Catatan Mekanika Kuantum 2
Mekanika Matriks
Acuan Gasiorowicz, *Quantum Physics* Ed. 3, Bab 9

Berangkat dari persamaan gelombang, yang disampaikan oleh Schrödinger pada 1926, mekanika kuantum berkembang sebagai mekanika gelombang. Pada saat yang bersamaan, dimulai pada 1925 oleh Heisenberg, mekanika kuantum juga berkembang sebagai mekanika matriks. Keduanya, mekanika kuantum sebagai mekanika gelombang dan mekanika kuantum sebagai mekanika matriks, sesungguhnya hal yang ekivalen dan memberikan hal yang sama. Yang berbeda adalah representasinya. Dalam mekanika gelombang, operator direpresentasikan dalam bentuk operator matematik seperti integral dan differensial, keadaan dalam bentuk fungsi matematik. Dalam mekanika matriks, baik operator maupun keadaan direpresentasikan dalam bentuk matriks; operator berupa matriks bujursangkar (*square matrix*), keadaan berupa matriks kolom (*column matrix*). Tidak semua operator dan keadaan dapat direpresentasikan dalam bentuk operator dan fungsi matematik, contohnya operator dan keadaan spin (akan kita pelajari setelah ini). Namun, operator dan keadaan tersebut dapat dinyatakan dalam bentuk matriks. Penggunaan representasi matriks, dengan demikian, bersifat lebih umum.

Sebelum masuk ke pembahasan mengenai mekanika matriks, kita ingat kembali tentang keadaan basis (*basis state*) (ingat kuliah Mekanika Kuantum 1). Satu himpunan keadaan (*a set of states*) dapat menjadi keadaan basis, jika memenuhi dua syarat berikut:[1]

1. ortogonal, yaitu keadaan-keadaan dalam himpunan tersebut saling tegak lurus,
2. komplit atau lengkap, yaitu sembarang keadaan dapat dinyatakan sebagai kombinasi linier keadaan-keadaan dari himpunan tersebut.

[1]Keadaan basis dapat mudah dipahami dengan melihat analogi antara keadan basis dan vektor satuan dalam ruang vektor biasa. Sembarang vektor $\mathbf{D}$ dapat diuraikan dalam satu himpunan vektor satuan, yang memiliki 3 anggota vektor satuan $\hat{\mathbf{e}}_i$ $(i = 1, 2, 3)$, yang saling tegak lurus (ortogonal):

$$\mathbf{D} = \sum_{i=1}^{3} D_i \hat{\mathbf{e}}_i \qquad \text{dan} \qquad \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j = \delta_{ij} \,. \tag{1}$$

Contoh, dalam sistem koordinat Cartesian:

$$\hat{\mathbf{e}}_1 = \hat{\mathbf{i}} \,,\; \hat{\mathbf{e}}_2 = \hat{\mathbf{j}} \,,\; \hat{\mathbf{e}}_3 = \hat{\mathbf{k}} \qquad \text{dan} \qquad \mathbf{D} = D_x\hat{\mathbf{i}} + D_y\hat{\mathbf{j}} + D_z\hat{\mathbf{k}} \,. \tag{2}$$

Berkenaan dengan sifat komplit keadaan basis, ada suatu relasi yang dikenal dengan relasi kekomplitan (*completeness relation*). Keadaan basis dapat merupakan himpunan dengan jumlah anggota berhingga maupun tak berhingga, diskrit maupun kontinyu. Jika $|n\rangle$ keadaan basis diskrit, maka:

$$\text{ortogonalitas: } \langle n'|n\rangle = |N|^2\delta_{n'n} \quad , \qquad \text{relasi kekomplitan: } \sum_n |n\rangle\langle n| = |N|^2\hat{1}\,. \tag{3}$$

Jika $|\alpha\rangle$ keadaan basis kontinyu, maka:

$$\text{ortogonalitas: } \langle \alpha'|\alpha\rangle = |N|^2\delta(\alpha'-\alpha) \quad , \qquad \text{relasi kekomplitan: } \int d\alpha\,|\alpha\rangle\langle\alpha| = |N|^2\hat{1}\,. \tag{4}$$

Di Eqs. (3) dan (4) $\hat{1}$ adalah operator 1,[2] dan N menentukan normalisasi keadaan basis tersebut. Supaya mudah, biasa dipilih $N = 1$. Dalam penjelasan mengenai mekanik matriks di bawah, dipilih keadaan basis diskrit, sekedar agar lebih mudah, karena kita lebih terbiasa dengan wujud matriks yang diskrit. Jika diperlukan, digunakan notasi huruf i, j, k, l, m, n untuk menyatakan keadaan basis diskrit yang sama.

