и D'. Образуем матрицу $F'D'$:

$$(F'D')_{mn} = \sum_k F'_{mk}D'_{kn} = F'_{mm}D'_{mn}\delta_{mn} = (D'F')_{mn}. \qquad (47,9)$$

Следовательно,

$$F'D' = D'F'.$$

Поскольку при унитарном преобразовании вид матричного уравнения не меняется (см. § 46), то в исходном представлении имеем $FD = DF$.

Мы доказали, таким образом, что коммутация матриц необходима для того, чтобы их можно было привести одновременно к диагональному виду. Легко показать, что это условие является также и достаточным.

В этом параграфе мы всюду предполагали, что имеем дело с конечными матрицами. Если, однако, число строк и столбцов N стремится к бесконечности, то математически вопрос существенно усложняется. Система (47,6) будет теперь системой из бесконечно большого числа уравнений. Бесконечно высокой степени будет и уравнение (47,7). Можно показать, однако, что и в этом случае произвольная эрмитова матрица с помощью некоторого унитарного преобразования приводится к диагональному виду с действительными собственными значениями. Мы не будем останавливаться на доказательстве этого положения.

§ 48. Непрерывные матрицы. Обозначения Дирака

До сих пор при обсуждении свойств матриц мы считали, что переменные пробегают дискретный ряд значений. Ясно, однако, что предыдущие результаты должны быть обобщены на случай переменных, изменяющихся непрерывно.

Оказывается, что это обобщение можно провести непосредственно. Все полученные выше формулы остаются справедливыми, если в них все суммы заменены на соответствующие интегралы. Например, формула (45,6) для матричного элемента от произведения двух матриц теперь будет иметь вид

$$L = FD,$$

$$L_{\alpha\beta} = \int F_{\alpha\gamma}D_{\gamma\beta}\,d\gamma. \qquad (48,1)$$

Интегрирование проводится по всей области изменения соответствующей переменной. Единичная матрица I определяется теперь равенством

$$(1)_{\alpha\beta} = \delta(\alpha - \beta), \qquad (48,2)$$

т. е. заменяется δ-функцией. При этом, как легко видеть, для произвольной матрицы F справедливо соотношение

$$F1 = 1F = F.$$

Формулы § 3, выражающие преобразование волновой функции от координатного представления к импульсному и наоборот, также могут быть написаны в матричной форме.

Прежде всего заметим, что координата q в своем собственном представлении должна выражаться диагональной матрицей (см. § 44). Ограничиваясь, для простоты, одномерным случаем, имеем в соответствии с (48,2):

$$q_{xx'} = x\delta(x - x'). \tag{48,3}$$

Найдем в этом представлении матрицу, изображающую импульс частицы. Так же, как и в § 26, будем исходить из соотношения

$$pq - qp = \frac{\hbar}{i}. \tag{48,4}$$

Покажем, что это соотношение удовлетворяется, если выбрать матрицу p в виде

$$p_{xx'} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - x'). \tag{48,5}$$

Прежде всего, приравнивая матричные элементы левой и правой части соотношения (48,4), имеем

$$\int \left(p_{xx''}q_{x''x'} - q_{xx''}p_{x''x'}\right) dx'' = \frac{\hbar}{i}\delta(x - x').$$

Подставляя сюда (48,3) и (48,5), получим

$$\int \Big[x''\delta(x'' - x')\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - x'') - \\ - x\delta(x - x'')\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x'' - x')\Big] dx'' = \delta(x - x').$$

Берем интегралы в соответствии с правилами действия над δ-функциями (см. приложение III т. I). Находим, что, поскольку $y\delta'(y) = -\delta(y)$ (см. (III. 8)),

$$-(x - x')\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - x') = \delta(x - x').$$

Следовательно, мы доказали, что матрицы (48,3) и (48,5) удовлетворяют соотношению (48,4). Если матрицей $p_{xx'}$ подействовать по правилам (44,5) на некоторую функцию $\psi(x)$, то мы получим функцию $\varphi(x)$, равную

$$\varphi(x) = \int p_{xx'}\psi(x')\,dx' = \frac{\hbar}{i}\int \frac{\partial}{\partial x}\delta(x - x')\,\psi(x')\,dx' = \\ = -\frac{\hbar}{i}\int \psi(x')\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x - x')\,dx'.$$

