Hermitsko adjungiran operator Operator je hermitsko adjungiran (označimo $A^\dagger$), če velja:

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle B\varphi|\psi\rangle, \quad B = A^\dagger$$

Lastnosti:

$$\begin{aligned} A &= zB, \quad z \in \mathbb{C} \\ A^\dagger &= z^* B^\dagger \\ A &= |m\rangle\langle n| \\ A^\dagger &= |n\rangle\langle n| \\ \langle\varphi|A|\psi\rangle &= \langle\varphi|m\rangle\langle n|\psi\rangle = (\langle\psi|n\rangle\langle m|\varphi\rangle)^* \\ &= \left(\langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle\right)^* = \langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle \\ (\mu A + \lambda B)^\dagger &= \mu^* A^\dagger + \lambda^* A^\dagger \\ (AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger \\ (A^\dagger)^\dagger &= A \end{aligned}$$

Kako najdemo hermitsko adjungiran operator nekega operatorja?

$$A = IAI = \sum_{mn} |m\rangle A_{nm}\langle n|$$

$$A^\dagger = IAI = \sum_{mn} |n\rangle A^*_{mn}\langle m| = \sum_{mn} |m\rangle A^*_{nm}\langle n|$$

Se pravi: $A_{mn} \to A^*_{nm}$

Sebi adjungirani operatorji Operator je sebi adjungiran, če velja:

$$A = A^\dagger, \quad A_{mn} = A^*_{nm}, \quad D(A) = D(A^\dagger)$$

Če je operator sebi adjungiran, velja spektralni teorem (tega ne bomo dokazovali): Če poiščemo vse lastne funkcije $|n\rangle$ operatorja A, se pravi:

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle,$$

tvorijo funkcije $|n\rangle$ bazo v L^2.

Unitarni operatorji Operator je unitaren, če je njegov inverz hermitsko adjungiran, torej:

$$U^{-1} = U^\dagger, \quad U^\dagger U = UU^\dagger = I$$

Nekaj lastnosti: Imamo operatorja $|\varphi\rangle$ in $|\psi\rangle$. Označimo $|\tilde\varphi\rangle = U|\varphi\rangle$ in $|\tilde\psi\rangle = U|\psi\rangle$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle U^\dagger\tilde\varphi|U^\dagger\tilde\psi\rangle = \langle\tilde\varphi|UU^\dagger|\tilde\psi\rangle = \langle\tilde\varphi|\tilde\psi\rangle$$

Se pravi unitarni operatorji ohranjajo skalarni produkt.

Naj bo A operator. Velja:

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle U^\dagger\tilde\varphi|A|U^\dagger\tilde\psi\rangle = \langle\tilde\varphi|\tilde A|\tilde\psi\rangle$$

Označili smo $\tilde A = UAU^\dagger$

Naj bo a lastna vrednost operatorja A in $|a\rangle$ pripadajoči lastni vektor.

$$UAU^\dagger U|a\rangle = aU|a\rangle$$

Sledi $\tilde A|\tilde a\rangle = \tilde a|\tilde a\rangle$.

Če je $K = K^\dagger$ unitaren, je tudi operator U, definiran kot

$$U = e^{iK}$$

unitaren, in sicer je

$$U^\dagger = e^{-iK}$$

Enoparametrični unitarni operatorji imajo ravno tako obliko, in sicer:

$$U(s) = e^{isK},$$

kjer je $K^\dagger = K$ - temu operatorju pravimo tudi generator.

Časovni razvoj stanja z unitarnim operatorjem Operator lahko razvijemo v vrsto. Funkcijske vrste imajo obliko:

$$f(x) = \sum_n c_n x^n$$

Tako lahko rečemo

$$\widehat{B} = f(\widehat{A}) = \sum_n c_n \widehat{A}^n$$

Primer: $f(x) = e^x$, $\widehat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$

$$e^{\frac{\partial}{\partial x}} = 1 + \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{6}\frac{\partial^3}{\partial x^3} + ... + \frac{1}{n!}\frac{\partial^n}{\partial x^n} + ...$$

Kaj se pri takšnem početju dogaja z lastnimi vrednostmi?

$$f(\widehat{A})|a_n\rangle = \sum_m c_m \widehat{A}^m |a_n\rangle = \sum_m c_m (a_n)^m |a_n\rangle = f(a_n)|a_n\rangle$$

Če ima operator $\widehat{A}$ lastno vrednost a_n, bo imel operator $f(\widehat{A})$ lastno vrednost $f(a_n)$.

Primer: Imamo stacionarno Schrödingerjevo enačbo $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|\psi(0)\rangle e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}|\varphi_n\rangle$$

E_n zamenjamo s $\widehat{H}$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|\psi(0)\rangle e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\varphi_n\rangle$$

Opomba: $\langle\varphi_n|\psi(0)\rangle$ je konstanta, zato lahko zamenjamo vrstni red in izpostavimo operator.

$$= e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \sum_n \langle\varphi_n|\psi(0)\rangle|\varphi_n\rangle$$

$$= e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi(0)\rangle$$

Vemo: $\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = I$, torej velja:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle$$

Reprezentacoja p in x Imamo fourierovo transformacijo:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k)\, e^{ikx}\, \mathrm{d}k$$

Funcija $\tilde{f}$ j eseveda Fourierova transformiranka funkcije f:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x')\, e^{-ikx'}\, \mathrm{d}x'$$

Sledi:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x') e^{-ikx'}\, \mathrm{d}x'\right) e^{ikx}\, \mathrm{d}k$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x'-x)}\, \mathrm{d}k\right) f(x')\, \mathrm{d}x$$

S tem smo implicitno definirali Diracovo delta funkcijo:

$$\delta(x'-x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x'-x)}\, \mathrm{d}k$$

