

МАТЕМАТИЧКА ГИМНАЗИЈА, БЕОГРАД

Хилбертови простори и њихова примена у квантној механици

матурски рад из математике

Ученик: Никола Стефановић IVa

Ментор: др Божидар Јовановић

Београд, јун 2026.

Садржај

1	Абстракт	2
2	Векторски и Хилбертов простор	3
2.1	Комплексни векторски простори и димензионалност	3
2.2	Унутрашњи производ, норма и ортогоналност	6
2.3	Ортонормалне базе и развој вектора по бази	9
2.4	Хилбертов простор и појам потпуности	11
2.5	Простор ℓ^2 као први бесконачнодимензионални пример	13
3	Бра-кет нотација и дуални простор	15
3.1	Линеарни функционали и дуални простор	15
3.2	Рисова теорема	17
3.3	Диракова нотација: кет, бра и резолуција идентитета	18
3.4	Пројектори и ортогоналне пројекције	20
4	Оператори у Хилбертовом простору	22
4.1	Линеарни оператори и адјунговани оператор	22
4.2	Самоадјунговани (Хермитски) оператори	24
4.3	Унитарни и позитивни оператори	25
4.4	Сопствене вредности и сопствени вектори	27
4.5	Сопствена база, дијагонализација и спектрална декомпозиција	31
5	Хилбертов простор као језик квантне механике	36
5.1	Стања квантног система	36
5.2	Опсервабле као самоадјунговани оператори	38
5.3	Квантно мерење и вероватноће	40
5.4	Очекивана вредност, дисперзија и комутатори	43
5.5	Хајзенбергова релација неодређености	45
6	Закључак	48
7	Литература	49

1 Абстракт

У овом раду разматра се улога Хилбертових простора у математичкој формулацији квантне механике.

Циљ овог рада јесте да, полазећи од основних појмова линеарне алгебре, дођемо до математичког језика у коме се природно формулишу основни принципи квантне механике.

Полазимо од комплексних векторских простора, производа, норме, ортогоналности, а затим уводимо линеарне функционале, bra-ket нотацију и пројекторе. Посебно ћемо се посветити операторима у Хилбертовим просторима, јер се управо преко њих формулишу физичке величине у квантној механици. Обрадићемо самоадјуговане, унитарне и позитивне операторе као и њихове сопствене вредности, векторе, дијагонализацију и спектралну декомпозицију.

За крај нам је остало да све што је обрађено добије конкретну примену у квантној механици и то оно што радимо у глави 5. Видећемо како се могући резултати мерења јављају као сопствене вредности самоадјунгованих оператора, како се вероватноће тих резултата добијају пројекцијом стања на одговарајуће сопствене векторе, и како се преко очекиване вредности, дисперзије и комутатора формулишу основне особине квантног мерења, укључујући Хајзенбергову релацију неодређености.

2 Векторски и Хилбертов простор

Пре увођења Хилбертових простора потребно је најпре размотрити комплексне векторске просторе, јер они представљају природан математички оквир квантне механике. За разлику од реалних векторских простора, комплексни простори природно омогућавају опис амплитуда и фаза квантних стања, а управо су релативне фазе суштинске за појаве као што је интерференција. Осим тога, и сама Шредингерова једначина је комплексна, па њена решења природно припадају комплексном векторском простору. Зато се у квантној механици полази од комплексних, а не само реалних векторских простора.

2.1 Комплексни векторски простори и димензионалност

Дефиниција: Нека је $(\mathbb{F}, +, \cdot)$ поље, при чему је $\mathbb{F} = \mathbb{R}$ или $\mathbb{F} = \mathbb{C}$. Векторски простор над пољем $\mathbb{F}$ је непразан скуп V са две операције, сабирањем вектора и множењем вектора скаларом, који задовољава следеће аксиоме:

1. $(\forall u, v \in V) u + v \in V$
2. $(\forall u \in V)(\forall a \in \mathbb{F}) au \in V$
3. $(\forall u, v \in V) u + v = v + u$ (сабирање је комутативно)
4. $(\forall u, v, w \in V) u + (v + w) = (u + v) + w$ (сабирање је асоцијативно)
5. $(\forall a, b \in \mathbb{F})(\forall u \in V) (ab)u = a(bu)$ (множење скалара је асоцијативно)
6. $(\exists \mathbf{0} \in V)(\forall u \in V) \mathbf{0} + u = u$ (неутрални елемент за сабирање)
7. $(\exists \mathbf{1} \in \mathbb{F})(\forall u \in V) \mathbf{1}u = u$ (неутрални елемент за множење)
8. $(\forall u \in V)(\exists (-u) \in V) u + (-u) = \mathbf{0}$ (супротан вектор)
9. $(\forall a \in \mathbb{F})(\forall u, v \in V) a(u + v) = au + av$ (дистрибутивност по векторима)
10. $(\forall a, b \in \mathbb{F})(\forall v \in V) (a + b)v = av + bv$ (дистрибутивност по скаларима)

Ако је поље скалара $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, онда V називамо комплексним векторским простором.

Из наведене дефиниције следе неке непосредне последице аксиома векторског простора, које нећемо посебно доказивати:

1. Нула-вектор $\mathbf{0}$ је јединствен.
2. $(\forall v \in V) 0v = \mathbf{0}$.
3. $(\forall a \in \mathbb{F}) a\mathbf{0} = \mathbf{0}$.
4. $(\forall v \in V)$ супротан вектор датог вектора v је јединствен и означава се са $-v$.
5. $(\forall v \in V) (-1)v = -v$.
6. $(\forall v \in V) -(-v) = v$.
7. $(\forall a \in \mathbb{F})(\forall v \in V) a(-v) = -(av)$.

$$8. (\forall a \in \mathbb{F})(\forall v \in V) (-a)v = -(av).$$

Наведимо неколико основних примера векторских простора.:

Пример 1: Скуп свих N -компонентних вектора

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}, \quad a_i \in \mathbb{R}, \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

чини реалан векторски простор. Сабирање вектора и множење скаларом дефинишу се по компонентама.

Овај простор се обично означава са $\mathbb{R}^N$. Аналогно, могли смо уместо $\mathbb{R}$ узети скуп $\mathbb{C}$, и у том случају ово постаје пример комплексног векторског простора $\mathbb{C}^N$.

Пример 2: Нека је $P(\mathbb{F})$ скуп свих полинома облика

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n,$$

где су $a_0, a_1, \dots, a_n \in \mathbb{F}$, а n ненегативан цео број. Сабирање полинома и множење полинома скаларом дефинишу се на уобичајен начин, па скуп $P(\mathbb{F})$ чини векторски простор над пољем $\mathbb{F}$. Посебно, ако је $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, добија се комплексан векторски простор полинома са комплексним коефицијентима.

У датом векторском простору можемо посматрати коначне листе вектора.

Дефиниција. Листа вектора $(v_1, v_2, \dots, v_n)$ је уређена n -торка вектора из V , при чему је n коначан број.

За сваку листу вектора може се дефинисати њен линеарни омотач.

Дефиниција. Линеарни омотач листе вектора $(v_1, v_2, \dots, v_n)$, у ознаци

$$\text{span}(v_1, v_2, \dots, v_n),$$

јесте скуп свих линеарних комбинација ових вектора:

$$a_1v_1 + a_2v_2 + \dots + a_nv_n, \quad a_i \in \mathbb{F}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Кажемо да је векторски простор V разапет листом $(v_1, v_2, \dots, v_n)$ ако важи

$$V = \text{span}(v_1, v_2, \dots, v_n).$$

Поред тога, за листу вектора можемо дефинисати и појам линеарне независности.

Дефиниција. Листа вектора $(v_1, v_2, \dots, v_n)$, где је $v_i \in V$, је линеарно независна ако једначина

$$a_1v_1 + a_2v_2 + \dots + a_nv_n = \mathbf{0}$$

има једино решење

$$a_1 = a_2 = \cdots = a_n = 0.$$

На основу ових појмова дефинише се база векторског простора.

Дефиниција. База векторског простора V је листа вектора из V која је линеарно независна и која разапиње цео простор V .

Дефиниција. Димензија векторског простора V је број вектора у било којој његовој бази и означава се са $\dim V$.

Покажимо сада да је простор из првог примера коначнодимензионалан, док је простор полинома бесконачнодимензионалан.

Тврђење. Простор $\mathbb{C}^N$ је коначнодимензионалан и важи $\dim \mathbb{C}^N = N$. (Доказ је исти и за $\mathbb{R}^N$)

Посматрајмо векторе

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad e_N = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Показаћемо да листа $(e_1, e_2, \dots, e_N)$ представља базу простора $\mathbb{C}^N$.

Најпре покажимо да она разапиње цео простор. Нека је

$$v = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^N.$$

Тада се овај вектор може записати у облику

$$v = a_1 e_1 + a_2 e_2 + \cdots + a_N e_N.$$

Дакле, сваки вектор из $\mathbb{C}^N$ је линеарна комбинација вектора $e_1, e_2, \dots, e_N$, па важи

$$\mathbb{C}^N = \text{span}(e_1, e_2, \dots, e_N).$$

Сада покажимо да је листа $(e_1, e_2, \dots, e_N)$ линеарно независна. Нека важи

$$a_1 e_1 + a_2 e_2 + \cdots + a_N e_N = \mathbf{0}.$$

Поређењем компонената добијамо

$$a_1 = 0, \quad a_2 = 0, \quad \dots, \quad a_N = 0.$$

Према томе, једино решење је тривијално, па су вектори $e_1, e_2, \dots, e_N$ линеарно независни.

Пошто листа $(e_1, e_2, \dots, e_N)$ разапиње простор $\mathbb{C}^N$ и линеарно је независна, она је база простора $\mathbb{C}^N$. Зато је

$$\dim \mathbb{C}^N = N.$$

Тврђење. Простор свих полинома са комплексним коефицијентима је бесконачно димензионалан.

Посматрајмо простор

$$P(\mathbb{C}) = \{a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n \mid a_i \in \mathbb{C}, n \in \mathbb{N}_0\}.$$

Показаћемо да овај простор није коначнодимензионалан.

Узмимо произвољну коначну листу полинома. Пошто је листа коначна, међу њима постоји полином највећег степена, рецимо n . Њихова линеарна комбинација је

$$a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n, \quad a_i \in \mathbb{C}.$$

Свака њихова линеарна комбинација има степен највише n . Зато полином x^{n+1} не може припадати њиховом линеарном омотачу. Другим речима,

$$x^{n+1} \notin \text{span}(1, x, x^2, \dots, x^n).$$

Како ниједна коначна листа полинома не може да разапне цео простор $P(\mathbb{C})$ следи да простор $P(\mathbb{C})$ није коначнодимензионалан.

Према томе, простор $P(\mathbb{C})$ је бесконачнодимензионалан.

На крају, наведимо неколико важних чињеница о коначнодимензионалним векторским просторима. Сваки коначнодимензионални векторски простор има базу. Штавише, све базе једног коначнодимензионалног векторског простора имају исти број елемената, па је зато димензија простора добро дефинисана. Такође, дужина сваке линеарно независне листе мања је или једнака дужини сваке листе која разапиње простор. Из тога следи да, у коначнодимензионалном простору V , свака листа вектора дужине $\dim V$ јесте база ако је линеарно независна, или разапиње цео простор.

До сада смо посматрали само алгебарску структуру векторског простора. Да бисмо могли да говоримо о дужини вектора, углу између вектора и ортогоналности, потребно је увести унутрашњи производ.

2.2 Унутрашњи производ, норма и ортогоналност

До сада смо векторске просторе посматрали пре свега алгебарски: знали смо како се вектори сабирају и како се множе скаларом. Међутим, за примене у геометрији и квантној механици потребно је више од тога. Желимо да можемо да говоримо о дужини вектора, о томе када су два вектора „међусобно управна“ и, бар у извесном смислу, о углу између њих. Управо то омогућава унутрашњи производ.

Дефиниција. Нека је V векторски простор над пољем $\mathbb{F}$, где је најчешће $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, а у једноставнијим случајевима $\mathbb{F} = \mathbb{R}$. Унутрашњи производ на простору V је пресликавање

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{F},$$

које сваком уређеном пару вектора (u, v) придружује скалар $\langle u, v \rangle$.

У овом раду користићемо конвенцију уобичајену у квантној механици: унутрашњи производ је линеаран у другом аргументу, а конјуговано-линеаран у првом аргументу. То значи да за све $u, v, w \in V$ и за сваки скалар $a \in \mathbb{F}$ важи:

1. $\langle u, v + w \rangle = \langle u, v \rangle + \langle u, w \rangle$ (адитивност у другом аргументу)
2. $\langle u, av \rangle = a\langle u, v \rangle$ (хомогеност у другом аргументу)
3. $\langle u, u \rangle > 0$ за свако $u \neq \mathbf{0}$ (позитивност)
4. $\langle u, u \rangle = 0 \iff u = \mathbf{0}$ (позитивна дефинитност)
5. $\langle u, v \rangle = \overline{\langle v, u \rangle}$ (конјугована симетрија)

Прве две особине изражавају линеарност по другом аргументу. Последње три говоре да вектор са самим собом даје ненегативан број и да се при замени места аргумената јавља комплексно конјуговање. У реалном случају, када је $\mathbb{F} = \mathbb{R}$, комплексно конјуговање не мења број, па ова особина прелази у познату симетрију $\langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$.