A. Operator dalam representasi matriks

Ambillah dua operator $\hat{F}$ dan $\hat{G}$. Dalam keadaan basis $|n\rangle$ (atau secara singkat kita sebut basis $|n\rangle$) operator $\hat{F}$ dan $\hat{G}$ diekspansikan sebagai berikut:

$$\hat{F} = \hat{1}\hat{F}\hat{1} = \sum_{mn} |m\rangle\langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n| \quad \text{dan} \quad \hat{G} = \sum_{mn} |m\rangle\langle m|\hat{G}|n\rangle\langle n|\,. \tag{5}$$

Kita hitung dan dapatkan hasil-hasil berikut:

$$\begin{aligned}
\hat{G}|j\rangle &= \sum_{mn} |m\rangle\langle m|\hat{G}|n\rangle\langle n|j\rangle \\
&= \sum_{mn} |m\rangle\langle m|\hat{G}|n\rangle\delta_{nj} \\
&= \sum_{m} |m\rangle\langle m|\hat{G}|j\rangle \qquad (6)\\
\hat{F}\hat{G}|j\rangle &= \sum_{kl} |k\rangle\langle k|\hat{F}|l\rangle\langle l| \sum_m |m\rangle\langle m|\hat{G}|j\rangle \\
&= \sum_{klm} |k\rangle\langle k|\hat{F}|l\rangle\langle l|m\rangle\langle m|\hat{G}|j\rangle \\
&= \sum_{klm} |k\rangle\langle k|\hat{F}|l\rangle\delta_{lm}\langle m|\hat{G}|j\rangle \\
&= \sum_{kl} |k\rangle\langle k|\hat{F}|l\rangle\langle l|\hat{G}|j\rangle \qquad (7)\\
\langle i|\hat{F}\hat{G}|j\rangle &= \langle i| \sum_{kl} |k\rangle\langle k|\hat{F}|l\rangle\langle l|\hat{G}|j\rangle
\end{aligned}$$

[2] Jika bra di kiri dan ket di kanan, itu sebuah nilai. Dengan demikian, ortogonalitas memberikan sebuah nilai. Jika ket di kiri dan bra di kanan, itu sebuah operator. Dengan demikian, relasi kekomplitan merupakan sebuah operator.

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{kl} \langle i|k\rangle \langle k|\hat{F}|l\rangle \langle l|\hat{G}|j\rangle \\
&= \sum_{kl} \delta_{ik} \langle k|\hat{F}|l\rangle \langle l|\hat{G}|j\rangle \\
&= \sum_{l} \langle i|\hat{F}|l\rangle \langle l|\hat{G}|j\rangle \,. \qquad (8)
\end{aligned}
$$

Tentu saja Eq. (8) dapat dikerjakan secara langsung dan lebih singkat:

$$
\begin{aligned}
\langle i|\hat{F}\hat{G}|j\rangle &= \langle i|\hat{F}\hat{1}\hat{G}|j\rangle \\
&= \sum_{l} \langle i|\hat{F}|l\rangle \langle l|\hat{G}|j\rangle \,. \qquad (9)
\end{aligned}
$$

Jika kita definisikan notasi sebagai berikut:

$$
A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle \,, \qquad (10)
$$

maka Eq. (9) menjadi:

$$
(FG)_{ij} = \sum_{l} F_{il} G_{lj} \,. \qquad (11)
$$

Kita kenali Eq. (11) sebagai perkalian matriks, yaitu ruang kiri merupakan elemen matriks hasil perkalian matriks F dan G. Dengan demikian, sembarang operator, misalkan $\hat{F}$, dapat kita ambil / anggap / perlakukan / operasikan sebagai sebuah matriks, dengan elemennya dalam suatu basis, misalkan $|n\rangle$, adalah $F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle$. Mengingat $|n\rangle$ dan $|m\rangle$ basis yang sama, maka operator $\hat{F}$ merupakan matriks bujursangkar (*square matrix*). Himpunan seluruh elemen matriks $F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle$ itu menyatakan operator $\hat{F}$ dalam representasi matriks:[3]

$$
\hat{F} = \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{F}|1\rangle & \langle 1|\hat{F}|2\rangle & ... \\ \langle 2|\hat{F}|1\rangle & \langle 2|\hat{F}|2\rangle & ... \\ ... & ... & ... \end{pmatrix} . \qquad (12)
$$

Beberapa catatan:

- Representasi matriks operator konjugat hermitian $\hat{F}^+$ diperoleh sebagai berikut:

$$
(F^+)_{mn} = \langle m|\hat{F}^+|n\rangle = \langle \hat{F}\, m|n\rangle = \langle n|\hat{F}|m\rangle^* = F^*_{nm} \,. \qquad (13)
$$

  Dengan demikian, matriks $\hat{F}^+$ sama dengan konjugat transpos matriks $\hat{F}$ (konjugat kompleks dari transpos matriks $\hat{F}$):

$$
\hat{F} = \begin{pmatrix} a & d & e & ... \\ g & b & f & ... \\ h & i & c & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix} \quad \text{dan} \quad \hat{F}^+ = \begin{pmatrix} a^* & g^* & h^* & ... \\ d^* & b^* & i^* & ... \\ e^* & f^* & c^* & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix} . \qquad (14)
$$

[3] Jika digunakan basis kontinyu $|\alpha\rangle$, maka fungsi $F(\beta, \alpha) = \langle \beta|\hat{F}|\alpha\rangle$ menyatakan operator $\hat{F}$ dalam representasi matriks. Di sini elemen-elemen matriks tidak saling terbedakan secara diskrit, melainkan secara kontinyu sebagai sebuah fungsi. Meskipun kita tidak dapat menuliskan matriks yang elemen-elemennya kontinyu, tetapi kita tetap dapat mengoperasikannya sebagai sebuah matriks, melalui elemen-elemennya, yang direpresentasikan sebagai sebuag fungsi.

