ввиду эрмитовости оператора $\hat{H}$. Правая же сторона дает искомое равенство.

В современной литературе широко применяется система обозначений (введенная *Дираком*), в которой матричные элементы f_{nm} записываются как [1])

$$\langle n | f | m \rangle. \tag{11,17}$$

Этот символ построен так, что его можно рассматривать как «составленный» из обозначения величины f и символов $|m\rangle$ и $|n\rangle$, обозначающих соответственно начальное и конечное состояния как таковые (вне зависимости от того, в каком представлении используются волновые функции состояний). С помощью этих же символов «составляются» обозначения для коэффициентов разложения волновых функций: если мы имеем полный набор волновых функций, отвечающих состояниям $|n_1\rangle$, $|n_2\rangle$, ..., то коэффициенты разложения по ним волновой функции некоторого состояния $|m\rangle$ обозначаются как $\langle n_i | m \rangle$:

$$\langle n_i | m \rangle = \int \psi_{n_i}^* \psi_m \, dq. \tag{11,18}$$

§ 12. Преобразование матриц

Матричные элементы одной и той же физической величины могут определяться по отношению к различным совокупностям волновых функций. Это могут быть, например, волновые функции стационарных состояний, описывающихся различными наборами физических величин, или волновые функции стационарных состояний одной и той же системы, находящейся в различных внешних полях. В связи с этим возникает вопрос о преобразовании матриц от одного представления к другому.

Пусть $\psi_n(q)$ и $\psi'_n(q)$ $(n = 1, 2, \ldots)$ — две полные системы ортонормированных функций. Они связаны друг с другом некоторым линейным преобразованием

$$\psi'_n = \sum_m S_{mn} \psi_m, \tag{12,1}$$

представляющим собой просто разложение функций ψ'_n по полной системе функций ψ_n. Это преобразование можно записать в операторном виде

$$\psi'_n = \hat{S} \psi_n. \tag{12,2}$$

Оператор $\hat{S}$ должен удовлетворять определенному условию для того, чтобы обеспечить ортонормированность функций ψ'_n,

[1]) Мы будем пользоваться в этой книге обоими способами обозначения матричных элементов. Обозначение (11,17) в особенности удобно, когда каждый из индексов надо писать в виде совокупности нескольких букв.

если таковыми являются функции ψ_n. Действительно, подставив (12,2) в условие $\int \psi_m'^* \psi_n' \, dq = \delta_{mn}$ и учитывая определение транспонированного оператора (3,14), получим

$$\int (\hat{S}\psi_n) \hat{S}^* \psi_m^* \, dq = \int \psi_m^* \tilde{\hat{S}}^* \hat{S} \psi_n \, dq = \delta_{mn}.$$

Для того чтобы это равенство имело место при всех m, n, должно быть $\tilde{\hat{S}}^* \hat{S} = 1$, или

$$\tilde{\hat{S}}^* \equiv \hat{S}^+ = \hat{S}^{-1}, \tag{12,3}$$

т. е. обратный оператор совпадает с сопряженным. Операторы, обладающие таким свойством, называют *унитарными*. В силу этого свойства преобразование $\psi_n = \hat{S}^{-1}\psi_n'$, обратное преобразованию (12,1), дается формулой

$$\psi_n = \sum_m S_{nm}^* \psi_m'. \tag{12,4}$$

Написав равенства $\hat{S}^+\hat{S} = 1$ или $\hat{S}\hat{S}^+ = 1$ в матричном виде, получим условия унитарности в виде

$$\sum_l S_{lm}^* S_{ln} = \delta_{mn} \tag{12,5}$$

или

$$\sum_l S_{ml}^* S_{nl} = \delta_{mn}. \tag{12,6}$$

Рассмотрим теперь какую-либо физическую величину f и напишем ее матричные элементы в «новом» представлении, т. е. по отношению к функциям ψ_n'. Они даются интегралами

$$\int \psi_m'^* \hat{f} \psi_n' \, dq = \int (\hat{S}^* \psi_m^*)(\hat{f}\hat{S}\psi_n) \, dq = \int \psi_m^* \tilde{\hat{S}}^* \hat{f} \hat{S} \psi_n \, dq = \int \psi_m^* \hat{S}^{-1} \hat{f} \hat{S} \psi_n \, dq.$$

Отсюда видно, что матрица оператора $\hat{f}$ в новом представлении совпадает с матрицей оператора

$$\hat{f}' = \hat{S}^{-1}\hat{f}\hat{S} \tag{12,7}$$

в старом представлении[1]).