Из наведених аксиома следе и неке корисне последице, које ћемо користити без доказа:

1. $\langle u, \mathbf{0} \rangle = 0$ и $\langle \mathbf{0}, v \rangle = 0$ (нулти вектор)
2. $\langle u_1 + u_2, v \rangle = \langle u_1, v \rangle + \langle u_2, v \rangle$ (адитивност у првом аргументу)
3. $\langle au, v \rangle = \bar{a}\langle u, v \rangle$ (конјугована хомогеност у првом аргументу)

Друга од ових формула показује да је унутрашњи производ адитиван и по првом аргументу, али због комплексног конјуговања он у првом аргументу није линеаран него конјуговано-линеаран. Управо зато је важно да пажљиво водимо рачуна о редоследу аргумената.

Један од најважнијих појмова који добијамо помоћу унутрашњег производа јесте *ортогоналност*. Ако за векторе u и v важи

$$\langle u, v \rangle = 0,$$

онда кажемо да су они ортогонални и пишемо $u \perp v$. Када су u и v ненулти, овај услов одговара интуицији да су вектори „под правим углом“. Нулти вектор је ортогоналан сваком вектору, али је геометријски најзанимљивији случај када су оба вектора различита од нуле.

Дефиниција. Ако је на простору V задат унутрашњи производ, онда се норма вектора $u \in V$ дефинише формулом

$$\|u\| = \sqrt{\langle u, u \rangle},$$

односно еквивалентно,

$$\|u\|^2 = \langle u, u \rangle.$$

Пошто је $\langle u, u \rangle$ реалан и ненегативан број, овај квадратни корен је добро дефинисан. Норма представља апстрактну дужину вектора.

Најважнији пример за нас је стандардни унутрашњи производ у простору $\mathbb{C}^n$. Ако су

$$u = (u_1, u_2, \dots, u_n), \quad v = (v_1, v_2, \dots, v_n),$$

онда се он задаје формулом

$$\langle u, v \rangle = \sum_{k=1}^n \overline{u_k} v_k.$$

Ова формула је у складу са нашом конвенцијом: други аргумент се понаша линеарно, а у првом се појављује комплексно конјуговање. У реалном простору $\mathbb{R}^n$ она се своди на обичан скаларни производ из елементарне аналитичке геометрије.

Пример. У простору $\mathbb{C}^2$ посматрајмо векторе

$$u = (1, i), \quad v = (i, 1).$$

Тада је

$$\langle u, v \rangle = \overline{1}i + \overline{i}1 = i - i = 0.$$

Према томе, вектори u и v су ортогонални. Овај пример показује да у комплексним просторима редослед аргумената и комплексно конјуговање нису формалност, већ суштински део дефиниције унутрашњег производа. Уместо да кажемо да два правца заклапају угао од 90° , у апстрактном векторском простору кажемо да је њихов унутрашњи производ једнак нули.

У даљем тексту користићемо две важне неједнакости и Питагорину теорему, без доказа. Оне повезују унутрашњи производ, норму и ортогоналност и чине основни геометријски алат у раду са Хилбертовим просторима.

Коши–Шварцова неједнакост. За све $u, v \in V$ важи

$$|\langle u, v \rangle| \leq \|u\| \|v\|.$$

Она говори да модул унутрашњег производа не може бити већи од производа норми одговарајућих вектора.

Неједнакост троугла. За све $u, v \in V$ важи

$$\|u + v\| \leq \|u\| + \|v\|.$$

Ово је потпуно аналогно познатој чињеници из геометрије да дужина једне стране троугла није већа од збира дужина преостале две.

Питагорина теорема. Ако је $u \perp v$, онда важи

$$\|u + v\|^2 = \|u\|^2 + \|v\|^2.$$

Дакле, за ортогоналне векторе важи иста веза као за катете и хипотенузу у правоуглом троуглу. То је још један знак да унутрашњи производ заиста уноси геометрију у векторски простор.

На овај начин векторски простор са унутрашњим производом постаје много богатији него обичан алгебарски простор: у њему можемо да меримо дужину, упоређујемо векторе и говоримо о ортогоналности. Управо због тога су такви простори природно место за формулацију квантне механике, где се стања система описују векторима, а вероватноће и мерења зависе од унутрашњег производа.

Сваки коначнодимензионални комплексни векторски простор са унутрашњим производом је Хилбертов простор. У бесконачнодимензионалном случају, међутим, није довољно имати само унутрашњи производ, већ се мора и испуити услов *потпуности* H : сваки Кошијев низ мора да конвергира ка елементу самог простора. Ову особину детаљније објашњавамо у пододељку о потпуности.

2.3 Ортонормалне базе и развој вектора по бази

У претходном пододељку видели смо да су два вектора ортогонална ако је њихов унутрашњи производ једнак нули, а да је вектор нормализован ако му је норма једнака 1, односно ако важи $\|u\| = 1$. Комбинацијом ова два појма добијамо ортонормалне векторе, а они су један од најважнијих алата у коначнодимензионалним Хилбертовим просторима.

У овом пододељку посматраћемо коначнодимензионалне комплексне векторске просторе са унутрашњим производом. У таквим просторима ортонормалне базе омогућавају да се сваки вектор запише на веома једноставан начин, слично као што се у равни сваки вектор описује својим координатама.

Дефиниција. Листа вектора $(e_1, e_2, \dots, e_n)$ назива се *ортонормалном* ако су сви њени вектори нормализовани и међусобно ортогонални. То значи да за свако $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$ важи

$$\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij},$$

где је δ_{ij} Кронекеров симбол, дефинисан са

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Дакле, услов $\langle e_i, e_i \rangle = 1$ говори да је e_i нормализован, а услов $\langle e_i, e_j \rangle = 0$ за $i \neq j$ говори да су различити вектори из листе међусобно ортогонални.

Важно је нагласити да свака ортонормална листа јесте линеарно независна, али не мора нужно бити база. Она постаје база тек онда када разапиње цео простор V . Посебно, ако је $\dim V = n$, онда је свака ортонормална листа од n вектора аутоматски ортонормална база простора V .

Тврђење. Свака ортонормална листа је линеарно независна.

Доказ. Претпоставимо да важи

$$a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_n e_n = \mathbf{0}.$$

Фиксирајмо неко $k \in \{1, 2, \dots, n\}$ и узмимо унутрашњи производ са e_k у првом аргументу. Тада, због линеарности у другом аргументу, добијамо

$$\left\langle e_k, \sum_{i=1}^n a_i e_i \right\rangle = \sum_{i=1}^n a_i \langle e_k, e_i \rangle = a_k.$$

Са друге стране, лева страна је једнака $\langle e_k, \mathbf{0} \rangle$. Према томе, $a_k = 0$. Како је k било произвољно, следи да су сви коефицијенти једнаки нули, па је листа $(e_1, e_2, \dots, e_n)$ линеарно независна. $\square$

Дефиниција. Ортонормална база простора V је листа вектора која је истовремено ортонормална и база простора V .

Ако је $(e_1, e_2, \dots, e_n)$ ортонормална база простора V , онда сваки вектор $v \in V$ има јединствен запис облика

$$v = \sum_{i=1}^n a_i e_i.$$

Ови коефицијенти $a_1, a_2, \dots, a_n$ називају се координате вектора v у односу на дату базу. Код ортонормалне базе они се добијају врло једноставно.

Заиста, ако са обе стране узмемо унутрашњи производ са e_i у првом аргументу, добијамо

$$\langle e_i, v \rangle = \left\langle e_i, \sum_{j=1}^n a_j e_j \right\rangle = \sum_{j=1}^n a_j \langle e_i, e_j \rangle = a_i.$$

Према томе, коефицијенти развоја дати су формулом

$$a_i = \langle e_i, v \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Зато се сваки вектор из V може записати као

$$v = \sum_{i=1}^n \langle e_i, v \rangle e_i.$$

Ово је једна од најважнијих особина ортонормалне базе: унутрашњи производ директно даје координате вектора. За разлику од произвољне базе, где се координате најчешће налазе решавањем система једначина, у ортонормалној бази координате се добијају директно помоћу унутрашњег производа.

Из овог записа лако се добија и формула за норму. Ако је

$$v = \sum_{i=1}^n a_i e_i,$$

онда важи

$$\|v\|^2 = \langle v, v \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^n a_i e_i, \sum_{j=1}^n a_j e_j \right\rangle = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \bar{a}_i a_j \langle e_i, e_j \rangle = \sum_{i=1}^n |a_i|^2.$$

Пошто су у ортонормалној бази коефицијенти дати формулама $a_i = \langle e_i, v \rangle$, добијамо да је квадрат норме једнак је збиру квадрата модула координата у ортонормалној бази. То

је потпуно аналогно познатој формули из аналитичке геометрије за дужину вектора у стандардној бази.

Поставља се природно питање: шта ако на почетку имамо базу или само линеарно независну листу која није ортонормална? Одговор даје *Грам–Шмитов поступак*. Он каже да се од сваке линеарно независне листе $(v_1, v_2, \dots, v_n)$ може конструисати ортонормална листа $(e_1, e_2, \dots, e_n)$ која разапиње исти потпростор.

Идеја поступка је следећа. Прво узмемо вектор v_1 и нормализујемо га. Затим од v_2 одузмемо његову компоненту у правцу e_1 , па добијени вектор нормализујемо. После тога од v_3 одузимамо компоненте у правцима већ добијених вектора e_1 и e_2 , и тако редом. На сваком кораку добијамо нови вектор који је ортогоналан на све претходне.

Грам–Шмитов поступак. Полазећи од линеарно независне листе $(v_1, v_2, \dots, v_n)$, дефинишемо

$$u_1 = v_1, \quad e_1 = \frac{u_1}{\|u_1\|},$$

а затим за $k = 2, 3, \dots, n$

$$u_k = v_k - \sum_{j=1}^{k-1} \langle e_j, v_k \rangle e_j, \quad e_k = \frac{u_k}{\|u_k\|}.$$

Вектор u_k добија се тако што се од v_k одузму његове компоненте у правцима већ добијених ортонормалних вектора. Због тога је u_k ортогоналан свим претходним векторима $e_1, e_2, \dots, e_{k-1}$. Пошто је почетна листа линеарно независна и ниједан од вектора $u_k \neq 0$ нормализација је могућа.

На крају добијамо ортонормалну листу која разапиње исти потпростор као полазна листа. Ако је почетна листа била база простора V , онда добијена ортонормална листа такође постаје база, дакле ортонормална база.

Ортонормалне базе су важне зато што омогућавају да се вектори описују помоћу једноставних коефицијената, а управо ће та идеја касније бити коришћена у Дираковој нотацији, пројекторима и квантним мерењима.

2.4 Хилбертов простор и појам потпуности

У пододелјку 2.2 увели смо унутрашњи производ и норму коју он одређује формулом

$$\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}.$$

То нам је омогућило да говоримо о дужини вектора, ортогоналности и растојању између два вектора. Ипак, Хилбертов простор није само векторски простор са унутрашњим производом. Да би векторски простор био Хилбертов, потребно је да испуњава још једно важно својство: *потпуност* у норми која је добијена из унутрашњег производа.

У коначнодимензионалном случају овај услов је аутоматски испуњен. Сваки коначнодимензионални векторски простор са унутрашњим производом је потпун, па је самим тим и Хилбертов простор. Зато појам потпуности постаје заиста важан тек у бесконачнодимензионалним просторима, где није довољно само задати сабирање, множење скаларом и унутрашњи производ.

Да бисмо разумели потпуност, најпре треба да дефинишемо појмове Кошијевог низа и конвергенције.

Дефиниција. Низ (x_n) у нормисаном векторском простору назива се *Кошијевим* ако важи

$$(\forall \varepsilon > 0)(\exists N \in \mathbb{N})(\forall n, m \geq N) \|x_n - x_m\| < \varepsilon.$$

Интуитивно, то значи да чланови низа, када одемо довољно далеко, постају произвољно блиски један другом.

Дефиниција. Низ (x_n) конвергира ка неком вектору $x \in V$ ако важи

$$(\forall \varepsilon > 0)(\exists N \in \mathbb{N})(\forall n \geq N) \|x_n - x\| < \varepsilon.$$

Интуитивно, то значи да се чланови низа све више приближавају једном одређеном елементу x из простора.

Између ова два појма постоји важна веза: сваки конвергентан низ је Кошијев. Заиста, ако се сви чланови низа приближавају истој граници, онда се и међусобно морају приближавати. Међутим, обрнуто тврђење није увек тачно. Кошијев низ не мора да има границу у самом простору ако тај простор није потпун.

