ГЛАВА VI

МАТРИЧНАЯ ФОРМА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

§ 44. Операторы и матрицы

Развитый в предыдущих главах расчетный метод квантовой механики — метод линейных эрмитовых операторов, не является единственным расчетным аппаратом, применяемым в квантовой механике. Оказалось, что наряду с операторами всем механическим величинам в квантовой механике можно сопоставить так называемые эрмитовы матрицы. Под матрицей R понимают совокупность величин, образующих таблицу

$$R = \begin{Vmatrix} R_{11} & R_{12} \ldots R_{1n} \\ R_{21} & R_{22} \ldots R_{2n} \\ \vdots & \vdots \\ R_{n1} & R_{n2} \ldots R_{nn} \end{Vmatrix}. \tag{44,1}$$

Число строк и столбцов в таблице может в общем случае не совпадать. Каждая из величин (вообще говоря комплексных), стоящих в таблице, носит название матричного элемента. Матричный элемент имеет два индекса — первый означает номер строки, второй — номер столбца. Понятие о матрицах обычно вводится в связи с линейным преобразованием векторов в пространстве n-измерений [1]).

Несколько ниже мы увидим, что в квантовой механике имеется возможность геометрической интерпретации волновой функции, как вектора в некотором воображаемом пространстве. Пока же при помощи весьма общего рассуждения убедимся, что каждому линейному оператору $\hat{F}$ может быть сопоставлена матрица F с определенными значениями матричных элементов.

Задание оператора означает, что задан результат действия

---

[1]) См. более подробно В. И. Смирнов, Курс высшей математики, т. III, ч. 1, Физматгиз, 1958, стр. 95.

его на функцию $\psi(x)$

$$\hat{R}\psi(x) = \varphi(x). \tag{44,2}$$

Перейдем от x-представления к F-представлению. Для этого разложим функции $\psi(x)$ и $\varphi(x)$ по собственным функциям $\psi_m(x)$ оператора $\hat{F}$. Будем предполагать, что оператор $\hat{F}$ обладает дискретным спектром. Например, представлением такого рода может быть энергетическое представление (E-представление)

$$\left.\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_m c_m\psi_m(x), \\ \varphi(x) &= \sum_n b_n\psi_n(x). \end{aligned}\right\} \tag{44,3}$$

Совокупность амплитуд c_m (или b_n) определяет волновую функцию ψ (или φ) в F-представлении. Иногда эту совокупность удобно обозначать в виде столбца

$$c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}; \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}. \tag{44,4}$$

Разложение (44,3) подставляем в (44,2). Получаем

$$\sum_n b_n\psi_n(x) = \sum_m c_m\hat{R}\psi_m(x).$$

Умножая левую и правую части этого равенства на $\psi_l^*(x)$ и интегрируя по всей области изменения независимых переменных, найдем

$$b_l = \sum_m R_{lm}c_m, \tag{44,5}$$

где

$$R_{lm} = \int \psi_l^*(x)\,\hat{R}\psi_m(x)\,dV. \tag{44,6}$$

Соотношение (44,5) определяет непосредственно в F-представлении преобразование функции ψ в функцию φ под действием оператора $\hat{R}$. Оператор $\hat{R}$ в этом представлении дается формулой (44,6), т. е. в виде матрицы. Таким образом, задание матрицы R эквивалентно заданию самого оператора $\hat{R}$.

Матричный элемент R_{ik} иногда называют матричным элементом, отвечающим переходу из k-го состояния в i-е состояние. Такая терминология основана на следующем рассуждении. Предположим, что исходным состоянием системы является k-е состояние $\psi(x) = \psi_k(x)$. При действии оператора $\hat{R}$ имеет место преобразование (44,2). Пользуясь (44,3), (44,5) и учитывая, что в данном случае $c_m = \delta_{mk}$, $b_n = R_{nk}$, получаем

$$\varphi(x) = \hat{R}\psi_k = \sum_n b_n \psi_n = \sum_n R_{nk}\psi_n(x), \tag{44,7}$$

и следовательно квадрат модуля матричного элемента R_{ik} определяет вероятность нахождения системы в i-м состоянии.