- Apabila $\hat{F}$ operator hermitian, $\hat{F}^{+} = \hat{F}$, maka:

$$(F^{+})_{mn} = F_{mn} = F^{*}_{nm} \,. \tag{15}$$

Dengan demikian, matriks hermitian $\hat{F}$ memiliki elemen diagonal riil, sedangkan elemen lainnya dapat saja kompleks, dengan catatan, bahwa elemen di bagian atas diagonal dan elemen di bagian bawah diagonal saling berhubungan sesuai dengan Eq. (15):

$$\hat{F}^{+} = \hat{F} = \begin{pmatrix} a & d & e & \ldots \\ d^{*} & b & f & \ldots \\ e^{*} & f^{*} & c & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix} . \tag{16}$$

- Transformasi basis atau representasi operator $\hat{F}$ dari $|n\rangle$ ke $|u\rangle$ dikerjakan sebagai berikut (di sini dipakai notasi u dan v untuk menyatakan basis yang sama):

$$\begin{aligned} F_{vu} &= \langle v|\hat{F}|u\rangle \\ &= \sum_{mn} \langle v|m\rangle\langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|u\rangle \\ &= \sum_{mn} \langle v|m\rangle F_{mn} \langle n|u\rangle \,. \end{aligned} \tag{17}$$

Himpunan lengkap nilai $\langle n|u\rangle$ dapat disusun membentuk sebuah matriks, sebut saja $\hat{U}$, sehingga $\langle n|u\rangle$ menyatakan elemen baris ke-n kolom ke-u matriks $\hat{U}$:

$$U_{nu} = \langle n|u\rangle \,, \tag{18}$$

dan matriks $\hat{U}$ dapat digambarkan sebagai berikut (anggap nilai-nilai n dan u adalah $1, 2, 3, \ldots$):

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & \ldots \\ U_{21} & U_{22} & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix} . \tag{19}$$

Kini, transformasi basis di Eq. (17) dapat dituliskan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} F_{vu} = \langle v|\hat{F}|u\rangle &= \sum_{mn} \langle m|v\rangle^{*} F_{mn} \langle n|u\rangle \\ &= \sum_{mn} U^{*}_{mv} F_{mn} U_{nu} \\ &= \sum_{mn} (U^{+})_{vm} F_{mn} U_{nu} \\ &= \sum_{mn} \langle v|\hat{U}^{+}|m\rangle\langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|\hat{U}|u\rangle \\ &= \langle v|\hat{U}^{+}\hat{F}\hat{U}|u\rangle \,. \end{aligned} \tag{20}$$

Dengan demikian, diperoleh relasi operator sebagai berikut:

$$\hat{F}_{\text{baru}} = \hat{U}^{+}\hat{F}_{\text{lama}}\hat{U}\,, \tag{21}$$

dengan $\hat{F}_{\text{lama}}$ dan $\hat{F}_{\text{baru}}$ masing-masing adalah operator atau matriks $\hat{F}$ dalam basis lama (dalam hal ini $|n\rangle$) dan basis baru (dalam hal ini $|u\rangle$), $\hat{U}$ operator transformasi dari basis lama ke basis baru. Transformasi sebaliknya dari basis $|u\rangle$ ke $|n\rangle$ diperoleh sebagai berikut:

$$\begin{aligned} F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle &= \sum_{vu}\langle m|v\rangle\langle v|F|u\rangle\langle u|n\rangle \\ &= \sum_{vu}\langle m|v\rangle F_{vu}\langle n|u\rangle^{*} \\ &= \sum_{vu} U_{mv}F_{vu}(U^{+})_{un} \\ &= \sum_{vu}\langle m|\hat{U}|v\rangle\langle v|\hat{F}|u\rangle\langle u|\hat{U}^{+}|n\rangle \\ &= \langle m|\hat{U}\hat{F}\hat{U}^{+}|n\rangle\,, \end{aligned} \tag{22}$$

yang berarti:

$$\hat{F}_{\text{lama}} = \hat{U}\hat{F}_{\text{baru}}\hat{U}^{+}\,. \tag{23}$$

Jika Eq. (23) dimasukkan ke Eq. (21):

$$\hat{F}_{\text{baru}} = \hat{U}^{+}\hat{U}\hat{F}_{\text{baru}}\hat{U}^{+}\hat{U}\,, \tag{24}$$

atau Eq. (21) dimasukkan ke Eq. (23):

$$\hat{F}_{\text{lama}} = \hat{U}\hat{U}^{+}\hat{F}_{\text{lama}}\hat{U}\hat{U}^{+}\,, \tag{25}$$

diperoleh:

$$\hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{+} = \hat{1}\,. \tag{26}$$

Operator dengan sifat seperti operator $\hat{U}$ di Eq. (26) disebut operator uniter (*unitary*).