Један пример непотпуног простора јесте скуп рационалних бројева $\mathbb{Q}$ са уобичајеним растојањем. Посматрајмо низ

$$a_1 = 1, \quad a_2 = 1.4, \quad a_3 = 1.41, \quad a_4 = 1.414, \quad \dots,$$

где је a_n рационалан број добијен одсецањем децималног записа броја $\sqrt{2}$ после n децимала. Сви чланови овог низа су рационални, па низ заиста припада простору $\mathbb{Q}$. Овај низ је Кошијев у $\mathbb{Q}$, јер се његови чланови све мање разликују један од другог. Али његова граница је број $\sqrt{2}$, а важи $\sqrt{2} \notin \mathbb{Q}$. Зато $\mathbb{Q}$ није потпун. Интуитивно, можемо рећи да у простору $\mathbb{Q}$ постоји „рупа“ на месту где би граница требало да буде. Насупрот томе, скуп реалних бројева $\mathbb{R}$ са уобичајеним растојањем јесте потпун. Исти низ у $\mathbb{R}$ конвергира, јер је $\sqrt{2} \in \mathbb{R}$. Овај пример није пример Хилбертовог простора, већ служи само да илуструје појам потпуности.

Слична појава јавља се и у векторским просторима. Нека је $\mathcal{P}$ векторски простор полинома. Посматрајмо Маклоренове полиноме функције $\sin x$:

$$p_n(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}.$$

Сви полиноми p_n припадају простору $\mathcal{P}$. У одговарајућем смислу конвергенције, ови полиноми теже функцији $\sin x$. Пошто $\sin x$ није полином, та граница не припада простору $\mathcal{P}$. То илуструје идеју простора који није потпун. Прецизан појам конвергенције зависи од изабране норме, а овај пример овде служи само да интуитивно објасни смисао потпуности.

Дефиниција. Нормисан векторски простор V назива се *потпуним* ако сваки Кошијев низ у V конвергира ка неком елементу тог истог простора.

Сада можемо дати и главну дефиницију.

Дефиниција. Хилбертов простор је простор са унутрашњим производом који је потпун

у односу на норму добијену из тог унутрашњег производа. Хилбертов простор обично означавамо са $\mathcal{H}$.

Дакле, да би простор био Хилбертов, није довољно да у њему можемо да рачунамо унутрашњи производ и норму. Потребно је и да границе свих Кошијевих низова остају унутар самог простора. Управо то гарантује потпуност.

Овај услов је суштински у квантној механици, јер у математичким моделима квантне механике стања система често нису коначни координатни вектори, већ функције или бесконачни низови. Зато Хилбертови простори дају оквир у коме границе физички смислених апроксимација и даље остају унутар посматраног простора.

Због тога је природно да као први бесконачнодимензионални пример посматрамо простор који је најближи коначнодимензионалном простору $\mathbb{C}^n$.

2.5 Простор ℓ^2 као први бесконачнодимензионални пример

До сада смо углавном посматрали просторе $\mathbb{C}^n$, чији елементи имају коначно много координата. На пример, вектор из $\mathbb{C}^3$ има три координате, а вектор из $\mathbb{C}^n$ има n координата. У квантној механици јавља се потреба за просторима у којима стања могу имати бесконачно много координата. Зато уводимо простор ℓ^2 као најједноставнији бесконачнодимензионални пример који веома личи на $\mathbb{C}^n$.

Дефиниција. Простор $\ell^2(\mathbb{C})$ дефинише се као

$$\ell^2(\mathbb{C}) := \left\{ x = (x_1, x_2, x_3, \dots) : x_k \in \mathbb{C}, \sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 < \infty \right\}.$$

Другим речима, $\ell^2(\mathbb{C})$ је скуп свих комплексних низова чији је збир квадрата модула координата коначан. Услов

$$\sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 < \infty$$

значи да координате низа не могу бити произвољно велике, већ морају довољно брзо да опадају да би овај бесконачни збир имао коначну вредност.

Као и у простору $\mathbb{C}^n$, сабирање низова и множење скаларом дефинишу се по координатама. Ако су

$$x = (x_1, x_2, x_3, \dots), \quad y = (y_1, y_2, y_3, \dots),$$

онда је

$$x + y = (x_1 + y_1, x_2 + y_2, x_3 + y_3, \dots),$$

а за $\alpha \in \mathbb{C}$ важи

$$\alpha x = (\alpha x_1, \alpha x_2, \alpha x_3, \dots).$$

На овом простору унутрашњи производ дефинише се формулом

$$\langle x, y \rangle := \sum_{k=1}^{\infty} \overline{x_k} y_k.$$

Коши-Шварцова неједнакост гарантује да овај ред конвергира за све $x, y \in \ell^2(\mathbb{C})$.

$$\sum_{k=1}^{\infty} |x_k y_k| \leq \left(\sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{k=1}^{\infty} |y_k|^2 \right)^{1/2}.$$

Одговарајућа норма је

$$\|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle} = \left(\sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 \right)^{1/2}.$$

Ове формуле су природни бесконачнодимензионални аналоги формула из простора $\mathbb{C}^n$, с тим што се уместо коначних сума појављују бесконачни редови.

У простору $\ell^2(\mathbb{C})$ посебно важну улогу има стандардна ортонормална база у смислу Хилбертовог простора.

$$e_1 = (1, 0, 0, \dots), \quad e_2 = (0, 1, 0, \dots), \quad e_3 = (0, 0, 1, \dots), \dots$$

Ови вектори су ортонормирани, јер важи

$$\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}.$$

То значи да је $\langle e_i, e_i \rangle = 1$, док је $\langle e_i, e_j \rangle = 0$ за $i \neq j$. Сваки елемент $x \in \ell^2$ можемо посматрати као бесконачну линеарну комбинацију ових базних вектора:

$$x = \sum_{k=1}^{\infty} x_k e_k.$$

Овде се овај збир не схвата као коначна линеарна комбинација, већ као граница парцијалних сума у ℓ^2 норми. Коефицијенти у овом запису управо су координате низа $x = (x_1, x_2, x_3, \dots)$.

Остаје још питање потпуности. Идеја доказа није тешка, иако потпуно формалан доказ захтева више пажње. Нека је $(x^{(m)})$ Кошијев низ у ℓ^2 , где је

$$x^{(m)} = (x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, x_3^{(m)}, \dots).$$

Пошто је низ Кошијев у ℓ^2 -норми, за сваку фиксну координату k важи

$$|x_k^{(m)} - x_k^{(n)}| \leq \|x^{(m)} - x^{(n)}\|.$$

Зато је, за свако фиксно k , низ комплексних бројева

$$(x_k^{(m)})_{m \in \mathbb{N}}$$

Кошијев у $\mathbb{C}$. Како је $\mathbb{C}$ потпун простор, овај низ има границу. Означимо је са

$$x_k := \lim_{m \rightarrow \infty} x_k^{(m)}.$$

Тако добијамо кандидат за гранични елемент:

$$x = (x_1, x_2, x_3, \dots).$$

Потом се показује да овај низ заиста припада ℓ^2 , односно да важи

$$\sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 < \infty,$$

и да $x^{(m)} \rightarrow x$ у ℓ^2 -норми. Дакле, сваки Кошијев низ у ℓ^2 има границу која поново припада ℓ^2 . Ово је основна идеја доказа да је $\ell^2(\mathbb{C})$ потпун простор па је, заједно са наведеним унутрашњим производом, Хилбертов простор.

Овај пример има природну везу са квантном механиком. Ако се стање развија по ортонормалној бази као

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} c_k |e_k\rangle,$$

онда услов нормализације има облик

$$\sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 = 1.$$

Због тога низови из ℓ^2 природно описују коефицијенте стања када је изабрана дискретна ортонормална база јер низ коефицијената $(c_1, c_2, \dots)$ припада простору ℓ^2 .

3 Бра-кет нотација и дуални простор

3.1 Линеарни функционали и дуални простор

У Хилбертовом простору често желимо да вектору придружимо један број: координату у односу на неки правац, амплитуду или вредност добијену применом неког правила. Ако је то придруживање линеарно, говоримо о линеарном функционалу.

Дефиниција. Нека је $\mathcal{H}$ комплексни Хилбертов простор. Линеарни функционал на $\mathcal{H}$ је пресликавање

$$L : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$$

такво да за све $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$ и све $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ важи

$$L(\alpha\psi + \beta\varphi) = \alpha L(\psi) + \beta L(\varphi).$$

То значи да функционал узима вектор као улаз, а као излаз даје комплексан број.

Ова дефиниција је формално врло слична дефиницији линеарног оператора, али постоји важна разлика. Линеарни оператор најчешће пресликава вектор у други вектор, док линеарни функционал пресликава вектор у број. Зато функционал можемо посматрати као начин да из вектора „измеримо“ неку компоненту или издвојимо неку информацију која је описана једним скаларом.

Једноставан пример добијамо већ у равни. Нека је $V = \mathbb{R}^2$ и нека је

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

Дефинишимо функционал L_x тако да сваком вектору придружује његову x -координату:

$$L_x(\vec{v}) = x.$$

Ако су $\vec{u} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$, $\vec{v} = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}$, и $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ добијамо

$$L_x(\alpha\vec{u} + \beta\vec{v}) = L_x \begin{pmatrix} \alpha x_1 + \beta x_2 \\ \alpha y_1 + \beta y_2 \end{pmatrix} = \alpha x_1 + \beta x_2 = \alpha L_x(\vec{u}) + \beta L_x(\vec{v}).$$

Па је L_x линеарни функционал.

У најједноставнијем случају функционал само „извлачи“ једну координату. Касније ће у Хилбертовом простору улога функционала бити знатно дубља, али основна идеја остаје иста: функционал од вектора прави број.

У коначној димензији функционал можемо веома јасно представити матрички. Пошто L_x узима вектор из $\mathbb{R}^2$ и враћа један број, његова матрица је ред-матрица типа 1×2 :

$$L_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Тада је

$$L_x \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = x.$$

На овај начин се у коначној димензији линеарни функционали могу замислити као ред-вектори који делују на колона-векторе и као резултат дају један број. То је корисна слика коју треба имати у виду, јер она касније природно води ка разлици између вектора и објеката који на векторима делују.

Сада можемо прећи на један општији појам. Скуп свих линеарних функционала на датом простору није само случајан скуп различитих пресликавања. Тај скуп и сам има структуру векторског простора. Заиста, ако су $L_1, L_2 : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ линеарни функционали и ако је $\lambda \in \mathbb{C}$, онда се њихов збир и множење скаларом дефинишу формулама

$$(L_1 + L_2)(\psi) = L_1(\psi) + L_2(\psi),$$

$$(\lambda L_1)(\psi) = \lambda L_1(\psi).$$

Лако се проверава да су и $L_1 + L_2$ и λL_1 поново линеарни функционали. Према томе, са овим операцијама добија се нови векторски простор.

Дефиниција. Дуални простор простора $\mathcal{H}$ означава се са $\mathcal{H}^*$ и дефинише се као

$$\mathcal{H}^* = \{L : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C} \mid L \text{ је непрекидан линеарни функционал}\}.$$

Речима, $\mathcal{H}^*$ је простор свих непрекидних линеарних функционала на простору $\mathcal{H}$.

Ознака $\mathcal{H}^*$ наглашава да је дуални простор тесно везан за полазни простор $\mathcal{H}$. Ако променимо простор, мењају се и функционали које можемо на њему посматрати. Зато сваки Хилбертов простор има свој придружени дуални простор. У том дуалном простору не живе вектори из $\mathcal{H}$, већ пресликавања која на тим векторима делују и враћају комплексне бројеве.

Овај појам је веома значајан у квантној механици. Са једне стране имамо векторе који представљају стања, а са друге стране имамо функционале који тим векторима придружују бројеве. Управо та веза између вектора и функционала омогућава да се математички апарат Хилбертових простора касније преведе у језик који је погодан за физичку интерпретацију.

До сада смо, дакле, видели да функционали живе у дуалном простору и да векторима придружују бројеве. У Хилбертовом простору постоји дубока веза између вектора и функционала, а њу описује Рисова теорема. Управо та веза омогућава увођење бра-вектора и Диракове нотације.

3.2 Рисова теорема

У претходном потпоглављу уведени су линеарни функционали као пресликавања која вектору придружују један број. Природно питање је да ли се такви функционали могу описати помоћу самих вектора Хилбертовог простора. Управо на то одговара Рисова теорема.

Рисова теорема. Нека је $\mathcal{H}$ комплексни Хилбертов простор и нека је

$$L : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$$

непрекидан линеарни функционал. Тада постоји јединствен вектор $y \in \mathcal{H}$ такав да за свако $x \in \mathcal{H}$ важи

$$L(x) = \langle y, x \rangle.$$

У овој формули редослед аргумената је важан. У овом раду користимо физичарску конвенцију да је унутрашњи производ линеаран по другом аргументу, па је пресликавање $x \mapsto \langle y, x \rangle$ заиста линеарно по вектору x .