Интегрируя по частям, получаем

$$\varphi(x)=\frac{\hbar}{i}\int\delta(x-x')\frac{\partial\psi}{\partial x'}\,dx'=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}.$$

Мы видим, что действие матрицы $p_{xx'}$ эквивалентно действию оператора $\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$. Формула преобразования волновой функции от координатного представления к импульсному имеет вид

$$c(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int\psi(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,dx. \tag{48,6}$$

В матричной форме это соотношение, согласно (46,12), можно переписать так:

$$c(p)=\int S_{px}^{+}\psi(x)\,dx, \tag{48,7}$$

где $S_{px}^{+}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}px}$ является унитарной матрицей преобразования от x-представления к p-представлению. Естественно, что обратное преобразование выполняется матрицей S_{xp}

$$\psi(x)=\int S_{xp}c(p)\,dp, \tag{48,8}$$

где

$$S_{xp}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{\frac{i}{\hbar}px}.$$

С помощью матрицы S_{xp} не представляет труда определить вид матрицы координаты q в p-представлении. Согласно (46,15), имеем

$$q_p=S^{+}q_xS$$

или

$$(q_p)_{p'q''}=\int S_{p'\tau}^{+}(q_x)_{\tau\tau'}S_{\tau'p''}\,d\tau\,d\tau'.$$

Подставляя в интеграл значение матриц S и q_x (48,3), получаем

$$(q_p)_{p'p''}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-\frac{i}{\hbar}p'\tau}\tau\delta(\tau-\tau')\,e^{\frac{i}{\hbar}\tau'p''}\,d\tau\,d\tau'=\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-\frac{i}{\hbar}p'\tau}\tau e^{\frac{i}{\hbar}p''\tau}\,d\tau=$$

$$=\frac{1}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial p''}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{\hbar}(p''-p')\tau}\,d\tau=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p''}\delta(p''-p').$$

Итак, мы получили матрицу координаты в p-представлении

$$(q_p)_{p'p''}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p''}\delta(p''-p'). \tag{48,9}$$

Этот результат, конечно, можно было бы получить и непосредственно из соотношения (48,4), поскольку матрица p в своем собственном представлении диагональна.

Зная выражение для матриц q и p, мы можем найти матрицу произвольной функции от q и p. Так, если $H(p, q)$ — некоторая функция от p и q, то матрица H будет получена, если вместо p и q подставить соответствующие матрицы и произвести необходимые операции по правилам матричного сложения и умножения. При этом матрица H, как и соответствующий оператор, понимается в смысле разложения в степенной ряд по q и p.

Итак, предположим, что $H(p, q)$ — некоторая известная функция — гамильтониан системы. В координатном представлении матрицы q и p даются выражениями (48,3) и (48,5). Следовательно, в этом представлении известна и матрица H. С помощью некоторого унитарного преобразования S эта матрица может быть преобразована к диагональному виду $H' = E_n\delta_{nm}$. Будем предполагать, для определенности, что матрица H' обладает дискретным спектром. В противном случае нужно писать не δ_{nm}, а $\delta(n - m)$

$$H' = S^+ H(p, q) S.$$

Определим матрицу S. Поскольку $HS = SH'$, имеем

$$\int H_{xx'} S_{x'n}\, dx' = \sum_m S_{xm} H'_{mn} = E_n S_{xn}. \tag{48,10}$$

Рассмотрим интегралы, стоящие слева, для различных функций $H(p, q)$. Прежде всего

$$\int q_{xx'} S_{x'n}\, dx' = x S_{xn}, \qquad \int p_{xx'} S_{x'n}\, dx' = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} S_{xn}.$$