Ta integral seveda ne konvergira, vendar v kvantni mehaniki takšno funkcijo vedno množimo s kako funkcijo, ki jo dovolj omeji.
Primer: Prost delec v potencialu $V(x) = 0$:

$$H = \frac{p^2}{2m}$$

$$p|\varphi_0\rangle = p_0|\varphi_0\rangle$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi_{p0}(x) = p_0\varphi|p0(x)$$

$$\varphi_{p0} = Ce^{i\frac{p_0}{\hbar}x}$$

To pomeni, da je $|\varphi_{p0}|^2 = |C|^2$, torej funkcije ne bomo mogli normirati. Ima pa sledečo zanimivo lastnost: Če izberemo $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$, velja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{p0}^*(x)\varphi_{p0}(x)\,\mathrm{d}x = \delta(p_0 - p)$$

Velikost gibalne količine p tu prevzame vlogo spremenljivke k (v eksponentu smo nenazadnje imeli $\pm i(p_0/\hbar)x$, torej $k = p_0/\hbar$). Sledi:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)e^{i\frac{px}{\hbar}}\,\mathrm{d}p$$

in

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)e^{-i\frac{px}{\hbar}}\,\mathrm{d}x$$

Posledica:

$$\widehat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_p(x)\,\mathrm{d}p = \int_{-\infty}^{\infty} p\tilde{\psi}(p)\varphi_p(x)\,\mathrm{d}p$$

Tu je φ_p lastna funkcija operatorja $\widehat{p}$. Sledi:

$$\widehat{p}\psi \leftrightarrow p\tilde{\psi}$$

Sledi: če odvajamo funkcijo, je to enako, kot če bi njeno transformiranko pomnožili z nekim številom. V splošnem velja:

$$\left(-ih\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \psi(x) = \widehat{p}^n\psi(x) \leftrightarrow p^n\tilde{\psi}(p)$$

Podobno velja za operator x (s podobno izpeljavo):

$$x\psi(x) \leftrightarrow \left(+i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\tilde{\psi}(p)$$

Opomba: Te funkcije ψ niso nujno normirane in jih tudi ne moremo normirati, kot bi to lahko počeli s funkcijami v L^2. Največ, kar lahko naredimo, je da jih nekako normiramo z uporabo δ funkcije.

Velja tudi:

$$\int |\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = \int |\tilde{\psi}(p)|^2\,\mathrm{d}p$$

Verjetnostna amplituda ($\langle x|\psi\rangle$ in $\langle p|\psi\rangle$) Od prej imamo

$$|\psi\rangle = \int \tilde{\psi}|p\rangle\,\mathrm{d}p$$

$$\langle p_1|p\rangle = \int \tilde{\psi}(p)\langle p_1|p\rangle\,\mathrm{d}p = \int \tilde{\psi}(p)\delta(p_1 - p) = \tilde{\psi}(p_1)$$

Kot smo že prej pokazali, je $\delta(p_0 - p) = \langle p_0|p\rangle$. δ funkcijo, ki smo jo uporabljali lani, lahko opišemo kot $\delta_{nm} = \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle$.
Velja torej $\langle p|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p)$. Podobno delamo za x:

$$\tilde{x}\psi_0(x) = x_0\psi_0(x)$$

$$x\int\tilde{\psi}_0(p)\varphi_p(x)\,\mathrm{d}p = \int\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\psi}_0(p)\varphi_p(x)\,\mathrm{d}p = x_0\int\tilde{\psi}_0(p)\varphi_p\,\mathrm{d}p\right)$$

Tu je x_0 lastna vrednost funkcije ψ_0. Sledi:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\psi}_0(p) = x_0\tilde{\psi}_0(p) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-i\frac{px_0}{\hbar}} = \varphi_p^*(x_0)$$

$$\psi_0(x) = \int\varphi_p^*(x_0)\varphi_p(x)\,\mathrm{d}p = \delta(x - x_0)$$

Povzetek:

$$\widehat{x}\psi_0 = x\psi_0(x) = x_0\psi_0(x) \Rightarrow \psi_0(x) = \delta(x_0 - x)$$

Zdaj izračunajmo $\langle x_0|\psi\rangle$

$$\langle x_0|\psi\rangle = \int\tilde{\psi}\langle x_0|p\rangle\,\mathrm{d}p$$

Vemo:

$$\langle x_0|p\rangle = \int\delta(x_0 - x)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{px}{\hbar}}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\pi\hbar}e^{i\frac{px_0}{\hbar}}$$

Torej je

$$\langle x_0|\psi\rangle = \int\tilde{\psi}(p)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{px_0}{\hbar}}\,\mathrm{d}p$$

V tem prepoznamo Fourierovo transformacijo funkcije ψ v točki x_0. Zaključek:

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

$$\langle p|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p)$$

Razvoj valovne funkcije

$$|\psi\rangle = \int\psi(x)|x\rangle\,\mathrm{d}x = \int\langle x|\psi\rangle|x\rangle\,\mathrm{d}x = \left(\int|x\rangle\langle x|\,\mathrm{d}x\right)|\psi\rangle$$

Vemo, da je $\int|x\rangle\langle x|\,\mathrm{d}x = 1$. Dobili pa smo razvoj valovne funkcije po x. Podobno lahko valovno funkcijo razvijemo po p:

$$|\psi\rangle = \left(\int|p\rangle\langle p|\,\mathrm{d}p\right)|\psi\rangle$$

V splošnem ne moremo trditi, da je $V(x) = 0$. Lahko pa obravnavamo tudi primere, ko $V(x)$ sicer ni enak 0, vendar gre proti 0, ko x narašte preko nekega radija R. Tedaj je namreč

$$I = \sum_n|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| + \int|p\rangle\langle p|\,\mathrm{d}p$$