Зная матрицу, отвечающую величине R, не представляет труда найти и среднее значение этой величины в некотором состоянии ψ. По общей формуле (22,4) имеем

$$\overline{R} = \int \psi^* \hat{R} \psi \, dV.$$

Подставляя сюда вместо ψ разложение (44,3), получаем

$$\overline{R} = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int \psi_m^* \hat{R} \psi_n \, dV = \sum_m \sum_n c_m^* R_{mn} c_n. \tag{44,8}$$

Заметим, что если мы определим матричные элементы (44,6) с помощью волновых функций ψ_m, которые являются собственными функциями оператора $\hat{R}$, то мы тем самым определим матрицу оператора R в собственном представлении

$$R_{ml} = \int \psi_m^* \hat{R} \psi_l \, dV = R_l \int \psi_m^* \psi_l \, dV = R_l \delta_{ml}. \tag{44,9}$$

Мы видим, что в этом случае отличны от нуля лишь матричные элементы с $m = l$. Матрицы такого вида называются диагональными

$$R = \begin{Vmatrix} R_{11} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & R_{22} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & R_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{Vmatrix}. \tag{44,10}$$

Таким образом, в своем собственном представлении любой оператор изображается диагональной матрицей, причем диагональные элементы равны собственным значениям этого оператора.

Задание матричных элементов R_{ml} полностью эквивалентно заданию оператора $\hat{R}$. Оно позволяет определить, как мы увидим, собственные значения и собственные функции этого оператора. С другой стороны, если известен оператор $\hat{R}$, то могут быть определены и матричные элементы R_{ml}.

Эрмитовость оператора $\hat{R}$ налагает известное ограничение на вид матричных элементов R_{ml}. Именно, для матричного элемента R_{ml}^*, комплексно сопряженного элементу R_{ml}, имеем

$$R_{ml}^* = \left(\int \psi_{ml}^* \hat{R} \psi_l \, dV \right)^* = \int \psi_m \hat{R}^* \psi_l^* \, dV.$$

По определению эрмитового оператора

$$\int \psi_m \hat{R}^* \psi_l^* dV = \int \psi_l^* \hat{R} \psi_m \, dV,$$

так что

$$R_{ml}^* = R_{lm}.$$

Мы видим, что из требования эрмитовости оператора вытекает свойство матричных элементов

$$R_{lm} = R_{ml}^*, \tag{44,11}$$

именуемое эрмитовостью матрицы.

Итак, каждой физической величине в квантовой механике наряду с эрмитовым оператором $\hat{R}$ можно сопоставить эрмитову матрицу R, матричные элементы которой определяются формулой (44, 6).

Как мы увидим ниже, матричная форма квантовой механики в некоторых случаях удобнее операторной. Представление квантовой механики в матричной форме позволит нам сформулировать уравнения квантовой механики по образу уравнений классической физики. В них не будет более фигурировать волновая функция. Сами уравнения по форме будут совпадать с уравнениями классической механики, но с тем лишь принципиальным отличием, что в этих уравнениях классические величины будут заменены соответствующими матрицами. Однако прежде чем перейти к систематическому изложению квантовой механики в матричной форме, необходимо привести основные понятия матричного исчисления.

§ 45. Основы матричного исчисления

В предыдущем параграфе мы определили произвольную матрицу R, как совокупность величин R_{lm}, расположенных в определенном порядке в виде таблицы

$$R = \begin{Vmatrix} R_{11} & R_{12} & \dots & & \\ R_{21} & R_{22} & \dots & & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ R_{n1} & R_{n2} & \dots & R_{nn} & \dots \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \end{Vmatrix}. \tag{45,1}$$

Матрицы, у которых число столбцов равно числу строк, называются квадратными. Матрица может быть как конечной,