- Jika keadaan basis $|a\rangle$ merupakan keadaan eigen operator $\hat{F}$ dengan nilai eigen f_a:

$$\hat{F}|a\rangle = f_a|a\rangle\,, \tag{27}$$

maka representasi matriks operator $\hat{F}$ dalam basis $|a\rangle$ menjadi (di sini dipakai notasi a dan b untuk menyatakan basis yang sama):

$$F_{ba} = \langle b|\hat{F}|a\rangle = \langle b|f_a|a\rangle = f_a\langle b|a\rangle = f_a\delta_{ba}\,. \tag{28}$$

Dengan kata lain, matriks $\hat{F}$ diagonal. Keuntungan bekerja dengan operator berupa matriks diagonal adalah nilai eigennya jelas ditunjukkan oleh elemen diagonal matriks tersebut. Kini, jika kita temui operator berupa matriks tak diagonal, dapatkah kita mengubahnya menjadi matriks diagonal? Dapat, yaitu dengan melakukan transformasi basis, atau dalam hal ini disebut sebagai diagonalisasi, yang sesuai Eq. (21) dapat dinyatakan sebagai berikut:

$$\hat{F}_{\text{diagonal}} = \hat{U}^{+} \hat{F}_{\text{tak diagonal}} \hat{U} \,. \tag{29}$$

Jadi, untuk melakukan diagonalisasi diperlukan operator transformasi $\hat{U}$ yang tepat. Sebagai contoh, transformasi basis operator $\hat{F}$ dari $|n\rangle$ ke $|a\rangle$, atau diagonalisasi matriks $\hat{F}$, dikerjakan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} F_{ba} = f_a \delta_{ba} &= \langle b|\hat{F}|a\rangle \\ &= \sum_{mn} \langle b|m\rangle \langle m|\hat{F}|n\rangle \langle n|a\rangle \\ &= \sum_{mn} (U^{+})_{bm} F_{mn} U_{na} \,. \end{aligned} \tag{30}$$

Dengan demikian, operator transformasi $\hat{U}$ berupa matriks dengan elemen:

$$U_{na} = \langle n|a\rangle \,. \tag{31}$$

Di Sect. C kita akan lihat contoh diagonalisasi matriks.

- Trace sebuah matriks adalah jumlah elemen diagonalnya. Tentu saja, ini berlaku juga untuk operator:

$$\mathrm{Tr}\,\hat{F} = \sum_j F_{jj} \,. \tag{32}$$

Elemen matriks merupakan sebuah nilai, bukan operator. Dengan demikian, pada perkalian dua atau lebih elemen matriks, urutannya / posisinya dapat ditukar, sehingga diperoleh:

$$\mathrm{Tr}\,\hat{F}\hat{G} = \sum_j (FG)_{jj} = \sum_{jl} F_{jl} G_{lj} = \sum_{jl} G_{lj} F_{jl} = \sum_l (GF)_{ll} = \mathrm{Tr}\,\hat{G}\hat{F} \,, \tag{33}$$

dan, secara umum, untuk trace perkalian lebih dari dua matriks diperoleh hasil berikut:

$$\mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{B}\hat{C}\ldots = \mathrm{Tr}\,\hat{B}\hat{C}\ldots\hat{A} = \mathrm{Tr}\,\hat{C}\ldots\hat{A}\hat{B} = \mathrm{Tr}\ldots\hat{A}\hat{B}\hat{C} \,. \tag{34}$$

Trace komutator dua operator, dengan demikian, bernilai nol:

$$\mathrm{Tr}\,[\hat{F},\hat{G}] = \mathrm{Tr}\,(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}) = \mathrm{Tr}\,\hat{F}\hat{G} - \mathrm{Tr}\,\hat{G}\hat{F} = 0 \,, \tag{35}$$

dengan catatan, Eq. (35) berlaku untuk matriks berukuran berhingga, sehingga trace matriks itu pun berhingga, tidak divergen (bayangkan trace di Eq. (32), apabila ukuran matriks $\hat{F}$ tak berhingga). Hal ini membuat Eq. (35) dapat dipakai sebagai petunjuk, apakah sebuah operator merupakan matriks berukuran berhingga atau tak berhingga. Contoh, komutator operator posisi $\hat{\mathbf{r}}$ dan momentum $\hat{\mathbf{p}}$ adalah:

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \hat{1} \,, \tag{36}$$

sehingga $\mathrm{Tr}\,[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}]$ divergen, dan disimpulkan bahwa operator posisi $\hat{\mathbf{r}}$ dan momentum $\hat{\mathbf{p}}$ direpresentasikan sebagai matriks berukuran tak berhingga.

