§ 46. Геометрическая интерпретация волновой функции и канонические преобразования

Изложенный вкратце математический аппарат, в частности векторное исчисление в пространстве Гильберта, несмотря на свою необычность и абстрактность, оказывается в точности соответствующим квантово-механическому подходу к описанию свойств микросистем. Будем рассматривать волновую функцию ψ, характеризующую состояние системы, как вектор ψ в пространстве Гильберта бесконечного числа измерений. Каждой квантово-механической величине F, характеризующей свойства системы, отвечает определенная система координатных осей или, что тоже самое, система единичных базисных векторов (ортов) $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, ..., $\psi_n(x)$ ... Эта система базисных векторов (базисных функций) есть не что иное, как система собственных функций оператора $\hat{F}$, отвечающих возможным собственным значениям F_1, F_2, ... (Предполагаем, что спектр дискретный, обобщение на непрерывный спектр дается далее.) Компонентами вектора ψ в выбранной системе координат будут амплитуды c_1, c_2, ... c_n, определяемые соотношением

$$\psi(x) = \sum_k c_k \psi_k. \tag{46,1}$$

Амплитуды c_k, как мы знаем (см. § 19), равны

$$c_k = \int \psi_k^*(x)\,\psi(x)\,dV.$$

С другой стороны, это равенство можно рассматривать как скалярное произведение вектора ψ на вектор ψ_k

$$c_k = (\psi_k, \psi) = \int \psi_k^*(x)\,\psi(x)\,dV. \tag{46,2}$$

Определение (46,2) соответствует (45,27). Так, если мы имеем два вектора $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ с компонентами, соответственно b_k и c_k, то скалярное произведение вектора ψ на вектор φ равно

$$(\varphi, \psi) = \sum_k b_k^* c_k = \int \varphi^*(x)\,\psi(x)\,dV. \tag{46,3}$$

Совокупность амплитуд c_k, как мы знаем, представляет волновую функцию в F-представлении. Таким образом, совокупность компонент вектора ψ в системе координат, ортами которой служат собственные функции ψ_n оператора $\hat{F}$, и является волновой функцией в F-представлении.

Система базисных векторов ψ_1, ψ_2, ... является системой единичных, взаимно ортогональных векторов. Это следует из условия нормировки и ортогональности собственных функций оператора $\hat{F}$ (см. § 18)

$$\int \psi_k^*(x)\,\psi_m(x)\,dV = (\psi_k,\ \psi_m) = \delta_{km}. \tag{46,4}$$

Рассмотрим теперь переход от одного представления к другому представлению. Например, переход от представления, в котором диагональна матрица F (F-представление) к представлению, в котором диагональна матрица D (D-представление). Геометрически это означает переход от системы координат, образованной базисными векторами ψ_m, к системе координат, образованной базисными векторами φ_k. Функции ψ_m и φ_k являются собственными функциями соответственно операторов $\hat{F}$ и $\hat{D}$. Формулы преобразования мы получим, если разложим функции φ_k по системе базисных функций ψ_m (предполагая, что имеется дискретный спектр)

$$\varphi_k = \sum_l S_{lk}\psi_l. \tag{46,5}$$

Очевидно,

$$S_{lk} = \int \psi_l^*(x)\,\varphi_k(x)\,dV = (\psi_l,\ \varphi_k). \tag{46,6}$$

Матрицу S назовем матрицей преобразования от одного представления к другому (или, соответственно, от одной координатной системы к другой). Определенные заключения о свойствах матрицы S мы можем получить сразу, если учтем, что как система функций φ_k, так и система функций ψ_m является системой нормированных ортогональных функций. Следовательно,

$$\int \varphi_m^*\varphi_k\,dV = \sum_{i,\,l} S_{im}^* S_{lk}\delta_{il} = \sum_i S_{im}^* S_{ik} = \sum_i (S^+)_{mi}\, S_{ik} = \delta_{mk}, \tag{46,7}$$

или, в матричной форме,

$$S^+S = 1. \tag{46,8}$$

Производя обратное разложение функций ψ_m по функциям φ_k, легко получить

$$SS^+ = 1. \tag{46,9}$$

Из уравнений (46,8), (46,9) следует, что матрица S является унитарной, $S^+ = S^{-1}$. Преобразование от одного представления к другому, осуществляемое унитарной матрицей S, называется унитарным или каноническим преобразованием. Геометрически оно соответствует некоторому «повороту» в гильбертовом пространстве.

