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

$$R_{lm} = R_{ml}^*, \qquad (44,11)$$

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

$$R = \begin{vmatrix} R_{11} & R_{12} & \dots & & \\ R_{21} & R_{22} & \dots & & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ R_{n1} & R_{n2} & \dots & R_{nn} & \dots \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \end{vmatrix}. \qquad (45,1)$$

Матрицы, у которых число столбцов равно числу строк, называются квадратными. Матрица может быть как конечной, если конечно число столбцов и число строк, так и бесконечной, если оно как угодно велико. Матричные элементы R_{11}, R_{22}, ..., R_{nn}, ..., образующие диагональ матрицы, называются диагональными. Нулевой матрицей O называют матрицу, все элементы которой равны нулю. Единичной матрицей называют диагональную матрицу, у которой все диагональные элементы равны единице. Будем обозначать эту матрицу через 1:

$$1 = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \dots \\ 0 & 1 & 0 \dots \\ 0 & 0 & 1 \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot \; \cdot \; \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \; \cdot \; \cdot \end{Vmatrix}, \tag{45,2}$$

т. е. $(1)_{mn} = \delta_{mn}$. Матрицу можно рассматривать как некоторое гиперкомплексное число, подобно тому, как совокупность двух чисел a и b можно трактовать как одно комплексное число $a + ib$. Как и для комплексных чисел, можно построить алгебру гиперкомплексных чисел — матриц, определив действия сложения и умножения матриц.

Суммой двух матриц F и D называется матрица R, каждый из матричных элементов которой равен сумме соответствующих матричных элементов матриц F и D

$$R = F + D, \quad \text{если} \quad R_{ml} = F_{ml} + D_{ml}. \tag{45,3}$$

При этом складывают или вычитают подобные матрицы, т. е. матрицы, имеющие одинаковое число столбцов и строк. Две матрицы F и D равны между собой, если равны соответствующие матричные элементы

$$F = D, \quad \text{если} \quad F_{ml} = D_{ml}. \tag{45,4}$$

Определим, далее, произведение числа k на матрицу D как такую матрицу F, каждый матричный элемент которой равен произведению числа k на соответствующий матричный элемент матрицы D:

$$\left.\begin{aligned} F &= kD, \\ F_{ml} &= kD_{ml}. \end{aligned}\right\} \tag{45,5}$$

Матрица L называется произведением матриц F и D,

$$L = FD,$$

если матричный элемент L_{mn} равен

$$L_{mn} = \sum_l F_{ml} D_{ln}. \tag{45,6}$$

Это означает, что каждый матричный элемент матрицы L равен сумме произведений элементов m-й строки матрицы F на элементы n-го столбца матрицы D.

Матрицу F можно умножать на матрицу D только в том случае, когда число столбцов матрицы F равно числу строк матрицы D. Подчеркнем, что произведение матриц, как и произведение операторов, некоммутативно, т. е. в общем случае

$$FD \neq DF.$$

Если в качестве одного из сомножителей взять единичную матрицу (45,2), то мы придем к равенствам

$$F1 = 1F = F, \tag{45,7}$$

т. е. умножение на единичную матрицу коммутативно. Заметим, что при умножении двух матриц с отличными от нуля матричными элементами может получиться нулевая матрица. Пусть, например,

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad D = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$L = FD = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0.$$

С другой стороны,

$$L' = DF = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \neq 0.$$

Аналогично (45,6) можно образовать произведение трех и более матриц. Так, если $FD = L$, то произведение RFD равно

$$(RFD)_{mn} = \sum_l R_{ml} L_{ln} = \sum_l \sum_p R_{ml} F_{lp} D_{pn}. \tag{45,8}$$

К точно такому же выражению придем, если возьмем произведение матрицы (RF) на матрицу D. Таким образом, для матричного произведения справедлив сочетательный закон

$$(RF) D = R (FD). \tag{45,9}$$

Легко показать также, что справедлив и распределительный закон

$$R (F + D) = RF + RD. \tag{45,10}$$

Определение основных действий над матрицами, даваемое формулами (45,3)—(45,6), полностью соответствуют аналогичным соотношениям для линейных операторов. Для формул (45,3)—(45,5) это утверждение очевидно. Нетрудно убедиться в этом соответствии и для формулы (45,6). Пусть оператор $\hat{L}$ равен произведению операторов $\hat{F}$ и $\hat{D}$, т. е. $\hat{L} = \hat{F}\hat{D}$. Найдем матрицу, отвечающую этому оператору, в некотором произвольном представлении. Предположим, что оператор $\hat{D}$ преобразует функцию ψ в функцию φ, а оператор $\hat{F}$ соответственно φ в χ, так что

$$\left.\begin{aligned} \varphi &= \hat{D}\psi, \\ \chi &= \hat{F}\varphi. \end{aligned}\right\} \tag{45,11}$$