B. Contoh-contoh operator dalam representasi matriks

- Pada kasus partikel dengan massa m terperangkap dalam kotak potensial tak berhingga 1 dimensi berukuran a, didapatkan persamaan nilai eigen untuk operator energi total (hamiltonian) H sebagai berikut:

$$H|n\rangle = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma}|n\rangle \ , \ (n = 1, 2, 3, ...) \, . \tag{37}$$

Dalam basis $|n\rangle$, hamiltonian H direpresentasikan sebagai matriks diagonal berukuran tak berhingga:

$$\langle m|H|n\rangle = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma}\langle m|n\rangle = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma}\delta_{mn} \to H = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & ... \\ 0 & 4 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 9 & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix} . \tag{38}$$

- Untuk osilator harmonik sederhana diperoleh relasi-relasi berikut:

$$H|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle \ , \ (n = 0, 1, 2, ...) \tag{39}$$

$$A|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{40}$$

$$A^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \, , \tag{41}$$

dengan A dan A^+ masing-masing operator turun dan operator naik (keduanya disebut operator tangga / *ladder operators*). Dalam basis $|n\rangle$, representasi matriks H, A, dan A^+ adalah:

$$\langle m|H|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\delta_{mn} \tag{42}$$

$$\langle m|A|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1} \tag{43}$$

$$\langle m|A^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \, , \tag{44}$$

sehingga operator H, A, dan A^+ dapat digambarkan berupa matriks berikut:

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & ... \\ 0 & 3 & 0 & ... \\ 0 & 0 & 5 & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix} \tag{45}$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & ... \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & ... \\ 0 & 0 & 0 & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix} \tag{46}$$

$$A^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & ... \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & ... \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix} . \tag{47}$$

- Berkenaan dengan momentum angular kita jumpai operator-operator $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{L}_z$, dan $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$, serta relasi-relasi berikut:

$$\hat{\mathbf{L}}^2|lm\rangle = \hbar^2 l(l+1)|lm\rangle \tag{48}$$

$$\hat{L}_z|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle \tag{49}$$

$$\hat{L}_\pm|lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}|l, m\pm 1\rangle\,. \tag{50}$$

Kita juga dapatkan bahwa semua operator komponen momentum angular komut dengan $\hat{\mathbf{L}}^2$:

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0\,. \tag{51}$$

Kita ambil salah satu dan kerjakan elemen matriks berikut, dengan memanfaatkan sifat hermitian operator momentum angular:

$$\begin{aligned} \langle l'm'|[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z]|lm\rangle = 0 &= \langle l'm'|\hat{\mathbf{L}}^2\hat{L}_z|lm\rangle - \langle l'm'|\hat{L}_z\hat{\mathbf{L}}^2|lm\rangle \\ &= \langle\hat{\mathbf{L}}^2 l'm'|\hat{L}_z|lm\rangle - \langle l'm'|\hat{L}_z\hat{\mathbf{L}}^2|lm\rangle \\ &= \hbar^2 l'(l'+1)\langle l'm'|\hat{L}_z|lm\rangle - \hbar^2 l(l+1)\langle l'm'|\hat{L}_z|lm\rangle \\ &= \hbar^2[l'(l'+1) - l(l+1)]\langle l'm'|\hat{L}_z|lm\rangle\,. \end{aligned} \tag{52}$$

Menurut Eq. (52) dan juga Eq. (51), jika $l' \neq l$, berarti $\langle l'm'|\hat{L}_x|lm\rangle = 0$, $\langle l'm'|\hat{L}_y|lm\rangle = 0$, $\langle l'm'|\hat{L}_x|lm\rangle = 0$. Dengan demikian, untuk melihat secara lebih detil representasi matriks operator momentum angular, kita ambil satu nilai momentum angular tertentu, $l' = l$, sehingga diperoleh representasi matriks berikut untuk $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{L}_z$, dan $\hat{L}_\pm$:

$$\langle lm'|\hat{\mathbf{L}}^2|lm\rangle = \hbar^2 l(l+1)\delta_{m'm} \tag{53}$$

$$\langle lm'|\hat{L}_z|lm\rangle = \hbar m\delta_{m'm} \tag{54}$$

$$\langle lm'|\hat{L}_\pm|lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\delta_{m',m\pm 1}\,. \tag{55}$$

Sebagai contoh, yang tidak terlalu sederhana dan tidak terlalu rumit, kita ambil $l = 1$, sehingga $m = 1, 0, -1$,[4] dan diperoleh matriks-matriks berikut:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \hat{L}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} . \tag{56}$$

$$\hat{L}_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \hat{L}_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{57}$$

[4]Urutan yang biasa dipakai untuk baris dari atas ke bawah dan kolom dari kiri ke kanan adalah $m = 1, 0, -1$.