Рисова теорема каже да се сваки непрекидан линеарни функционал на Хилбертовом простору може записати као унутрашњи производ са јединственим фиксним вектором.

Ово је један од главних разлога зашто је Рисова теорема важна за bra-ket нотацију. Она нам омогућава да функционал који делује на вектор разумемо преко унутрашњег производа са неким другим вектором. На тај начин прелаз од вектора до броја није произвољан, већ је уграђен у саму геометрију Хилбертовог простора.

Посебно јасан пример добија се у простору ℓ^2 , који је уведен као први бесконачнодимензионални пример Хилбертовог простора. Нека је

$$a = (a_1, a_2, a_3, \dots) \in \ell^2.$$

За сваки

$$x = (x_1, x_2, x_3, \dots) \in \ell^2$$

дефинишемо

$$L_a(x) := \langle a, x \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \overline{a_k} x_k.$$

Пошто је унутрашњи производ линеаран по другом аргументу, пресликавање L_a је линеарни функционал на ℓ^2 . Коши–Шварцова неједнакост обезбеђује да овај збир има смисла за све $a, x \in \ell^2$, као и да се функционал добро понаша при малим променама вектора x . Рисова теорема каже да сваки непрекидан линеарни функционал на ℓ^2 настаје управо на овај начин, за неки јединствен вектор $a \in \ell^2$.

Још једноставнији пример добијамо ако за a узмемо један стандардни базни вектор. Нека је $a = e_n$. Тада је

$$L_{e_n}(x) = \langle e_n, x \rangle = x_n.$$

Дакле, скаларни производ са базним вектором e_n издваја n -ту координату вектора x . Ово је бесконачнодимензионална верзија познате идеје из простора $\mathbb{C}^n$: координата вектора добија се пројекцијом на одговарајући базни правац.

На крају, Рисова теорема природно води ка Дираковој нотацији. Бра-вектор $\langle y|$ можемо разумети као функционал који кет-вектору $|x\rangle$ придружује број

$$\langle y|x\rangle.$$

Рисова теорема оправдава зашто бра-вектори и кет-вектори нису два потпуно независна света, већ су повезани структуром Хилбертовог простора. У квантној механици ово је важно јер амплитуде облика $\langle e_n|\psi\rangle$ добијамо управо као примену функционала на стање $|\psi\rangle$.

3.3 Диракова нотација: кет, бра и резолуција идентитета

Пол Дирак¹ увео је нотацију која је посебно погодна за рад са векторима, линеарним функционалима и унутрашњим производом у квантној механици. Уместо да унутрашњи производ пишемо у облику

$$\langle \phi, \psi \rangle,$$

у Дираковој нотацији пишемо

$$\langle \phi|\psi\rangle.$$

Вертикална црта раздваја леви део, који се понаша као функционал, од десног дела, који је вектор. На тај начин сам запис јасно показује да је реч о деловању једног објекта на други. То се може сажето приказати и на следећи начин:

$$\begin{array}{ccc} \langle \phi|\psi\rangle & \longleftrightarrow & \langle \phi| \text{ делује на } |\psi\rangle. \\ \text{bracket} & & \text{bra} \qquad \text{ket} \end{array}$$

Енглеска реч bracket природно се раздваја на bra и ket, па отуда потичу и називи који се користе у овој нотацији.

У Дираковој нотацији запис

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

¹Пол Адријен Морис Дирак (Paul Adrien Maurice Dirac, 1902–1984) био је британски теоријски физичар, један од оснивача квантне механике и квантне теорије поља.

означава кет-вектор, односно вектор Хилбертовог простора, док запис

$$\langle \phi | \in \mathcal{H}^*$$

означава бра-вектор, односно линеарни функционал који делује на кет-вектор и даје комплексан број. То деловање записује се као

$$\langle \phi | : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad |\psi\rangle \mapsto \langle \phi | \psi \rangle.$$

Тако бра-кет запис није ништа друго до нов начин да се запише унутрашњи производ који смо већ раније увели.

У коначној димензији ова нотација има врло јасно матричко значење. Ако је

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix},$$

онда је одговарајући бра

$$\langle \psi | = \begin{pmatrix} \overline{\alpha_1} & \overline{\alpha_2} & \cdots & \overline{\alpha_n} \end{pmatrix}.$$

Важно је нагласити да прелаз из кета у бра није само транспоновање, већ конјуговано транспоновање. Ако је, поред тога,

$$|\phi\rangle = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix},$$

онда важи

$$\langle \phi | \psi \rangle = \overline{\beta_1} \alpha_1 + \overline{\beta_2} \alpha_2 + \cdots + \overline{\beta_n} \alpha_n.$$

Ово је управо исти унутрашњи производ који је раније уведен у комплексном простору, само записан у Дираковој нотацији.

Посебна снага ове нотације види се када се вектор запише по ортонормалној бази. Ако је $\{|e_i\rangle\}$ ортонормална база, онда се вектор пише као

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |e_i\rangle,$$

а коефицијенти су

$$a_i = \langle e_i | \psi \rangle.$$

Зато је

$$|\psi\rangle = \sum_i \langle e_i | \psi \rangle |e_i\rangle.$$

Затим се овај запис може преписати у облику

$$|\psi\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i | \psi \rangle = \left(\sum_i |e_i\rangle \langle e_i| \right) |\psi\rangle.$$

Пошто ово важи за сваки $|\psi\rangle$, закључујемо да важи

$$I = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i|.$$

Ова формула назива се резолуција идентитета. Управо овај пример показује зашто је Диракова нотација моћна: она омогућава да се скаларни производи и оператори записују веома компактно. Оператори облика $|e_i\rangle \langle e_i|$ су управо пројектори на правце одређене базним векторима.

3.4 Пројектори и ортогоналне пројекције

У претходном потпоглављу видели смо да Диракова нотација јасно раздваја векторе и функционале. Сада посматрамо две сличне, али суштински различите врсте израза. Унутрашњи производ

$$\langle \psi | \phi \rangle$$

је број. Са друге стране, израз

$$|\psi\rangle \langle \phi|$$

није број, већ оператор. Такав израз назива се спољашњи производ. Његово значење најлакше се види ако га применимо на произвољан вектор $|v\rangle$:

$$(|\psi\rangle \langle \phi|) |v\rangle = |\psi\rangle \langle \phi | v \rangle.$$

Овде $\langle \phi | v \rangle$ прво издваја један комплексан број из вектора $|v\rangle$, а затим се тај број множи вектором $|\psi\rangle$. Зато је резултат вектор у правцу $|\psi\rangle$, а не само број.

Важно је нагласити да није сваки спољашњи производ пројектор. Пројектор добијамо у посебном случају када узмемо исти нормирани вектор са леве и десне стране. Ако је $|\psi\rangle$ нормиран вектор, то јест ако важи

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1,$$

тада је пројектор на правац одређен вектором $|\psi\rangle$ дат формулом

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|.$$

Његово деловање на произвољан вектор $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ гласи

$$P_\psi |\phi\rangle = |\psi\rangle \langle \psi | \phi \rangle.$$

Број $\langle \psi | \phi \rangle$ показује колику компоненту вектор $|\phi\rangle$ има у правцу $|\psi\rangle$. Затим се тај број множи вектором $|\psi\rangle$, па добијамо управо део вектора $|\phi\rangle$ који лежи у том правцу.

Ако вектор $|\psi\rangle$ није нормиран, али је различит од нуле, онда у формули морамо поделити

са његовом квадратном нормом. Тада је пројектор на правац вектора $|\psi\rangle$ дат са

$$P_\psi = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Именилац обезбеђује да дужина вектора $|\psi\rangle$ не утиче на сам правац на који пројектујемо.

Основна особина пројектора јесте да важи

$$P_\psi^2 = P_\psi.$$

Речима, када једном пројектујемо вектор на неки правац, поновна пројекција на исти правац више ништа не мења. За нормиран вектор $|\psi\rangle$ то се види из кратког рачуна

$$P_\psi^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi.$$

Погледајмо сада интуитиван пример. Нека је вектор $|\phi\rangle$ развијен по ортонормалној бази:

$$|\phi\rangle = c_1|e_1\rangle + c_2|e_2\rangle + c_3|e_3\rangle + \dots.$$

Тада пројектор на правац $|e_2\rangle$ даје

$$|e_2\rangle\langle e_2|\phi\rangle = c_2|e_2\rangle.$$

Он брише све остале компоненте и оставља само компоненту у правцу $|e_2\rangle$. Зато пројектор можемо замислити као оператор који из целог вектора издваја само онај део који припада изабраном правцу.

Идеја пројекције може се проширити са једног правца на читав потпростор. Ако је потпростор разапет ортонормалним векторима

$$|e_i\rangle,$$

онда је пројектор на тај потпростор

$$P = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|.$$

Сваки члан $|e_i\rangle\langle e_i|$ издваја компоненту у једном правцу, а њихова сума издваја целу компоненту у датом потпростору.

На пример, ако желимо да пројектујемо на потпростор разапет векторима $|e_2\rangle$ и $|e_3\rangle$, онда је

$$P = |e_2\rangle\langle e_2| + |e_3\rangle\langle e_3|.$$

Ако је

$$|\phi\rangle = c_1|e_1\rangle + c_2|e_2\rangle + c_3|e_3\rangle + \dots,$$

онда добијамо

$$P|\phi\rangle = c_2|e_2\rangle + c_3|e_3\rangle.$$

Пројектор је, дакле, сачувао компоненте у правцима $|e_2\rangle$ и $|e_3\rangle$, а уклонио компоненте у осталим правцима.

Посебан случај добијамо када ортонормални вектори $|e_i\rangle$ чине базу целог простора. Тада су њихови правци довољни да опишу сваки вектор, па важи

$$I = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|.$$

Ова формула назива се резолуција идентитета. Она каже да је идентитет сума пројектора на све правце ортонормалне базе: ако саберемо све компоненте вектора по базним правцима, добијамо поново цео вектор.

На крају, пројектори припремају природну везу са квантним мерењем. Ако су $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$ нормирани вектори, онда важи

$$\|P_\psi|\phi\rangle\|^2 = |\langle\psi|\phi\rangle|^2.$$

Лева страна представља квадрат дужине пројектоване компоненте, а десна страна квадрат модула амплитуде $\langle\psi|\phi\rangle$. У квантној механици овај број ће се тумачити као вероватноћа да стање $|\phi\rangle$ буде пронађено у правцу $|\psi\rangle$.

Слично, ако је P пројектор на потпростор разапет ортонормалним векторима $|e_i\rangle$, онда је

$$\|P|\phi\rangle\|^2 = \sum_i |\langle e_i|\phi\rangle|^2.$$

Ова формула показује да се квадрат дужине пројекције на потпростор добија сабирањем квадрата модула појединачних компоненти. Зато пројектори нису само геометријски алат, већ припремају математички језик мерења у квантној механици.

4 Оператори у Хилбертовом простору

4.1 Линеарни оператори и адјунговани оператор

До сада смо посматрали векторе, унутрашњи производ, дуални простор и пројекторе. Следећи природан корак јесте увођење оператора. Оператор је пресликавање које једном вектору придружује други вектор, па га можемо посматрати као правило које мења векторе унутар истог простора. У квантној механици ова идеја је посебно важна, јер се многе величине описују управо операторима који делују на векторе Хилбертовог простора.

Дефиниција. Линеарни оператор на простору $\mathcal{H}$ је пресликавање

$$A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

такво да за све $u, v \in \mathcal{H}$ и све $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ важи

$$A(\alpha u + \beta v) = \alpha Au + \beta Av.$$

То значи да оператор чува линеарну структуру простора: линеарна комбинација вектора пре дејства оператора прелази у исту такву линеарну комбинацију после дејства оператора.

У коначнодимензионалном случају оператор можемо записати матрички чим изаберемо базу. Нека је $(e_1, \dots, e_n)$ база простора. Тада се за сваки базни вектор e_j слика Ae_j може

развити као линеарна комбинација базних вектора:

$$Ae_j = \sum_{i=1}^n A_{ij}e_i.$$

Бројеви A_{ij} чине матрицу оператора у тој бази. Ако знамо како оператор делује на све базне векторе, онда знамо како делује и на сваки други вектор, јер се сваки вектор може записати као линеарна комбинација елемената базе. Важно је нагласити: матрица није сам оператор, већ запис оператора у изабраној бази.

За матрицу оператора везују се и неке важне величине. Траг матрице дефинише се формулом

$$\operatorname{tr} A = A_{11} + \cdots + A_{nn},$$

и он је једноставно збир дијагоналних елемената. Поред тога посматра се и детерминанта, која се означава са $\det A$. У коначнодимензионалном случају важи да је услов $\det A \neq 0$ повезан са инвертибилношћу оператора: тада оператор има инверз. У овом раду нећемо даље развијати ове појмове, али је корисно имати их у виду јер се често јављају у раду са матрицама и операторима.

