§ 13. Гейзенберговское представление операторов

В излагаемом математическом аппарате квантовой механики операторы, соответствующие различным физическим величинам, действуют на функции координат и сами по себе явной зависимости от времени обычно не содержат. Зависимость средних значений физических величин от времени возникает лишь через временную зависимость волновой функции состояния согласно формуле

$$\bar{f}(t) = \int \Psi^*(q, t)\hat{f}\Psi(q, t)\,dq. \qquad (13,1)$$

Аппарат квантовой механики можно, однако, сформулировать и в несколько другом, эквивалентном, виде, в котором зависимость от времени перенесена с волновых функций на операторы. Хотя в этой книге мы не будем пользоваться таким (так называемым *гейзенберговским* в отличие от *шредингеровского*) представлением операторов, мы сформулируем его здесь, имея в виду дальнейшие применения в релятивистской теории.

Введем унитарный (ср. (12,13)) оператор

$$\hat{S} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \qquad (13,2)$$

где $\hat{H}$ — гамильтониан системы. По определению, его собственные функции совпадают с собственными функциями оператора $\hat{H}$, т. е. с волновыми функциями стационарных состояний $\psi_n(q)$, причем

$$\hat{S}\psi_n(q) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(q). \qquad (13,3)$$

Отсюда следует, что разложение (10,3) произвольной волновой функции Ψ по волновым функциям стационарных состояний может быть записано в операторной форме как

$$\Psi(q, t) = \hat{S}\Psi(q, 0), \qquad (13,4)$$

т. е. действие оператора $\hat{S}$ приводит к переводу волновой функции системы в некоторый начальный момент времени в волновую функцию в произвольный момент времени.

Введя, в соответствии с (12,7), зависящий от времени оператор

$$\hat{f}(t) = \hat{S}^{-1}\hat{f}\hat{S}, \qquad (13,5)$$

будем иметь

$$\bar{f}(t) = \int \Psi^*(q, 0)\hat{f}(t)\Psi(q, 0)\,dq, \qquad (13,6)$$

т. е. представим формулу для среднего значения величины f (являющуюся определением операторов) в виде, в котором зависимость от времени полностью перенесена на оператор.

Очевидно, что матричные элементы оператора (13,5), по отношению к волновым функциям стационарных состояний совпадают с зависящими от времени матричными элементами $f_{nm}(t)$, определяемыми формулой (11,3).

Наконец, продифференцировав выражение (13,5) по времени (предполагая при этом сами операторы $\hat{f}$ и $\hat{H}$ не содержащими t), получим уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{f}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{f}(t) - \hat{f}(t)\hat{H}], \tag{13,7}$$

аналогичное формуле (9,2), но имеющее несколько иной смысл: выражение (9,2) представляет собой определение оператора $\hat{\dot{f}}$, соответствующего физической величине $\dot{f}$, между тем как в левой стороне уравнения (13,7) стоит производная по времени от оператора самой величины f.

§ 14. Матрица плотности

Описание системы с помощью волновой функции соответствует наиболее полному возможному в квантовой механике описанию — в смысле, указанном в конце § 1.

С состояниями, не допускающими такого описания, мы столкнемся, рассмотрев систему, являющуюся частью некоторой бо̀льшей замкнутой системы. Предположим, что замкнутая система в целом находится в некотором состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi(q, x)$, где x обозначает совокупность координат рассматриваемой системы, а q — остальные координаты замкнутой системы. Эта функция, вообще говоря, отнюдь не распадается на произведение функций только от x и только от q, так что система не обладает своей волновой функцией [1]).

Пусть f есть некоторая физическая величина, относящаяся к нашей системе. Ее оператор действует поэтому только на координаты x, но не на q. Среднее значение этой величины в рассматриваемом состоянии есть

$$\bar{f} = \iint \Psi^*(q, x)\hat{f}\Psi(q, x)\,dq\,dx. \tag{14,1}$$

Введем функцию $\rho(x, x')$, определяемую посредством

$$\rho(x, x') = \int \Psi(q, x)\Psi^*(q, x')\,dq, \tag{14,2}$$

[1]) Для того чтобы $\Psi(q, x)$ распалось (в данный момент времени) на такое произведение, измерение, в результате которого было создано данное состояние, должно полным образом описывать рассматриваемую систему и остальную часть замкнутой системы в отдельности. Для того же, чтобы $\Psi(q, x)$ продолжало иметь такой вид в будущие моменты времени, необходимо также, чтобы эти части замкнутой системы не взаимодействовали друг с другом (см. § 2). Ни то, ни другое нами теперь не предполагается.