Representasi matriks untuk $\hat{L}_x$ dan $\hat{L}_y$ diperoleh sebagai berikut:

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \;, \quad \hat{L}_y = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i} = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \,. \tag{58}$$

Matriks-matriks $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, dan $\hat{L}_z$ di atas sesuai dengan komutator antar operator komponen momentum angular:

$$[\hat{L}_r, \hat{L}_s] = \epsilon_{rst} i\hbar \hat{L}_t \;, \; (\epsilon_{rst} = \text{ simbol Levi-Civita}) \,. \tag{59}$$

Contoh:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_z] &= \hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_x \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} - \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= -\, i\hbar \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= -\, i\hbar \hat{L}_y \,. \end{aligned} \tag{60}$$

C. Perhitungan dalam mekanika matriks

Kita telah lihat operator dalam representasi matriks, kini kita lihat keadaan (*state*) dalam representasi matriks. Dengan demkian, kita dapat lakukan perhitungan dalam mekanika matriks.

Ambillah relasi berikut, yaitu operator $\hat{F}$ bekerja pada keadaan $|\phi\rangle$ menghasilkan keadaan $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \hat{F}|\phi\rangle \,. \tag{61}$$

Dalam basis $|n\rangle$ relasi (61) dikerjakan sebagai berikut:

$$\langle n|\psi\rangle = \langle n|\hat{F}|\phi\rangle = \sum_m \langle n|\hat{F}|m\rangle\langle m|\phi\rangle = \sum_m F_{nm}\langle m|\phi\rangle \,. \tag{62}$$

Jika kita definisikan notasi berikut:

$$\psi_n = \langle n|\psi\rangle \quad \text{dan} \quad \phi_m = \langle m|\phi\rangle \,, \tag{63}$$

maka Eq. (62) menjadi:

$$\psi_n = \sum_m F_{nm}\phi_m\,. \tag{64}$$

Kita lihat di Eq. (64) sebuah perkalian matrik, yaitu matriks bujursangkar F dikalikan dengan matriks kolom ϕ menghasilkan matriks kolom ψ. Dengan demikian, dalam representasi matriks, sembarang keadaan, misalkan $|\psi\rangle$, dapat kita ambil sebagai sebuah matriks kolom, dengan elemennya dalam suatu basis, misalkan $|n\rangle$, adalah $\psi_n = \langle n|\psi\rangle$. Himpunan seluruh elemen matriks ψ_n itu menyatakan keadaan $|\psi\rangle$ dalam representasi matriks, yang tidak lain adalah ekspansi $|\psi\rangle$ dalam basis $|n\rangle$:[5]

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\psi_n = \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ ... \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ ... \end{pmatrix}. \tag{65}$$

Beberapa catatan:

- Kita ingat operator $\hat{U}$, yang representasi matriksnya diberikan sebagai $U_{nu} = \langle n|u\rangle$, tapi bentuk matriksnya bukan kolom, melainkan bujursangkar, seperti ditunjukkan di Eq. (19). Dalam hal ini, $\langle n|u\rangle$ bukan menyatakan representasi satu saja keadaan $|u\rangle$, melainkan satu set keadaan $|u\rangle$, dalam basis $|n\rangle$, sehingga jumlah kolomnya lebih dari satu.

- Representasi matriks konjugat hermitian keadaan $|\psi\rangle$, yaitu $\langle\psi|$, dalam basis $|n\rangle$ adalah $\langle\psi|n\rangle = \langle n|\psi\rangle^* = \psi_n^*$, berupa matriks baris:

$$\langle\psi| = \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle^* & \langle 2|\psi\rangle^* & ... \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & ... \end{pmatrix}. \tag{66}$$

- Perkalian skalar keadaan $|\phi\rangle$ dan $|\psi\rangle$, yaitu $\langle\phi|\psi\rangle$ dikerjakan sebagai berikut:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_n \langle\phi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\phi\rangle^*\langle n|\psi\rangle = \sum_n \phi_n^*\psi_n\,, \tag{67}$$

dalam bentuk matriks:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1^* & \phi_2^* & ... \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ ... \end{pmatrix}. \tag{68}$$

- elemen matriks umum $\langle\phi|\hat{F}|\psi\rangle$ dikerjakan sebagai berikut:

$$\langle\phi|\hat{F}|\psi\rangle = \sum_{mn} \langle\phi|m\rangle\langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_{mn} \phi_m^* F_{mn}\psi_n\,, \tag{69}$$

dalam bentuk matriks:

$$\langle\phi|\hat{F}|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1^* & \phi_2^* & ... \end{pmatrix}\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & ... \\ F_{21} & F_{22} & ... \\ ... & ... & ... \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ ... \end{pmatrix}. \tag{70}$$

[5] Jika digunakan basis kontinyu $|\alpha\rangle$, maka fungsi $\psi(\alpha) = \langle\alpha|\psi\rangle$ menyatakan keadaan $|\psi\rangle$ dalam representasi matriks, yaitu berupa matriks kolom kontinyu.