Један од важних појмова у теорији оператора јесте транспонована матрица. Ако је $A = (A_{ij})$, онда се транспонована матрица означава са A^T и дефинише формулом

$$(A^T)_{ij} = A_{ji}.$$

Другим речима, врсте и колоне замењују места. У реалном простору транспонована матрица има природно својство у односу на скаларни производ:

$$\langle x, Ay \rangle = \langle A^T x, y \rangle.$$

То значи да се дејство оператора може „пребацити“ са једног аргумента скаларног производа на други тако што се оператор замени транспонованом матрицом.

Међутим, у комплексном Хилбертовом простору само транспоновање више није довољно, јер унутрашњи производ садржи комплексно конјуговање. Због тога се уводи појам адјунгованог оператора. У бесконачнодимензионалном случају појављују се и техничка питања у вези са доменом оператора, али се у овом раду задржавамо на основној идеји и посматрамо ситуације у којима све формуле имају уобичајен смисао.

Дефиниција. Адјунговани оператор уз оператор A означава се са $A^\dagger$ и дефинише се условом

$$\langle u, Av \rangle = \langle A^\dagger u, v \rangle$$

за све $u, v \in \mathcal{H}$. У математичкој литератури често се користи и ознака A^* , али ћемо у овом раду користити ознаку $A^\dagger$. Ова формула значи да је $A^\dagger$ оператор који пребацује дејство A са једног аргумента унутрашњег производа на други.

У ортонормираној бази адјунгована матрица добија се тако што се матрица најпре

транспонује, а затим се сви њени елементи комплексно конјугују. Зато важи

$$A^\dagger = \overline{A}^T, \quad (A^\dagger)_{ij} = \overline{A_{ji}}.$$

Дакле, у реалном случају адјунговање се своди на транспоновање, док је у комплексном случају потребно водити рачуна и о комплексном конјуговању.

Адјунговање има неколико основних својстава која ћемо касније често користити. За све операторе A и B , као и за сваки скалар λ , важи

$$(A^\dagger)^\dagger = A, \quad (A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger, \quad (\lambda A)^\dagger = \overline{\lambda} A^\dagger,$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger.$$

Последња формула је посебно важна, јер показује да се при адјунговању поредак оператора обрће.

Посебно важни оператори су они који су једнаки свом адјунгованом оператору, односно за које важи $A = A^\dagger$. Они се зову самоадјунговани или Хермитски оператори.

4.2 Самоадјунговани (Хермитски) оператори

У претходном одељку увели смо адјунговани оператор и видели да он описује како се дејство оператора пребацује са једног аргумента унутрашњег производа на други. Сада природно посматрамо операторе који су једнаки свом адјунгованом оператору.

Оператор A назива се самоадјунговани, односно Хермитски, ако важи

$$A^\dagger = A.$$

То значи да се оператор не мења када пређемо на његов адјунговани оператор. Ово је посебна класа оператора која је добро прилагођена унутрашњем производу.

Из дефиниције адјунгованог оператора одмах добијамо еквивалентан услов

$$\langle u, Av \rangle = \langle Au, v \rangle$$

за све $u, v \in \mathcal{H}$. Ова формула значи да се оператор може „пребацити“ са једног аргумента унутрашњег производа на други без промене оператора. Управо зато су самоадјунговани оператори природно повезани са структуром Хилбертовог простора.

У ортонормираној бази адјунгована матрица добија се формулом

$$A^\dagger = \overline{A}^T.$$

Зато је матрица Хермитска ако важи

$$A = \overline{A}^T.$$

По елементима, ако је $A = (a_{ij})$, овај услов можемо записати као

$$a_{ij} = \overline{a_{ji}}.$$

Дакле, елемент из i -те врсте и j -те колоне мора бити комплексно конјугован елементу из j -те врсте и i -те колоне.

У посебном случају када матрица има само реалне елементе, комплексно конјуговање ништа не мења. Тада се Хермитски услов своди на

$$A^T = A.$$

Према томе, реалне Хермитске матрице су исто што и симетричне матрице.

Један пример Хермитске матрице је

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1+i \\ 1-i & 3 \end{pmatrix}.$$

За њу важи

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} 2 & 1+i \\ 1-i & 3 \end{pmatrix} = A.$$

Дијагонални елементи су реални, док су елементи ван дијагонале комплексно конјуговани. Управо то је типичан облик Хермитске матрице.

Једна основна особина самоадјунгованих оператора јесте да израз

$$\langle \psi, A\psi \rangle$$

представља реалан број. Заиста, ако је $A = A^\dagger$, онда важи

$$\overline{\langle \psi, A\psi \rangle} = \langle A\psi, \psi \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle.$$

Добијени број једнак је свом комплексно конјугованом броју, па зато мора бити реалан.

Ова особина је један од разлога зашто су самоадјунговани оператори важни у квантној механици. Изрази облика

$$\langle \psi, A\psi \rangle$$

имају реалну вредност, што их чини природним кандидатима за опис величина чије су измерене вредности реални бројеви.

Самоадјунговани оператори ће се зато појављивати као једна од централних класа оператора у наставку рада. Пре њихове пуне улоге у квантној механици, потребно је увести још неколико важних класа оператора и затим објаснити појам сопствених вредности и сопствених вектора.

4.3 Унитарни и позитивни оператори

Поред самоадјунгованих оператора, у Хилбертовом простору посебно се издвајају и унитарни и позитивни оператори. Унитарни оператори чувају геометријску структуру простора, док позитивни оператори прецизно изражавају појам ненегативности.

Унитарни оператори. Линеарни оператор U на Хилбертовом простору назива се унитарним ако важи

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I.$$

Еквивалентно, адјунговани оператор је инверз оператора U , односно

$$U^\dagger = U^{-1}.$$

Због тога се унитарни оператор може посматрати као аналогон ротације у Хилбертовом простору: он може променити положај вектора, али не мења дужине и углове који су задати унутрашњим производом.

За произвољне векторе $\psi, \phi \in \mathcal{H}$ важи

$$\langle U\psi | U\phi \rangle = \langle \psi | U^\dagger U\phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle.$$

Овде је употребљен услов $U^\dagger U = I$. Према томе, унитарни оператор чува унутрашњи производ.

Пошто је норма одређена унутрашњим производом, добијамо и

$$\|U\psi\|^2 = \langle U\psi | U\psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = \|\psi\|^2,$$

па је $\|U\psi\| = \|\psi\|$. Дакле, унитарни оператори чувају унутрашњи производ, норму и геометријску структуру простора. У квантној механици то је важно јер нормирани вектори стања треба да остану нормирани при променама које не представљају мерење.

Позитивни оператори. Линеарни оператор A назива се позитивним ако важи

$$A = A^\dagger, \quad \langle \psi | A\psi \rangle \geq 0$$

за сваки $\psi \in \mathcal{H}$. У том случају пишемо

$$A \geq 0.$$

Овај услов има смисла зато што је A самоадјунгован оператор, па је број $\langle \psi | A\psi \rangle$ реалан. Зато неједнакост заиста можемо разумети као услов ненегативности.

Један основни пример позитивног оператора јесте ортогонални пројектор на правац нормираног вектора $|\phi\rangle$:

$$P = |\phi\rangle\langle\phi|.$$

За сваки вектор $\psi \in \mathcal{H}$ важи

$$\langle \psi | P\psi \rangle = |\langle \phi | \psi \rangle|^2 \geq 0.$$

Пошто је ортогонални пројектор самоадјунгован, из ове формуле следи да је P позитиван оператор.

Други важан пример је оператор облика $B^\dagger B$. За сваки $\psi \in \mathcal{H}$ важи

$$\langle \psi | B^\dagger B\psi \rangle = \langle B\psi | B\psi \rangle = \|B\psi\|^2 \geq 0.$$

Оператор $B^\dagger B$ је самоадјунгован, па овај рачун показује да је сваки оператор тог облика позитиван.

4.4 Сопствене вредности и сопствени вектори

Линеарни оператор уопштено може да промени и правац и дужину вектора. Међутим, посебно су важни они вектори чији правац оператор не мења. На таквим векторима оператор делује најједноставније: он их само множи неким бројем.

Нека је A линеарни оператор на простору $\mathcal{H}$. Ненулни вектор $v \in \mathcal{H}$ назива се сопствени вектор оператора A ако постоји број λ такав да важи

$$Av = \lambda v.$$

Број λ назива се сопствена вредност која одговара сопственом вектору v . У Дираковој нотацији исти услов пишемо као

$$A|v\rangle = \lambda|v\rangle.$$

Услов $v \neq 0$ мора бити део дефиниције. Заиста, за нулни вектор би једнакост

$$A0 = \lambda 0$$

важила за сваки број λ , па нулни вектор не би давао никакву информацију о оператору.

Геометријски, сопствени вектор задаје правац који оператор не мења. Сопствена вредност говори шта се на том правцу дешава: ако је λ веће од 1, вектор се растеже; ако је између 0 и 1, вектор се смањује; ако је негативно, мења се и смер. У комплексном простору сопствена вредност може бити комплексна, па множење може да садржи и промену фазе.

Једноставан пример је дијагонална матрица

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}.$$

За стандардне базне векторе добијамо

$$A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

и

$$A \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Зато су стандардни базни вектори сопствени вектори, а одговарајуће сопствене вредности су λ_1 и λ_2 . Оператор у овом случају не меша координатне правце, већ сваки од њих само множи одговарајућим бројем.

У општем случају сопствене вредности матрице добијају се из једначине

$$Av = \lambda v.$$

Премештањем свих чланова на једну страну добијамо

$$(A - \lambda I)v = 0.$$

Пошто тражимо нетривијално решење $v \neq 0$, матрица $A - \lambda I$ не сме бити инвертибилна. Зато мора важити

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

Ова једначина назива се карактеристична једначина. Полином

$$p_A(\lambda) = \det(A - \lambda I)$$

назива се карактеристични полином оператора, односно матрице A . Његови корени су сопствене вредности оператора A .

Када се пронађе сопствена вредност λ , одговарајући сопствени вектори добијају се решавањем система

$$(A - \lambda I)v = 0.$$

Скуп решења овог система је

$$E_\lambda = \ker(A - \lambda I).$$

Овај скуп назива се сопствени простор који одговара сопственој вредности λ . Он садржи све сопствене векторе за ту сопствену вредност, заједно са нултим вектором.

Размотримо пример матрице

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Она замењује координате вектора, јер важи

$$B \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}.$$

Карактеристични полином је

$$\det(B - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 1.$$

Зато су сопствене вредности

$$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = -1.$$

За $\lambda_1 = 1$ решавамо

$$(B - I)v = 0,$$

па добијамо сопствене векторе пропорционалне вектору

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Заиста,

$$B \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

За $\lambda_2 = -1$ добијамо сопствене векторе пропорционалне вектору

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

јер важи

$$B \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Овај пример показује да сопствени вектори издвајају правце на којима је дејство оператора посебно једноставно.

Сопствени вектори су корисни и при степеновању оператора. Ако је

$$Av = \lambda v,$$

онда је

$$A^2v = A(Av) = A(\lambda v) = \lambda Av = \lambda^2 v.$$

Понављањем истог поступка добијамо

$$A^n v = \lambda^n v, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Дакле, на сопственом правцу степеновање оператора своди се на степеновање броја.

Сада посматрамо шта се дешава са сопственим вредностима код неких посебних класа оператора које су већ уведене.

Нека је A самоадјунгован оператор, то јест $A = A^\dagger$, и нека је

$$Av = \lambda v, \quad v \neq 0.$$

Тада је

$$\langle v, Av \rangle = \langle v, \lambda v \rangle = \lambda \langle v, v \rangle.$$

Пошто је A самоадјунгован, број $\langle v, Av \rangle$ је реалан. Са друге стране, $\langle v, v \rangle > 0$, јер је $v \neq 0$. Зато из једнакости

$$\lambda \langle v, v \rangle = \langle v, Av \rangle$$

слиди да је λ реалан број. Дакле, сопствене вредности самоадјунгованог оператора су реалне.

За самоадјунговане операторе важи и ортогоналност сопствених вектора који одговарају различитим сопственим вредностима. Нека су

$$Av_1 = \lambda_1 v_1, \quad Av_2 = \lambda_2 v_2,$$

и нека је $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Пошто су сопствене вредности самоадјунгованог оператора реалне, користећи самоадјунгованост добијамо

$$\langle v_1, Av_2 \rangle = \langle Av_1, v_2 \rangle.$$

Лева страна је

$$\langle v_1, Av_2 \rangle = \lambda_2 \langle v_1, v_2 \rangle,$$

а десна страна је

$$\langle Av_1, v_2 \rangle = \lambda_1 \langle v_1, v_2 \rangle.$$

Зато важи

$$\lambda_1 \langle v_1, v_2 \rangle = \lambda_2 \langle v_1, v_2 \rangle.$$

Пошто је $\lambda_1 \neq \lambda_2$, мора бити

$$\langle v_1, v_2 \rangle = 0.$$

Дакле, сопствени вектори самоадјунгованог оператора који одговарају различитим сопственим вредностима су ортогонални.