Не представляет труда получить и непосредственную связь между составляющими произвольного вектора ψ в разных системах координат. Пусть

$$\psi = \sum_l c_l \psi_l = \sum_k c'_k \varphi_k.$$

Воспользовавшись (46,5), имеем

$$\sum_l c_l \psi_l = \sum_{l,\,k} c'_k S_{lk} \psi_l.$$

Приравнивая выражения при одинаковых ψ_l, получаем

$$c_l = \sum_k S_{lk} c'_k. \tag{46,10}$$

Это выражение можно переписать в виде матричного равенства, если рассматривать совокупность амплитуд c_l и c'_k как матрицы c и c' с одним столбцом. Тогда

$$c = Sc'. \tag{46,11}$$

Умножая слева на S^+, получим:

$$c' = S^+ c. \tag{46,12}$$

Найдем, далее, как преобразуется произвольная матрица R при переходе к другому представлению. Предположим, что в F-представлении имеет место соотношение

$$b_l = \sum_m R_{lm} c_m \tag{46,13}$$

или, в матричной форме,

$$b = Rc. \tag{46,14}$$

При переходе к другому представлению амплитуды c и b преобразуются в амплитуды c' и b' согласно (46,11), (46,12). Мы воспользуемся соотношением (46,11) и выразим в уравнении (46,14) c и b через c' и b'. При этом получим

$$Sb' = RSc'.$$

Умножая это уравнение слева на S^+, находим

$$b' = S^+ RSc' = R'c'.$$

Таким образом, матрица R', т. е. матрица R в новом представлении, имеет вид

$$R' = S^+ RS$$

или

$$(R')_{mn} = \sum_{k,\,l} (S^+)_{mk} R_{kl} S_{ln}. \tag{46,15}$$

Рассмотрим некоторые свойства унитарного преобразования. Покажем, прежде всего, что если какая-то матрица D эрмитова в одном представлении, то она будет эрмитова и в другом представлении. Действительно, согласно (46,15) и (45,22)

$$D' = S^+DS, \qquad (D')^+ = S^+D^+\left(S^+\right)^+ = S^+D^+S.$$

Так как $D^+ = D$, получаем, что $D' = D'^+$. Унитарное преобразование сохраняет также вид матричных уравнений. Пусть например, имеем уравнения

$$F + D = R; \quad PL = T.$$

Умножая уравнения слева на S^+, а справа на S, соответственно получим, пользуясь (45,9), (46,9)

$$S^+FS + S^+DS = S^+RS, \qquad S^+PSS^+LS = S^+TS.$$

Воспользовавшись (46,15), перепишем эти уравнения в новом представлении

$$F' + D' = R', \qquad P'L' = T'.$$

Как видим, вид уравнений не изменился. Покажем, что при унитарном преобразовании не изменяется также и шпур матрицы

$$\operatorname{Sp} F' = \sum_n F'_{nn} = \sum_{n,\,l,\,k} \left(S^+\right)_{nl} F_{lk} S_{kn} =$$
$$= \sum_{l,\,k} F_{lk} \sum_n S_{kn} \left(S^+\right)_{nl} = \sum_{l,\,k} F_{lk}\delta_{kl} = \operatorname{Sp} F. \qquad (46,16)$$

При этом мы воспользовались (46,9).

Унитарное преобразование сохраняет также детерминант матрицы. Действительно, поскольку детерминант произведения матриц равен произведению детерминантов $\det FDR = \det F \det D \det R$, то имеем

$$\det F' = \det S^+ \det F \det S = \det F \det\left(S^+S\right) = \det F. \qquad (46,17)$$

Детерминант конечной унитарной матрицы по модулю равен единице. Покажем это:

$$|\det S|^2 = (\det S)(\det S)^*,$$

но $(\det S)^* = \det S^+$, так как при транспонировании матрицы детерминант не меняется. Следовательно, получаем:

$$|\det S|^2 = \det S \det S^+ = \det\left(SS^+\right) = 1. \qquad (46,18)$$

§ 47. Собственные функции и собственные значения оператора, заданного в матричной форме

Предположим, что оператор $\hat{D}$ в F-представлении задан в виде матрицы D. Посмотрим, как можно найти собственные функции и собственные значения этого оператора. Уравнение