- Misalkan $|\phi\rangle$ keadaan eigen $\hat{A}$ dengan nilai eigen a. Persamaan nilai eigen dinyatakan sebagai berikut:

$$\hat{A}|\phi\rangle = a|\phi\rangle \rightarrow (\hat{A} - a\hat{1})|\phi\rangle = 0 \rightarrow \sum_m (A_{nm} - \delta_{mn}a)\phi_m = 0\,, \tag{71}$$

dalam bentuk matriks:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & ... \\ A_{21} & A_{22} & ... \\ ... & ... & ... \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ ... \end{pmatrix} = a\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ ... \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} A_{11}-a & A_{12} & ... \\ A_{21} & A_{22}-a & ... \\ ... & ... & ... \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ ... \end{pmatrix} = 0\,. \tag{72}$$

Persamaan (71) (atau, dalam bentuk matriks, Eq. (72)) dipecahkan untuk mendapatkan nilai eigen dan keadaan eigen operator $\hat{A}$. Solusi nontrivial diperoleh dengan mengambil determinan matriks $\hat{A} - a\hat{1}$ sama dengan nol:

$$\det(\hat{A} - a\hat{1}) = 0 \quad \text{atau} \quad \begin{vmatrix} A_{11}-a & A_{12} & ... \\ A_{21} & A_{22}-a & ... \\ ... & ... & ... \end{vmatrix} = 0\,. \tag{73}$$

Persamaan (73) dikenal sebagai persamaan sekuler. Persamaan itu memberikan suatu polinomial dalam a dengan derajat sesuai ukuran matriks $\hat{A}$, dan oleh karena itu, persamaan (73) disebut juga sebagai polinomial karakteristik matriks $\hat{A}$.

Jika $\hat{A}$ operator hermitian, maka nilai eigennya riil dan akibatnya keadaan-keadaan eigennya saling tegak lurus atau ortogonal. Misalkan:

$$\hat{A}|\phi\rangle^{(j)} = a_j|\phi\rangle^{(j)}\,, \tag{74}$$

maka diperoleh relasi:

$${}^{(j)}\langle\phi|\phi\rangle^{(k)} = \sum_n {}^{(j)}\langle\phi|n\rangle\langle n|\phi\rangle^{(k)} = \sum_n \phi_n^{(j)*}\phi_n^{(k)} = \delta_{jk}\,. \tag{75}$$

- Kita tengok kembali diagonalisasi matriks:

$$\hat{F}_{\text{diagonal}} = \hat{U}^{+}\hat{F}_{\text{tak diagonal}}\hat{U}\,, \tag{76}$$

Anggaplah diketahui suatu operator $\hat{F}$ dalam basis $|n\rangle$, yang tidak diagonal:

$$F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle \neq \text{suatu nilai } \times \delta_{mn}\,. \tag{77}$$

Untuk mengubah $\hat{F}$ menjadi matriks diagonal, diperlukan operator transformasi $\hat{U}$, yang diperoleh sebagai berikut:

$$U_{na} = \langle n|a\rangle\,, \tag{78}$$

dengan $|a\rangle$ keadaan eigen $\hat{F}$, dengan nilai eigen f_a:

$$\hat{F}|a\rangle = f_a|a\rangle\,. \tag{79}$$

Dengan kata lain, U_{na} adalah representasi keadaan eigen $|a\rangle$ dalam basis $|n\rangle$. Jadi, mencari U_{na} ekivalen dengan menyelesaikan persamaan nilai eigen operator $\hat{F}$, Eq. (79), dalam basis $|n\rangle$:

$$\langle n|\hat{F}|a\rangle = f_a\langle n|a\rangle \rightarrow \sum_m \langle n|\hat{F}|m\rangle\langle m|a\rangle = f_a\langle n|a\rangle \rightarrow \sum_m F_{nm}U_{ma} = f_a U_{na}\,. \tag{80}$$

Perhatikan, keadaan eigen operator $\hat{F}$ lebih dari satu, jumlahnya sama dengan ukuran matriks $\hat{F}$, seperti ditunjukkan contoh-contoh di Section B, masing-masing dengan nilai eigen berbeda (supaya mudah, kita anggap tidak ada degenerasi). Jadi, $|a\rangle$ merepresentasikan satu himpunan komplit keadaan eigen, serupa seperti $|n\rangle$ merepresentasikan satu himpunan komplit keadaan basis. Setelah Eq. (80) diselesaikan, diperoleh semua keadaan eigen $|a\rangle$ dalam basis $|n\rangle$, masing-masing berupa matriks kolom. Semua keadaan eigen $|a\rangle$ tersebut disusun berurutan mengisi kolom-kolom matriks transformasi $\hat{U}$. Supaya lebih detil dan jelas, kita dapat berikan label s untuk menunjukkan keadaan eigen $|a\rangle$ tertentu, sehingga menjadi $|a\rangle^{(s)}$, yang memenuhi persamaan nilai eigen:

$$\hat{F}|a\rangle^{(s)} = f_a^{(s)}|a\rangle^{(s)}\,. \tag{81}$$

Representasi matriks $|a\rangle^{(s)}$ dalam basis $|n\rangle$ adalah $\langle n|a\rangle^{(s)}$ berupa matriks kolom. Dengan demikian, matriks $\hat{U}$ dapat digambarkan sebagai berikut:

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \langle 1|a\rangle^{(1)} & \langle 1|a\rangle^{(2)} & ... \\ \langle 2|a\rangle^{(1)} & \langle 1|a\rangle^{(2)} & ... \\ ... & ... & ... \end{pmatrix}. \tag{82}$$

(Sebagai contoh pencarian matriks $\hat{U}$, lihat Gasiorowicz Example 9-1.)