Ако је A позитиван оператор, онда су његове сопствене вредности ненегативне. Нека је

$$Av = \lambda v, \quad v \neq 0.$$

Из позитивности добијамо

$$\langle v, Av \rangle \geq 0.$$

Са друге стране,

$$\langle v, Av \rangle = \lambda \langle v, v \rangle.$$

Пошто је $\langle v, v \rangle > 0$, следи

$$\lambda \geq 0.$$

Дакле, сопствене вредности позитивног оператора су ненегативне.

Ако је U унитарни оператор, онда његове сопствене вредности имају модул 1. Нека је

$$Uv = \lambda v, \quad v \neq 0.$$

Пошто унитарни оператор чува норму, важи

$$\|Uv\| = \|v\|.$$

Са друге стране, из $Uv = \lambda v$ следи

$$\|Uv\| = \|\lambda v\| = |\lambda| \|v\|.$$

Како је $v \neq 0$, добијамо

$$|\lambda| = 1.$$

Према томе, сопствене вредности унитарног оператора леже на јединичној кружници у комплексној равни.

Ови резултати показују да различите класе оператора имају различита ограничења на сопствене вредности. Код самоадјунгованих оператора сопствене вредности су реалне, код позитивних су ненегативне, а код унитарних имају модул 1.

На крају, важно је знати да оператор не мора имати довољно сопствених вектора да би се цео простор описао помоћу њих. Посматрајмо матрицу

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Њен карактеристични полином је

$$\det(C - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 1 \\ 0 & 1 - \lambda \end{pmatrix} = (1 - \lambda)^2.$$

Зато је једина сопствена вредност $\lambda = 1$. Сада решавамо

$$(C - I)v = 0.$$

Добијамо

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0,$$

па је $y = 0$, док је x произвољан. Зато је

$$E_1 = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}.$$

Овај сопствени простор је једнодимензионалан, па не може да разапне цео простор $\mathbb{C}^2$. Није, дакле, довољно знати само сопствене вредности; важно је и да ли постоји довољно сопствених вектора. Постојање довољно сопствених вектора постаје кључно за разумевање структуре оператора.

4.5 Сопствена база, дијагонализација и спектрална декомпозиција

Није довољно знати само сопствене вредности оператора. Важно је и да ли постоји довољно сопствених вектора да они могу да образују базу целог простора. Ако таква база постоји, сваки вектор се може раставити на сопствене правце, а оператор се у тој бази записује у најједноставнијем могућем облику.

Најједноставније матрице за разумевање су дијагоналне матрице. Нека је

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

Ако је

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix},$$

онда је

$$Dx = \begin{pmatrix} \lambda_1 x_1 \\ \lambda_2 x_2 \\ \vdots \\ \lambda_n x_n \end{pmatrix}.$$

Краће, можемо писати

$$D(x_1, x_2, \dots, x_n) = (\lambda_1 x_1, \lambda_2 x_2, \dots, \lambda_n x_n).$$

Дијагонална матрица не меша координате вектора. Прва координата остаје прва, друга остаје друга, и тако даље; свака координата се само множи својим бројем са дијагонале. У тој бази оператор делује независно на сваки координатни правац.

Због тога су и степени дијагоналне матрице једноставни. Ако је

$$D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n),$$

онда је

$$D^k = \text{diag}(\lambda_1^k, \lambda_2^k, \dots, \lambda_n^k), \quad k \in \mathbb{N}.$$

Другим речима, степеновање матрице своди се на степеновање бројева на дијагонали. Управо је то главна мотивација за дијагонализацију: сложенији оператор желимо да представимо у облику који је, у одговарајућој бази, дијагоналан.

Дијагонализација је зато тражење базе у којој оператор има дијагоналан облик. Кажемо да је матрица, односно оператор, дијагонализабилан ако постоји инвертибилна матрица S и дијагонална матрица D такве да важи

$$A = SDS^{-1}.$$

Ова формула значи да је оператор A сличан дијагоналној матрици D . Колоне матрице S су сопствени вектори оператора A , а дијагонални елементи матрице D су његове сопствене вредности.

Покажимо одакле ова формула долази. Нека су

$$e_1, e_2, \dots, e_n$$

сопствени вектори оператора A који образују базу простора, и нека важи

$$Ae_i = \lambda_i e_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Формирајмо матрицу

$$S = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix},$$

чије су колоне управо ови сопствени вектори. Пошто они чине базу, матрица S је инверти-

билна. Са друге стране,

$$AS = \begin{pmatrix} Ae_1 & Ae_2 & \cdots & Ae_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 e_1 & \lambda_2 e_2 & \cdots & \lambda_n e_n \end{pmatrix}.$$

Ако је

$$D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n),$$

онда је последња једнакост исто што и

$$AS = SD.$$

Ова једнакост значи да A делује на сваку колону матрице S као множење одговарајућом сопственом вредношћу. Множењем здесна са S^{-1} добијамо

$$A = SDS^{-1}.$$

Тако видимо да је дијагонализација могућа онда када оператор има базу састављену од сопствених вектора.

Важно је нагласити да није сваки оператор дијагонализабилан. Није довољно да оператор има неке сопствене векторе; потребно је да их има довољно да разапињу цео простор. Ако сопствени вектори не могу да образују базу, онда не можемо добити дијагонални запис у претходном смислу.

Код самоадјунгованих, односно Хермитских оператора, ситуација је посебно добра: у коначно-димензионом комплексном Хилбертовом простору могуће је изабрати ортонормирану базу сопствених вектора. За такве операторе дијагонализација има облик

$$A = UDU^\dagger.$$

Овде је U унитарна матрица чије су колоне ортонормирани сопствени вектори оператора A , а D је реална дијагонална матрица сопствених вредности. Пошто за унитарну матрицу важи

$$U^{-1} = U^\dagger,$$

инверз се добија узимањем адјунговане матрице.

Спектрална теорема. Ако је A самоадјунгован оператор на коначнодимензионалном комплексном Хилбертовом простору $\mathcal{H}$, онда постоји ортонормирана база простора $\mathcal{H}$ састављена од сопствених вектора оператора A . У тој бази оператор има дијагоалан облик.

Из спектралне теореме природно се добија спектрална декомпозиција оператора. Нека је $(e_1, \dots, e_n)$ ортонормирана сопствена база оператора A и нека важи

$$Ae_i = \lambda_i e_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

За сваки вектор e_i дефинишемо ортогонални пројектор

$$P_i = |e_i\rangle\langle e_i|.$$

Овај пројектор издваја компоненту вектора у правцу сопственог вектора $|e_i\rangle$. Ако је $|x\rangle \in \mathcal{H}$, онда је

$$P_i|x\rangle = |e_i\rangle\langle e_i|x\rangle.$$

Број $\langle e_i|x\rangle$ је координата, односно компонента вектора $|x\rangle$ у правцу $|e_i\rangle$. Зато пројектор P_i узима само тај део вектора.

Пошто је база ортонормирана, сваки вектор може се раставити по тој бази, а оператор A може се записати као

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i P_i.$$

То је спектрална декомпозиција у случају када сопствене вредности посматрамо појединачно. У Дираковој нотацији исти запис гласи

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i|.$$

Геометријски, сваки пројектор P_i издваја компоненту вектора у правцу e_i . Оператор A ту компоненту множи бројем λ_i , а укупан резултат добија се сабирањем свих тако добијених компоненти.

Понекад се дешава да истој сопственој вредности одговара више линеарно независних сопствених вектора. Тада кажемо да је сопствена вредност дегенерисана. Уместо да пишемо посебан пројектор за сваки сопствени вектор, можемо посматрати цео сопствени простор

$$E_\lambda = \{v \in \mathcal{H} : Av = \lambda v\}.$$

Нека је P_λ ортогонални пројектор на тај сопствени простор. Тада се спектрална декомпозиција може записати у облику

$$A = \sum_{\lambda} \lambda P_\lambda,$$

где се сабирање врши по различитим сопственим вредностима, а не по појединачним сопственим векторима. Овај запис је погодан јер једним пројектором обухвата цео потпростор који одговара истој сопственој вредности.

Спектрална декомпозиција је корисна и за дефинисање функција оператора. Ако је

$$A = \sum_i \lambda_i P_i,$$

онда се за погодну функцију f природно дефинише

$$f(A) = \sum_i f(\lambda_i) P_i.$$

То значи да се функција примењује на сопствене вредности, док пројектори остају исти.

Посебно важан пример дају позитивни оператори. Ако је $A \geq 0$, онда су његове сопствене

вредности ненегативне, па се у спектралном запису може писати

$$A = \sum_i \lambda_i P_i, \quad \lambda_i \geq 0.$$

Зато се природно дефинише

$$\sqrt{A} = \sum_i \sqrt{\lambda_i} P_i.$$

Када се овај оператор помножи самим собом, сваки број $\sqrt{\lambda_i}$ постаје λ_i , па важи

$$(\sqrt{A})^2 = A.$$

У квантној механици овај запис добија посебан значај: сопствене вредности самоадјунгованог оператора повезују се са вредностима физичке величине, док пројектори издвајају одговарајуће компоненте стања. Зато спектрална декомпозиција представља један од главних разлога због којих су Хилбертови простори природан језик квантне теорије.

Спектрална декомпозиција је посебно природна за самоадјунговане операторе. За општије операторе постоји сродна идеја која се назива сингуларна декомпозиција, или SVD. Она оператор описује помоћу две ортонормиране базе и ненегативних сингуларних вредности. У овом раду довољно је само поменути је као природно проширење идеје дијагонализације.

За крај, нагласимо још једном везу спектралне декомпозиције са пројекторима. Нека је A самоадјунгован оператор са ортонормалном базом сопствених вектора $|e_k\rangle$ и сопственим вредностима λ_k , тако да важи

$$A|e_k\rangle = \lambda_k|e_k\rangle.$$

Користећи резолуцију идентитета

$$I = \sum_k |e_k\rangle\langle e_k|,$$

добивамо спектрални запис

$$A = \sum_k \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k|.$$

Овде је $|e_k\rangle\langle e_k|$ пројектор на сопствени правац који одговара сопственој вредности λ_k . Зато спектрална декомпозиција значи да се оператор A разлаже на збир пројектора, при чему сваки пројектор носи одговарајућу сопствену вредност.

Ако више сопствених вектора има исту сопствену вредност λ , уводимо пројектор на цео сопствени потпростор:

$$P_\lambda = \sum_{k:\lambda_k=\lambda} |e_k\rangle\langle e_k|.$$

Тада се спектрална декомпозиција записује као

$$A = \sum_\lambda \lambda P_\lambda.$$

Ако је стање записано у облику

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |e_k\rangle,$$

онда $P_\lambda|\psi\rangle$ издваја део стања који припада сопственој вредности λ :

$$P_\lambda|\psi\rangle = \sum_{k:\lambda_k=\lambda} c_k |e_k\rangle.$$

Квадрат норме тог дела је

$$\|P_\lambda|\psi\rangle\|^2 = \sum_{k:\lambda_k=\lambda} |c_k|^2.$$

У следећој глави ова величина добиће физичко тумачење као вероватноћа да мерење да вредност λ .

5 Хилбертов простор као језик квантне механике

У претходним главама уведени су Хилбертов простор, унутрашњи производ, норма, ортонормалне базе, bra-ket нотација, линеарни функционали, пројектори и оператори. До сада су ови појмови углавном били посматрани као математички објекти, са нагласком на њихову структуру и основне особине.

У овој глави исти појмови добијају физичко значење у квантној механици. Стања квантног система биће описана векторима Хилбертовог простора, док ће физичке величине које меримо бити описане операторима. Пројектори и спектрална декомпозиција омогућиће да се касније јасно формулишу мерење и вероватноће могућих исхода.

Главна идеја је да Хилбертов простор није само апстрактан простор са унутрашњим производом, већ природан језик квантне механике. У њему се стања, физичке величине и временска еволуција могу записати на јединствен и прецизан начин.

5.1 Стања квантног система

Основни објекат у квантној механици је стање система. У овом раду стање квантног система описујемо ket-вектором у комплексном Хилбертовом простору $\mathcal{H}$:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Овај вектор не треба замишљати као обичан вектор положаја у простору, већ као математички запис који садржи информацију о квантном стању система.

Стање се обично нормализује условом

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

Овај услов значи да је укупна вероватноћа свих могућих исхода једнака јединици. Детаљно правило мерења не уводимо у овом потпоглављу; оно ће бити објашњено касније.