Перепишем эти равенства, разложив волновые функции ψ, φ и χ в ряд по некоторой системе функций ψ_m. Пусть имеют место разложения

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n; \quad \varphi = \sum_l b_l\psi_l; \quad \chi = \sum_k d_k\psi_k.$$

Сравнивая с (44,2) и (44,5), получаем

$$b_l = \sum_n D_{ln}c_n, \quad d_m = \sum_l F_{ml}b_l.$$

Подставляя b_l во второе из полученных равенств, имеем

$$d_m = \sum_l \sum_n F_{ml}D_{ln}c_n. \tag{45,12}$$

С другой стороны, учитывая, что $\chi = \hat{L}\psi$, можем записать

$$d_m = \sum_n L_{mn}c_n. \tag{45,13}$$

Сравнивая (45,13) с (45,12), приходим к равенству (45,6).

Если некоторая матрица F имеет неодинаковое число столбцов и строк, то, вычеркивая некоторое число столбцов или строк, можно прийти к квадратной таблице с равным числом строк и столбцов. Из этой таблицы вычисляется определитель $\det F$ матрицы F.

Наивысший возможный порядок этого определителя получается при вычеркивании минимального числа строк или столбцов. Наивысший порядок не равного нулю определителя, получающегося из матрицы, называют рангом матрицы.

В некоторых приложениях важную роль играет сумма диагональных элементов матрицы, именуемая часто шпуром (нем. Spur — след). По определению

$$\mathrm{Sp}\, F = \sum_n F_{nn}.$$

Матрица F называется несингулярной, если можно построить матрицу, обратную к ней. Обратная матрица, которую мы обозначим через F^{-1}, удовлетворяет уравнениям

$$FF^{-1}=1; \quad F^{-1}F=1. \tag{45,14}$$

Чтобы найти элементы матрицы F^{-1}, нужно найти решение системы однородных линейных уравнений, которая получается из определения (45,14):

$$\sum_k (F)_{mk}(F^{-1})_{kn}=\delta_{mn}; \quad \sum_l (F^{-1})_{ml}F_{ln}=\delta_{mn} \tag{45,15}$$

при всевозможных значениях m и n.

Система уравнений (45,15) может быть разрешена только в том случае, если детерминант $\det F$ матрицы F отличен от нуля. (Предполагается, что матрица F — квадратная.)

Пользуясь (45,14), легко найти матрицу, обратную произведению матриц $RFD\ldots$ (если она существует)

$$(RFD\ \ldots)^{-1}=\ \ldots\ D^{-1}F^{-1}R^{-1}. \tag{45,16}$$

Определим далее матрицу F^+, сопряженную (или эрмитово сопряженную) с исходной матрицей F

$$(F^+)_{mn}=(F_{nm})^*. \tag{45,17}$$

Комплексно сопряженный матричный элемент $(F_{nm})^*$ мы будем обозначать как $\overset{*}{F}_{nm}$.

Из определения (45,17) непосредственно следует, что

$$(F+D)^+=F^+ + D^+. \tag{45,18}$$

Легко определить также матрицу, сопряженную произведению матриц. Так, если $L = FD$, то

$$(L^+)_{mn}=\overset{*}{L}_{nm}=\sum_k \overset{*}{F}_{nk}\overset{*}{D}_{km}=\sum_k (D^+)_{mk}(F^+)_{kn} \tag{45,19}$$

и, следовательно,

$$(FD)^+=D^+F^+. \tag{45,20}$$

В частности, если $L = kD$, где k — число, то

$$L^+=k^*D^+. \tag{45,21}$$

Соотношение (45,20), конечно, сразу обобщается на произведение любого числа матриц

$$(FDR\ \ldots)^+=\ \ldots\ R^+D^+F^+. \tag{45,22}$$

Если матрица F совпадает со своей сопряженной матрицей F^+, $F = F^+$, то она является эрмитовой или самосопряженной. Это определение совершенно аналогично определению эрмитовости оператора (см. (44,11)). Для матричных элементов эрмитовой матрицы имеем:

$$F_{nm} = (F^+)_{nm} = F^*_{mn}. \tag{45,23}$$

Матрица F называется унитарной, если $F^+ = F^{-1}$. Последнее условие можно также переписать как

$$F^+F = FF^+ = 1. \tag{45,24}$$

Если матрицы F и D унитарны, то унитарно и их произведение. Действительно,

$$(FD)^+ = D^+F^+ = D^{-1}F^{-1} = (FD)^{-1}. \tag{45,25}$$

Мы будем встречаться также с простейшими функциями матриц, причем задание функции от матрицы означает задание закона, по которому одной матрице сопоставляется другая матрица. Так как правила умножения и сложения матриц определены, то не представляет труда ввести понятие целой рациональной функции $f(D)$ матрицы D. Кроме того, мы будем иметь дело и с более сложными функциями, например вида e^D, где D — некоторая матрица. Под функцией e^D понимается следующий ряд:

$$e^D = 1 + D + \frac{1}{2}D^2 + \ldots + \frac{1}{n!}D^n + \ldots \tag{45,26}$$

Покажем, например, что матрица R, определяемая функцией e^{iF}, $R = e^{iF}$, где F — произвольная эрмитова матрица, унитарна. Непосредственным вычислением легко проверить, что матрицей R^{-1}, обратной R, служит матрица e^{-iF}. С другой стороны, для матрицы, сопряженной к R, имеем

$$R^+ = \left(1 + iF - \frac{1}{2}F^2 - \frac{i}{3!}F^3 + \ldots\right)^+ =$$
$$= \left(1 - iF - \frac{1}{2}F^2 + \frac{i}{3!}F^3 + \ldots\right) = e^{-iF}$$

(так как $F^+ = F$). Таким образом, $R^+ = R^{-1}$ и, следовательно, матрица R унитарна.

Сформулированные в этом параграфе правила действия останутся справедливыми и для матриц с бесконечно большим числом столбцов и строк, если только все возникающие ряды, например (45,6), будут сходящимися.

Как мы уже упоминали ранее, введение матриц тесно связано с понятием о линейном преобразовании n-мерного вектора.

Понятие n-мерного вектора является естественным обобщением обычного понятия о векторе. Вектор $\boldsymbol{x}$ в n-мерном пространстве задается совокупностью n, вообще говоря, комплексных чисел, именуемых компонентами этого вектора $x_1, x_2, \ldots, x_n$. Вряд ли стоит оговаривать, что пространство n-измерений не связывается с какой-либо физической реальностью, и вектор в n-мерном пространстве имеет характер математического обобщения. Как и для обычных векторов, можно ввести понятие о скалярном произведении двух векторов $\boldsymbol{x}$ и $\boldsymbol{y}$ в пространстве n измерений. Именно, скалярное произведение вектора $\boldsymbol{y}$ на вектор $\boldsymbol{x}$ определяется как

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i. \tag{45,27}$$

Если вектор $\boldsymbol{x}$ имеет вещественные компоненты, то определение (45,27) совпадает с обычным определением скалярного произведения.

Наоборот, если компоненты хотя бы одного из векторов $\boldsymbol{x}$ или $\boldsymbol{y}$ комплексны, то определение (45,27) приводит к новым важным следствиям.

Образуем скалярное произведение вектора $\boldsymbol{x}$ на этот же вектор $\boldsymbol{x}$

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_i^* x_i = \sum_{i=1}^{n} |x_i|^2. \tag{45,28}$$

Оно представляет обобщение понятия о квадрате вектора на случай комплексных значений компонент. Длиной или нормой вектора называют величину

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2}. \tag{45,29}$$

Скалярное произведение двух векторов в n-мерном пространстве, очевидно, некоммутативно

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i \neq (\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} y_i^* x_i.$$

Если скалярное произведение двух векторов равно нулю $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = 0$, то такие векторы называются взаимно ортогональными.

Рассмотрим две системы координат k и k' с взаимно ортогональными осями. Пусть компоненты некоторого вектора в системе k суть x_i, а в системе k' — x_i'. Как и в трехмерной евклидовой геометрии, имеет место линейная связь между компонентами, выражаемая соотношением

$$x'_i = \sum_k a_{ik} x_k. \qquad (45,30)$$

Совокупность чисел a_{ik} образует матрицу

$$\| a \| = \begin{Vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{Vmatrix},$$

называемую матрицей линейного преобразования.

При линейном ортогональном преобразовании (45,30) имеет место условие

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} | x_i |^2 = (\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}') = \sum_{i=1}^{n} | x'_i |^2. \qquad (45,31)$$

Преобразование (45,30), удовлетворяющее требованию (45,31), т. е. оставляющее неизменным квадрат длины вектора, называется также унитарным преобразованием.

Понятие вектора с комплексными значениями компонент в n-мерном пространстве может быть обобщено на случай пространства бесконечного числа измерений, $n \to \infty$. Пространство с бесконечным числом измерений, для которого справедливо определение (45,28) квадрата длины отрезка, называется пространством Гильберта. Вектор в пространстве Гильберта имеет бесконечное число компонент, каждая из которых может быть как вещественной, так и комплексной.

Часто векторы в n-мерном пространстве (конечно- и бесконечномерном) представляют в виде матрицы

$$\boldsymbol{x} = \begin{Vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \end{Vmatrix}.$$

Тогда преобразование (45,30) можно записать в виде

$$\boldsymbol{x}' = a\boldsymbol{x}.$$

Действительно, в компонентах имеем

$$x'_i = a_{ik} x_k,$$

что совпадает с (45,30).