|\hat{L}|q_j\rangle \langle q_j|$. Látható, hogy az operátorok transzformációja során, akár csak a vektorok esetén is, az $[N]$ reprezentációbeli mátrixelemek egyenlők lesznek a $[Q]$ reprezentációbeliakkal.

Néhány azonnali tulajdonság:

- Az unitér operátorokkal való transzformáció során a skaláris szorzat változatlan lesz. Ha $|v'\rangle = \hat{U}|v\rangle$; $|w'\rangle = \hat{U}|w\rangle$, akkor: $\langle w'|v'\rangle = \langle w|\hat{U}^\dagger\hat{U}|v\rangle = \langle w|v\rangle$
- Két unitér operátor szorzata egy újabb unitér operátor, vagyis ha $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$; $\hat{W}^\dagger\hat{W} = \hat{I} \Rightarrow \hat{U}\hat{W} = \hat{V}$ is unitér. A bizonyítás azonnali: $\hat{V}^\dagger = (\hat{U}\hat{W})^\dagger = \hat{W}^\dagger\hat{U}^\dagger = \hat{W}^{-1}\hat{U}^{-1} = (\hat{U}\hat{W})^{-1} = \hat{V}^{-1} \Rightarrow \hat{V}$ unitér.
- Az $\hat{U}$ -val végzett transzformáció egy vektortérbeli forgatásnak felel meg,

1.6. Elemi (infinitézimális) unitér transzformációk

Ha az $\hat{U}$ operátor infinitézimálisan közel van az $\hat{I}$ identikus transzformációhoz (operátorhoz), akkor $\hat{U}$ egy infinitézimális transzformáció. Egy ilyen elemi unitér transzformáció általános alakja:

$$\hat{U} = \hat{I} + i\epsilon\hat{F} \quad (47)$$

ahol $i^2 = -1$ és ϵ egy elemien kis valós szám (ezt a transzformáció paraméterének nevezzük). Azt mondjuk, hogy $\hat{F}$ a transzformáció generátora. Azonnal belátható, hogy $\hat{U}$ unitér operátor, ha $\hat{F}$ egy hermitikus operátor.

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = (\hat{I} + i\epsilon\hat{F})(\hat{I} - i\epsilon\hat{F}^\dagger) = \hat{I} - i\epsilon(\hat{F}^\dagger - \hat{F}) + \epsilon^2(\hat{F}\hat{F}^\dagger) = \hat{I} \quad (48)$$

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = (\hat{I} - i\epsilon\hat{F}^\dagger)(\hat{I} + i\epsilon\hat{F}) = \hat{I} - i\epsilon(\hat{F}^\dagger - \hat{F}) + \epsilon^2(\hat{F}^\dagger\hat{F}) = \hat{I} \quad (49)$$

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F} \Rightarrow \hat{F} \text{ hermitikus} \quad (50)$$

Egy tetszőleges $|v\rangle$ vektorra ez az elemi operátor a következőképpen hat:

$$|v'\rangle = \hat{U}|v\rangle = |v\rangle + i\epsilon\hat{F}|v\rangle = |v\rangle + \delta|v\rangle \quad (51)$$

$$\delta|v\rangle = i\epsilon\hat{F}|v\rangle \quad (52)$$

Ezen elemi $\hat{U}$ unitér operátor hatása a vektortéren értelmezett operátorokra:

$$\hat{L}' = \hat{U}\hat{L}\hat{U}^\dagger = \hat{L} + i\epsilon(\hat{F}\hat{L} - \hat{L}\hat{F}) = \hat{L} + \delta\hat{L} \quad (53)$$

$$\delta\hat{L} = i\epsilon[\hat{F}, \hat{L}] \quad (54)$$

Látható, hogy a $|v\rangle$ vektor invariáns az $\hat{U}$ -ra, ha $\hat{F}|v\rangle = 0$. Az $\hat{L}$ operátor invariáns az $\hat{U}$ -ra, ha $[\hat{F}, \hat{L}] = 0$.

1.7. Házi feladat

1. Határozzuk meg az $\alpha, \beta, \gamma, \mu$ paraméterek értékét úgy, hogy a

$$P = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & i\frac{\sqrt{2}}{3} \\ 0 & -i\frac{\sqrt{2}}{3} & \mu \end{bmatrix} \text{ mátrix egy vetítő operátor legyen. Ebben az esetben határozzuk meg a sajátértékeket és a sajátvektorokat is.}$$

2. Tekintsük a $\hat{Q}$ operátort melynek megfelelő mátrixa egy adott reprezentációban:

$$Q = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

- Bizonyítsuk be, hogy $\hat{Q}$ hermitikus
- Határozzuk meg azon T transzformációt amelyre $\hat{Q}$ diagonális lesz