Постоји и једна важна напомена о запису стања. Два ket-вектора која се разликују само за комплексну фазу представљају исто физичко стање:

$$|\psi\rangle \sim e^{i\alpha}|\psi\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{R}.$$

Другим речима, глобална фаза не мења физички садржај стања.

Стање квантног система може се мењати током времена. Ако је систем у тренутку t_0 описан стањем $|\psi(t_0)\rangle$, онда је у каснијем тренутку t описан стањем $|\psi(t)\rangle$. Ова два стања повезујемо оператором временске еволуције:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle.$$

Оператор $\hat{U}(t, t_0)$ описује како се стање система мења од тренутка t_0 до тренутка t .

Временска еволуција без мерења мора чувати норму стања. Зато оператор $\hat{U}(t, t_0)$ мора бити унитаран:

$$\hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) = I.$$

Заиста, тада важи

$$\|\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle\|^2 = \langle\psi(t_0)|\hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle.$$

Унитарни оператор, дакле, чува норму, па самим тим и укупну вероватноћу.

Оператори временске еволуције имају и природну особину композиције:

$$\hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_2, t_0).$$

То значи да је свеједно да ли систем еволуира директно из t_0 у t_2 , или најпре из t_0 у t_1 , па затим из t_1 у t_2 .

Посебну улогу у временској еволуцији има Хамилтонијан $\hat{H}$. Он одређује како се стање система мења током времена. У апстрактном облику Шредингера једначина гласи

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle.$$

Ако Хамилтонијан $\hat{H}$ не зависи од времена, оператор временске еволуције има облик

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}.$$

Ова формула показује да се временска еволуција добија експоненцирањем Хамилтонијана. У сложенијим системима, на пример када Хамилтонијан зависи од времена, оператор временске еволуције може имати другачији облик, али основна идеја остаје иста: $\hat{U}(t, t_0)$ повезује стање у тренутку t_0 са стањем у тренутку t .

Као кратак пример, посматрајмо спин- $\frac{1}{2}$ честицу у константном магнетном пољу дуж z -осе. У бази

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

узмимо Хамилтонијан

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Пошто $\hat{H}$ не зависи од времена, оператор временске еволуције је

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}.$$

Заменом Хамилтонијана добија се

$$\hat{U}(t) = e^{-i \frac{\omega t}{2} \sigma_z}.$$

Пошто је σ_z дијагонална матрица, експоненцијал се рачуна по дијагоналним елементима:

$$\hat{U}(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}.$$

Ако је почетно стање

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle),$$

онда је

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i\omega t/2} |\uparrow\rangle + e^{i\omega t/2} |\downarrow\rangle).$$

До физички небитне укупне фазе, ово се може записати као

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + e^{i\omega t} |\downarrow\rangle).$$

Овај пример показује да Хамилтонијан одређује како се фазе компоненти стања мењају током времена, а тиме и како се развија цело квантно стање.

5.2 Опсервабле као самоадјунговани оператори

У претходном поглављу стање квантног система описали смо ket-вектором $|\psi\rangle$ у Хилбертовом простору. Други основни појам у квантној механици јесу физичке величине које се могу посматрати: енергија, импулс, положај, спин и слично. Такве физичке величине називају се опсервабле.

У математичком опису квантне механике опсервабли придружујемо оператор на Хилбертовом простору. Уобичајено је да се оператори који представљају физичке величине означавају капицом, па опсерваблу записујемо као $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{H}$ и слично. На пример, Хамилтонијан $\hat{H}$ представља енергију система, док оператори спина $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ и $\hat{S}_z$ представљају компоненте спина.

Пошто резултати физичких мерења морају бити реални бројеви, оператор који представља опсерваблу треба да има реалне сопствене вредности. Управо зато се опсервабле описују самоадјунгованим операторима. Дакле, оператор $\hat{A}$ који представља опсерваблу задовољава услов

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}.$$

Овај услов је математички израз чињенице да $\hat{A}$ представља реалну физичку величину.

Ако је $|a\rangle$ сопствени вектор оператора $\hat{A}$, а a одговарајућа сопствена вредност, онда важи

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

Пошто је $\hat{A}$ самоадјунгован, број a је реалан. Ове сопствене вредности представљају вредности које су природно повезане са датом физичком величином. У овом потпоглављу не уводимо још правило мерења, већ само наглашавамо зашто су самоадјунговани оператори прави математички објекти за опис опсервабли.

Самоадјунгованост има још једну важну последицу. Сопствени вектори који одговарају различитим сопственим вредностима међусобно су ортогонални. Ако важи

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle, \quad \hat{A}|b\rangle = b|b\rangle, \quad a \neq b,$$

онда је

$$\langle a | b \rangle = 0.$$

То значи да самоадјунгован оператор не даје само реалне бројеве, већ и природно разлаже Хилбертов простор на ортогоналне правце или потпросторе.

У коначнодимензионалном случају то разлагање може се записати помоћу ортонормалне базе сопствених вектора. Ако оператор $\hat{A}$ има ортонормалну базу сопствених вектора $|a_k\rangle$, при чему је

$$\hat{A}|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle,$$

онда сваки вектор стања можемо развити у облику

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle.$$

У тој бази оператор $\hat{A}$ има дијагоналан облик:

$$\hat{A} = \sum_k a_k |a_k\rangle \langle a_k|.$$

Ово је спектрални запис опсервабле. Он показује да је опсервабла одређена својим сопственим вредностима и пројекторима на одговарајуће сопствене правце.

Ако је нека сопствена вредност дегенерисана, уместо пројектора на један сопствени правац посматрамо пројектор на цео сопствени потпростор. Тада се спектрални запис пише у облику

$$\hat{A} = \sum_a a P_a,$$

где је P_a ортогонални пројектор на сопствени потпростор који одговара сопственој вредности a . Овај запис је посебно користан зато што одваја геометријски део, представљен пројекторима, од бројевног дела, представљеног реалним сопственим вредностима.

Као једноставан пример узмемо опсерваблу спина дуж z -осе за спин- $\frac{1}{2}$ систем. Њој одговара оператор

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Матрица σ_z је самоадјунгована, па је самоадјунгован и оператор $\hat{S}_z$. За векторе

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

важи

$$\hat{S}_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle, \quad \hat{S}_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle.$$

Зато су $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ сопствени вектори оператора $\hat{S}_z$, а одговарајуће сопствене вредности су $\frac{\hbar}{2}$ и $-\frac{\hbar}{2}$.

У овој бази оператор $\hat{S}_z$ има спектрални запис

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - \frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|.$$

Ова формула јасно показује улогу пројектора: они издвајају правце који одговарају различитим сопственим вредностима опсервабле.

Слично, Хамилтонијан $\hat{H}$ је опсервабла енергије. Његове сопствене вредности називају се енергетски нивои, а сопствени вектори стационарна стања. Ако је

$$\hat{H}|E_k\rangle = E_k|E_k\rangle,$$

онда број E_k представља енергију која је придружена стању $|E_k\rangle$. Пошто је $\hat{H}$ самоадјунгован, сви енергетски нивои су реални бројеви.

Тако се у квантној механици физичка величина не описује само једним бројем, већ целим самоадјунгованим оператором. Његове сопствене вредности дају могуће бројевне вредности опсервабле, а сопствени вектори и пројектори описују геометријску структуру простора стања. Ова веза између самоадјунгованих оператора, спектралне декомпозиције и физичких величина припрема терен за формулацију квантног мерења и вероватноћа у следећем потпоглављу.

5.3 Квантно мерење и вероватноће

Квантно мерење је интеракција са квантним системом којом добијамо класичну информацију, односно један конкретан резултат мерења. За разлику од класичне механике, квантна механика у општем случају не предвиђа тачан исход појединачног мерења, већ вероватноће могућих исхода.

Ако је

$$\hat{A}|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle,$$

онда су a_k могући исходи мерења опсервабле $\hat{A}$. У овом потпоглављу нас занима са којим вероватноћама се ти исходи јављају када је систем у стању $|\psi\rangle$.

Нека је стање нормирано и развијено по сопственој бази опсервабле $\hat{A}$:

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k|a_k\rangle, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

Тада Вонг-ово правило каже да је вероватноћа исхода a_k једнака

$$\mathbb{P}(a_k) = |c_k|^2.$$

Пошто је

$$c_k = \langle a_k | \psi \rangle,$$

исто правило можемо записати као

$$\mathbb{P}(a_k) = |\langle a_k | \psi \rangle|^2.$$

Број c_k назива се амплитуда исхода a_k , а вероватноћа је квадрат модула те амплитуде.

Ова формула има једноставну геометријску интерпретацију. Пројектор на правац $|a_k\rangle$ је

$$\hat{P}_k = |a_k\rangle\langle a_k|.$$

Његовим деловањем на стање $|\psi\rangle$ добијамо

$$\hat{P}_k|\psi\rangle = |a_k\rangle\langle a_k | \psi \rangle = c_k|a_k\rangle.$$

Зато је

$$\|\hat{P}_k|\psi\rangle\|^2 = |c_k|^2.$$

Вонг-ово правило, дакле, каже да је вероватноћа исхода једнака квадрату норме оног дела стања који припада том исходу.

Ако је $|\psi\rangle \neq 0$ ненормирано, онда је нормирано стање

$$|\psi_{\text{norm}}\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}.$$

Зато је општа формула

$$\mathbb{P}(a_k) = \frac{|\langle a_k | \psi \rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Делење са $\langle\psi|\psi\rangle$ обезбеђује да збир свих вероватноћа буде једнак јединици.

Пројекторски облик правила мерења нарочито је користан када више сопствених вектора одговара истој сопственој вредности λ . Тада меримо вредност λ , али стање може лежати у целом одговарајућем сопственом потпростору. Ако тај потпростор има ортонормирану базу $|a_{\lambda,i}\rangle$, онда је пројектор на њега

$$\hat{P}_\lambda = \sum_i |a_{\lambda,i}\rangle\langle a_{\lambda,i}|.$$

За нормирано стање важи

$$\mathbb{P}(\lambda) = \|\hat{P}_\lambda|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\hat{P}_\lambda|\psi\rangle.$$

За ненормирано стање добијамо

$$\mathbb{P}(\lambda) = \frac{\langle\psi|\hat{P}_\lambda|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Пројектор $\hat{P}_\lambda$ издваја део стања који припада исходу λ . Пошто је $\hat{P}_\lambda$ позитиван оператор, добијена вероватноћа је ненегативна.

Ако мерење да вредност λ , онда стање непосредно после мерења постаје нормализована пројекција почетног стања на одговарајући сопствени потпростор:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \frac{\hat{P}_\lambda |\psi\rangle}{\|\hat{P}_\lambda |\psi\rangle\|}.$$

У недегенерисаном случају, ако је измерена вредност a_k , стање прелази у $|a_k\rangle$, до физички небитне фазе. У овом раду колапс посматрамо као математичко правило које описује стање непосредно после мерења, без уласка у физички механизам колапса.

Кет-вектор $|\psi\rangle$ је апстрактан запис стања. Таласна функција настаје када исто стање запишемо у положајној репрезентацији, односно у бази генерализованих сопствених стања оператора положаја $\hat{X}$. Формално,

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle.$$

Таласна функција је, дакле, коефицијент стања $|\psi\rangle$ у бази положаја. Формални развој гласи

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) |x\rangle dx.$$

Ово је континуални аналог развоја по ортонормалној бази.

Пошто положај има континуалан скуп могућих вредности, $|\psi(x)|^2$ није вероватноћа да се честица налази тачно у тачки x , већ густина вероватноће:

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2.$$

Вероватноћа да се честица нађе у интервалу $[a, b]$ је

$$\mathbb{P}(x \in [a, b]) = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx.$$

Ако је стање нормирано, онда важи

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

У основном $1s$ стању атома водоника таласна функција електрона има облик

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0},$$

где је a_0 Боров радијус. Пошто је стање сферно симетрично, вероватноћа за растојање од језгра добија се помоћу радијалне густине

$$p(r) = 4\pi r^2 |\psi(r)|^2.$$

Заменом добијамо

$$p(r) = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0}.$$

Максимум ове функције добија се из услова

$$p'(r) = 0,$$

што даје

$$r = a_0.$$

Дакле, електрон у основном стању водоника нема фиксну путању око језгра, али је највероватније растојање од језгра једнако Боровом радијусу.

Ворн-ово правило повезује апстрактно стање са вероватноћама исхода мерења. Пројектори описују део стања који припада датом исходу, а таласна функција представља положајну репрезентацију кет-вектора.

5.4 Очекивана вредност, дисперзија и комутатори

После увођења вероватноћа исхода мерења природно је размотрити њихов просек. Очекивана вредност није нужно резултат који ће се добити у једном мерењу. Она је просечан резултат који бисмо добили ако бисмо исто мерење поновили много пута на исто припремљеним системима.