---

[1]) Если $\{\hat{f}, \hat{g}\} = -i\hbar\hat{c}$ есть правило коммутации двух операторов $\hat{f}$ и $\hat{g}$, то после преобразования (12,7) получим $\{\hat{f}', \hat{g}'\} = -i\hbar\hat{c}'$, т. е. правило остается прежним. В примечании на стр. 44 было отмечено, что $\hat{c}$ есть квантовый аналог классической скобки Пуассона $[f, g]$. Но в классической механике скобки Пуассона инвариантны по отношению к каноническим преобразованиям переменных (обобщенных координат и импульсов) — см. I, § 45. В этом смысле можно сказать, что унитарные преобразования в квантовой механике играют роль, аналогичную роли канонических преобразований в классической механике.

Сумму диагональных элементов матрицы называют ее *следом* и обозначают как $\mathrm{Sp}\, f$ [1]):

$$\mathrm{Sp}\, f = \sum_n f_{nn}. \tag{12,8}$$

Отметим прежде всего, что след произведения двух матриц не зависит от порядка множителей

$$\mathrm{Sp}\,(fg) = \mathrm{Sp}\,(gf). \tag{12,9}$$

Действительно, по правилу умножения матриц имеем

$$\mathrm{Sp}\,(fg) = \sum_n \sum_k f_{nk} g_{kn} = \sum_k \sum_n g_{kn} f_{nk} = \mathrm{Sp}\,(gf).$$

Аналогичным образом легко убедиться в том, что для произведения нескольких матриц след не меняется при циклической перестановке множителей; так,

$$\mathrm{Sp}\,(fgh) = \mathrm{Sp}\,(hfg) = \mathrm{Sp}\,(ghf). \tag{12,10}$$

Важнейшим свойством следа является его независимость от выбора системы функций, по отношению к которым определяются матричные элементы. Действительно,

$$\mathrm{Sp}\, f' = \mathrm{Sp}\,(S^{-1} f S) = \mathrm{Sp}\,(S S^{-1} f) = \mathrm{Sp}\, f. \tag{12,11}$$

Отметим также, что унитарное преобразование оставляет инвариантной сумму квадратов модулей преобразуемых функций. Действительно, учитывая (12,6), имеем

$$\sum_i |\psi_i'|^2 = \sum_{k,\,l,\,i} S_{ki}\psi_k S_{li}^*\psi_l^* = \sum_{k,\,l} \psi_k\psi_l^*\delta_{kl} = \sum_k |\psi_k|^2. \tag{12,12}$$

Всякий унитарный оператор можно представить в виде

$$\hat{S} = e^{i\hat{R}}, \tag{12,13}$$

где $\hat{R}$ — эрмитов оператор; действительно, из $\hat{R}^+ = \hat{R}$ следует, что

$$\hat{S}^+ = e^{-i\hat{R}^+} = e^{-i\hat{R}} = \hat{S}^{-1}.$$

Отметим разложение

$$\hat{f}' = \hat{S}^{-1}\hat{f}\hat{S} = \hat{f} + \{\hat{f},\, i\hat{R}\} + \frac{1}{2}\{\{\hat{f},\, i\hat{R}\},\, i\hat{R}\} + \ldots, \tag{12,14}$$

в котором легко убедиться прямой проверкой путем разложения множителей $\exp(\pm i\hat{R})$ по степеням оператора $\hat{R}$. Это разложение может оказаться полезным, когда $\hat{R}$ пропорционален малому параметру, так что (12,14) становится разложением по степеням этого параметра.

---

[1]) От немецкого слова Spur — след. Используется также обозначение Tr от английского trace. Разумеется, рассмотрение следа матрицы предполагает сходимость суммы по n.