Setelah diagonalisasi, basis yang dipakai tidak lagi $|n\rangle$, melainkan keadaan eigen operator $\hat{F}$, yaitu $|a\rangle^{(s)}$. Matriks $\hat{F}$ menjadi diagonal:

$$^{(r)}\langle a|\hat{F}|a\rangle^{(s)} = f_a^{(s)}\delta_{rs} \rightarrow \hat{F} = \begin{pmatrix} f_a^{(1)} & 0 & 0 & ... \\ 0 & f_a^{(2)} & 0 & ... \\ 0 & 0 & f_a^{(3)} & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix}. \tag{83}$$

Keadaan eigen operator $\hat{F}$ dalam basis $|a\rangle^{(s)}$ tidak lain adalah relasi ortogonal:

$$^{(r)}\langle a|a\rangle^{(s)} = \delta_{rs} \rightarrow |a\rangle^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ ... \end{pmatrix},\ |a\rangle^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ ... \end{pmatrix},\ |a\rangle^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ ... \end{pmatrix},\ ... \tag{84}$$

Matriks $\hat{F}$ dan $|a\rangle^{(s)}$ di Eqs. (83) dan (84) memenuhi persamaan nilai eigen, sebagai contoh:

$$\begin{pmatrix} f_a^{(1)} & 0 & 0 & ... \\ 0 & f_a^{(2)} & 0 & ... \\ 0 & 0 & f_a^{(3)} & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ ... \end{pmatrix} = f_a^{(2)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ ... \end{pmatrix} . \tag{85}$$

- Kita lihat contoh keuntungan diagonalisasi matriks. Kita ambil kembali operator $\hat{F}$ serta keadaan dan nilai eigennya $|a\rangle^{(s)}$ dan $f_a^{(s)}$, yang memenuhi Eq. (81). Anggaplah ada suatu operator sebagai fungsi dari $\hat{F}$, misalkan sebagai berikut:

$$\hat{M} = \sum_k g_k \hat{F}^k . \tag{86}$$

Mengingat operator $\hat{F}$ tidak diagonal, operator $\hat{M}$ menjadi rumit. Dengan operator $\hat{U}$ di Eq. (82), operator $\hat{F}$ ditransformasikan menjadi operator diagonal $\hat{D}$:

$$\hat{U}^+ \hat{F} \hat{U} = \hat{D} \to \hat{F} = \hat{U}\hat{D}\hat{U}^+ , \tag{87}$$

dengan matriks $\hat{D}$ diberikan di Eq. (83). Kini, operator $\hat{M}$ dapat diperoleh sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
\hat{M} &= \sum_k g_k (\hat{U}\hat{D}\hat{U}^+)^k \\
&= \sum_k g_k \hat{U}\hat{D}\hat{U}^+ \ \hat{U}\hat{D}\hat{U}^+ \ ... \ \hat{U}\hat{D}\hat{U}^+ \\
&= \sum_k g_k \hat{U}\hat{D}\hat{D} \ ... \ \hat{D}\hat{U}^+ \\
&= \sum_k g_k \hat{U}\hat{D}^k\hat{U}^+ \\
&= \hat{U} \left(\sum_k g_k \hat{D}^k \right) \hat{U}^+ \\
&= \hat{U} \left(\sum_k g_k \begin{pmatrix} f_a^{(1)} & 0 & 0 & ... \\ 0 & f_a^{(2)} & 0 & ... \\ 0 & 0 & f_a^{(3)} & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix}^k \right) \hat{U}^+ \\
&= \hat{U} \left(\sum_k g_k \begin{pmatrix} f_a^{(1)k} & 0 & 0 & ... \\ 0 & f_a^{(2)k} & 0 & ... \\ 0 & 0 & f_a^{(3)k} & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix} \right) \hat{U}^+ \\
&= \hat{U} \left(\begin{pmatrix} \sum_k g_k f_a^{(1)k} & 0 & 0 & ... \\ 0 & \sum_k g_k f_a^{(2)k} & 0 & ... \\ 0 & 0 & \sum_k g_k f_a^{(3)k} & ... \\ ... & ... & ... & ... \end{pmatrix} \right) \hat{U}^+ .
\end{aligned} \tag{88}$$

(Sebagai contoh pencarian matriks $\hat{U}$, lihat Gasiorowicz Example 9-2.)