За фиксирану опсерваблу $\hat{A}$ очекивана вредност је пресликавање

$$\langle \hat{A} \rangle : \mathcal{H}_{\text{norm}} \rightarrow \mathbb{R}, \quad |\psi\rangle \mapsto \langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle.$$

Овде је $\mathcal{H}_{\text{norm}}$ скуп нормираних стања. Пошто је $\hat{A}$ опсервабла, број $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ је реалан.

Ова формула је у складу са вероватносним тумачењем из претходног потпоглавља. Ако је

$$\hat{A} = \sum_k a_k |a_k\rangle \langle a_k|$$

и ако је

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle,$$

онда важи

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_k a_k |c_k|^2.$$

То је управо просек могућих исхода a_k , тежински сабран њиховим вероватноћама $|c_k|^2$. Очекивана вредност, међутим, не мора бити један од могућих исхода мерења. На пример, ако су могући исходи $+1$ и -1 , сваки са вероватноћом $\frac{1}{2}$, онда је очекивана вредност 0 , иако 0 није могући исход.

У положајној репрезентацији, ако стање има таласну функцију $\psi(x)$, очекивана вредност оператора $\hat{A}$ може се записати као

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) (\hat{A}\psi)(x) dx.$$

Важно је да оператор $\hat{A}$ делује на $\psi(x)$. Ово је посебно важно када $\hat{A}$ садржи изводе, као што је случај код оператора импулса.

Поред просечне вредности, важно је знати и колико су исходи мерења распршени око тог просека. За фиксирану опсерваблу $\hat{A}$ дисперзија је пресликавање

$$(\Delta A)^2 : \mathcal{H}_{\text{norm}} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}.$$

За стање $|\psi\rangle$ дефинишемо

$$(\Delta A)_{\psi}^2 = \left\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\psi} I)^2 \right\rangle_{\psi}.$$

Еквивалентно, важи

$$(\Delta A)_{\psi}^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle_{\psi} - \langle \hat{A} \rangle_{\psi}^2.$$

Дисперзија мери колико су могући резултати мерења распршени око очекиване вредности. Ако је дисперзија мала, исходи су концентрисани близу просека; ако је велика, исходи су више распршени.

Овде се природно користи појам позитивног оператора. Пошто је $\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\psi} I$ самоадјунгован оператор, његов квадрат је позитиван:

$$(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\psi} I)^2 \geq 0.$$

Зато је

$$(\Delta A)_{\psi}^2 \geq 0.$$

Ово је директна примена позитивних оператора уведених у глави 4.3.

Следећи важан појам је комутатор. Он мери колико је важно којим редоследом делују два оператора. Комутатор је пресликавање

$$[\cdot, \cdot] : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \times \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}),$$

дато формулом

$$(\hat{A}, \hat{B}) \mapsto [\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Ако је $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, онда оператори комутију и редослед њиховог деловања није битан. Ако је $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, онда редослед деловања може бити битан. Из дефиниције следи и запис

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + [\hat{A}, \hat{B}].$$

Зато комутатор можемо разумети као меру тога колико се производ оператора промени када им заменимо редослед.

Физички значај комутатора посебно је важан код опсервабли. Ако две опсервабле $\hat{A}$ и $\hat{B}$ комутију, онда у добрим условима могу имати заједничку сопствену базу. То значи да постоје стања у којима обе величине имају одређене вредности истовремено. Ако две опсервабле не комутију, онда уопштено не морају имати заједничку сопствену базу. Тада стање које је сопствено за једну опсерваблу може бити суперпозиција сопствених стања друге. То је идејни разлог због ког некомутативност води ка неодређености.

Најважнији пример у квантној механици јесу оператор положаја $\hat{X}$ и оператор импулса $\hat{P}$. За њих важи

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar I.$$

Овај комутатор ће у следећем потпоглављу довести до Хајзенбергове релације неодређености.

Као кратак пример посматрајмо поларизацију фотона. Нека је фотон поларизован под углом 45° , па је његово стање

$$|\psi\rangle = | + 45^\circ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Опсервабла за мерење поларизације дуж осе под углом θ дата је матрицом

$$\hat{O}_\theta = \begin{pmatrix} \cos(2\theta) & \sin(2\theta) \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) \end{pmatrix}.$$

Тада је

$$\hat{O}_\theta |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos(2\theta) + \sin(2\theta) \\ \sin(2\theta) - \cos(2\theta) \end{pmatrix}.$$

Зато добијамо

$$\langle \hat{O}_\theta \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{O}_\theta | \psi \rangle = \sin(2\theta).$$

Могући исходи овог мерења су $+1$ и -1 . Зато је

$$\langle \hat{O}_\theta \rangle_\psi = \mathbb{P}(+1) - \mathbb{P}(-1),$$

а пошто је

$$\mathbb{P}(+1) + \mathbb{P}(-1) = 1,$$

следи

$$\mathbb{P}(+1) = \frac{1 + \sin(2\theta)}{2}, \quad \mathbb{P}(-1) = \frac{1 - \sin(2\theta)}{2}.$$

Ако је $\theta = 45^\circ$, онда је $\langle \hat{O}_\theta \rangle_\psi = 1$, па је $\mathbb{P}(+1) = 1$. Ако је $\theta = 0^\circ$, онда је $\langle \hat{O}_\theta \rangle_\psi = 0$, па су вероватноће $\frac{1}{2}$ и $\frac{1}{2}$. Ако је $\theta = -45^\circ$, онда је $\langle \hat{O}_\theta \rangle_\psi = -1$, па је $\mathbb{P}(-1) = 1$.

Очекивана вредност описује просечан резултат мерења, дисперзија описује ширину расподеле могућих исхода, а комутатор описује однос две опсервабле. Ови појмови директно припремају следеће потпоглавље о Хајзенберговој релацији неодређености.

5.5 Хајзенбергова релација неодређености

За крај ове главе изводимо једну од најпознатијих последица квантног формализма: Хајзенбергову релацију неодређености. У њој се заједно користе појмови које смо раније увели: опсервабле, очекивана вредност, дисперзија и комутатор. Зато ова релација јасно показује како апстрактна структура Хилбертовог простора добија директно физичко значење.

Нека је $\hat{A}$ опсервабла, а $|\psi\rangle$ нормирано стање. Стандардна девијација, односно неодређе-

ност опсервабле $\hat{A}$ у том стању, дефинише се као

$$\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{A} \rangle_\psi^2}.$$

Она мери распршеност могућих резултата мерења опсервабле $\hat{A}$ око њене очекиване вредности.

За две самоадјунговане опсервабле $\hat{A}$ и $\hat{B}$ важи Робертсонова релација

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi \right|.$$

Она показује да комутатор одређује доњу границу производа неодређености. Ако је комутатор различит од нуле, две величине се у општем случају не могу обе учинити произвољно прецизним у истом стању.

Да бисмо доказали ову релацију, уводимо центриране операторе

$$\tilde{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi \hat{I}, \quad \tilde{B} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\psi \hat{I}.$$

Тада је

$$(\Delta A)_\psi^2 = \langle \tilde{A}^2 \rangle_\psi, \quad (\Delta B)_\psi^2 = \langle \tilde{B}^2 \rangle_\psi.$$

Дефинишимо векторе

$$|f\rangle = \tilde{A}|\psi\rangle, \quad |g\rangle = \tilde{B}|\psi\rangle.$$

Применом Коши–Шварцове неједнакости добијамо

$$\langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2.$$

Пошто су $\tilde{A}$ и $\tilde{B}$ самоадјунговани, ово даје

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq |\langle \tilde{A} \tilde{B} \rangle_\psi|^2.$$

Сада посматрамо имагинарни део броја

$$\langle \tilde{A} \tilde{B} \rangle_\psi.$$

Он је повезан са комутатором на следећи начин:

$$2i \operatorname{Im} \langle \tilde{A} \tilde{B} \rangle_\psi = \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle_\psi = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi.$$

Последња једнакост важи зато што одузимање скаларних множилаца јединичног оператора $\hat{I}$ не мења комутатор. Пошто је квадрат модула комплексног броја већи или једнак квадрату његовог имагинарног дела, следи

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi \right|^2.$$

Корењем обе стране добија се Робертсонова релација.

Најпознатија примена је на положај и импулс. У положајној репрезентацији оператор положаја $\hat{X}$ и оператор импулса $\hat{P}$ делују формално као

$$(\hat{X}\psi)(x) = x\psi(x), \quad (\hat{P}\psi)(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}.$$

Израчунајмо њихов комутатор на таласној функцији ψ :

$$[\hat{X}, \hat{P}]\psi = \hat{X}\hat{P}\psi - \hat{P}\hat{X}\psi.$$

Први члан је

$$(\hat{X}\hat{P}\psi)(x) = x \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx}.$$

Други члан је

$$(\hat{P}\hat{X}\psi)(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}(x\psi(x)) = -i\hbar \left(\psi(x) + x \frac{d\psi}{dx} \right).$$

Зато је

$$([\hat{X}, \hat{P}]\psi)(x) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx} + i\hbar \left(\psi(x) + x \frac{d\psi}{dx} \right) = i\hbar \psi(x).$$

Дакле,

$$[\hat{X}, \hat{P}]\psi = i\hbar \psi,$$

па као операторска једнакост пишемо

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \hat{I}.$$

Убацавањем у Робертсонову релацију добијамо Хајзенбергову релацију за положај и импулс:

$$\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Ова неједнакост није последица несавршености мерног инструмента. Она произлази из чињенице да оператори $\hat{X}$ и $\hat{P}$ не комућују. Због тога не постоји квантно стање у којем су положај и импулс истовремено потпуно одређени.

Релације неодређености нису везане само за положај и импулс. На пример, компоненте спина такође не комућују:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z.$$

Робертсонова релација тада даје

$$\Delta S_x \Delta S_y \geq \frac{\hbar}{2} \left| \langle \hat{S}_z \rangle_\psi \right|.$$

То значи да се неодређеност јавља и за друге парове опсервабли чији оператори не комућују.

Често се помиње и релација енергија–време, у облику

$$\Delta E \Delta t \gtrsim \frac{\hbar}{2}.$$

Међутим, она нема исти математички статус као

$$\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2},$$

јер време у стандардној квантној механици није оператор, већ параметар. Овде Δt треба разумети као карактеристично време за које се стање система приметно промени, а не као неодређеност опсервабле времена. Са друге стране, енергија је опсервабла и описује се Хамилтонијаном $\hat{H}$.

Хајзенбергова релација неодређености показује да ограничење у истовременом познавању две величине није техничка слабост мерења, већ последица структуре Хилбертовог простора и некомутативности оператора. На тај начин се математички формализам развијен у раду директно претвара у физички садржај квантне механике.

6 Закључак

Суштина овог рада јесте увођење читаоца у основне идеје квантне механике кроз чврсту математичку основу. Иако су појмови обрађени у првом делу рада наизглед апстрактни, у петој глави се показује да су управо они неопходни за разумевање начина на који се квантна механика формулише. Видели смо шта се тачно крије иза мерења вредности и како њих можемо прецизно дефинисати кроз математику.

Посебно важну улогу у том опису имају ket и bra вектори, као и оператори који делују на њих. Ket вектор представља стање квантног система, док bra вектор омогућава да се преко скаларног производа добију амплитуде, а затим и вероватноће мерења. Оператори су зато централни у квантној механици: они описују физичке величине, њихово деловање на стања и могуће исходе мерења. Комутатор затим показује да ли је редослед деловања два оператора битан. Када две опсервабле не комутирају, то значи да не могу обе имати потпуно одређене вредности у истом стању. Из тога природно произлази Хајзенбергова релација неодређености, која показује да неодређеност није последица несавршености мерења, већ саме структуре квантне механике.

Овај рад се може даље проширити у више праваца: на детаљније извођење Шредингерове једначине, строже увођење простора L^2 , и Фуријеове трансформације, као и на анализу конкретних система као што су хармонијски осцилатор, спин- $\frac{1}{2}$ систем и атом водоника. Рад зато представља први корак ка разумевању квантне механике кроз њен природни математички језик: Хилбертове просторе и операторе.

7 Литература

Литература

- [1] B. Zwiebach, *Quantum Physics II: Lecture Notes 3 – Linear Algebra: Vector Spaces and Operators*, MIT OpenCourseWare, Massachusetts Institute of Technology, 2013. Материјал доступан преко MIT OpenCourseWare, лиценциран под Creative Commons BY-NC-SA 4.0.
- [2] M. Mezei, *Quantum Theory*, lecture notes, University of Oxford, Michaelmas Term 2025.
- [3] R. L. Jaffe, *Supplementary Notes on Dirac Notation, Quantum States, etc.*, MIT Physics 8.05, 1996.
- [4] S. Sasaki, A. Subramaniam and A. Deshmukh, *ECE 580 Lecture Notes: Hilbert Spaces, Dual Spaces and Riesz Representation Theorem*, 2021.
- [5] *Mathematical Formalism of Quantum Mechanics*, T2 Skript, Chapter 3.
- [6] *The Spectral Theorem for Hermitian Operators*, lecture notes.