Далее, если $U(q)$ — некоторая функция q, то ее матрица, как легко видеть, имеет вид $U_{xx'} = U(x)\delta(x - x')$, и интеграл равен

$$\int U_{xx'} S_{x'n}\, dx' = U(x) S_{xn}.$$

Аналогичные результаты получим и для функций от p. Например, матрица величины p^2 равна по правилам матричного перемножения $(p^2)_{xx'} = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x - x')$. Соответственно интеграл

$$\int (p^2)_{xx'} S_{x'n}\, dx' = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \int \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x - x') S_{x'n}\, dx' = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} S_{xn}.$$

Для произвольной функции $H(p, q)$, следовательно, получим

$$\int H_{xx'} S_{x'n}\, dx' = H\left(x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) S_{xn} = \hat{H} S_{xn}. \tag{48,11}$$

Соотношение (48,10) является, очевидно, не чем иным, как уравнением Шредингера, записанным в матричной форме в x-представлении

$$\int H_{xx'}\psi_n(x')\,dx' = E_n\psi_n(x).$$

Не представляет труда переписать это уравнение и в p-представлении как в операторной, так и в матричной форме. Полагая

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$$

и обозначая функцию $\psi_n(x)$ в p-представлении через $c_n(p)$ (см. (48,6)), получим

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \hat{U}(p)\right)c_n(p) = E_n c_n(p), \tag{48,12}$$

где $\hat{U}(p)$ — оператор потенциальной энергии в p-представлении.

В матричной форме уравнение (48,12) имеет вид

$$\frac{p^2}{2m}c_n(p) + \int U_{pp'}c_n(p')\,dp' = E_n c_n(p). \tag{48,12'}$$

Здесь $U_{pp'}$ — матрица оператора $\hat{U}$, строится с помощью (48,9) или, что то же самое, определяется равенством

$$U_{pp'} = \int U(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x}\,dx.$$

Уравнение (48,10), пользуясь (48,11), перепишем в виде

$$\hat{H}S_{xn} = E_n S_{xn}.$$

Мы видим, что матрица S строится из собственных функций $\psi_n(x)$ оператора $\hat{H}$

$$S_{xn} = \psi_n(x). \tag{48,13}$$

Если мы имеем некоторый оператор $\hat{F}$, то матрица этого оператора в энергетическом представлении дается, как известно, соотношением

$$F_{nm} = \int \psi_n^*\hat{F}\psi_m\,dx.$$

С другой стороны, это же соотношение можно рассматривать как унитарное преобразование от координатного представления, в котором величина F задана матрицей $F_{xx'}$, к энергетическому представлению. Матрица унитарного преобразования дается формулой (48,13). Действительно,

$$F_{nm} = \int S^+_{nx}F_{xx'}S_{x'm}\,dx\,dx'$$

и

$$\int F_{xx'}S_{x'm}\,dx' = \hat{F}S_{xm}$$

по аналогии с (48,11). Следовательно,

$$F_{nm} = \int S^{+}_{nx}\hat{F}S_{xm}\,dx = \int \psi^{*}_{n}(x)\,\hat{F}\psi_{m}(x)\,dx,$$

и мы опять пришли к прежнему соотношению. Таким образом, все соотношения, полученные в этой главе для матриц, непосредственно обобщаются и на случай операторов, заданных в дифференциальной форме. Имея в виду это обстоятельство, мы в дальнейшем всегда, употребляя слово «оператор», будем подразумевать, что оператор может быть задан как в дифференциальной, так и в матричной форме.

Кратко остановимся, наконец, на некоторых обозначениях, предложенных Дираком, поскольку они часто встречаются в литературе.

Волновую функцию ψ или, вернее, совокупность ее компонент в некоторой координатной системе (в некотором представлении) Дирак называет кэт-вектором и обозначает через $|\psi\rangle$. Например, волновая функция ψ_{nlm}, описывающая состояние с заданными квантовыми числами n, l, m, обозначается через $|nlm\rangle$. С другой стороны, о функциях, комплексно сопряженных к рассмотренным, говорят как о бра-векторах и обозначают через $\langle\psi|$ (ψ^{*}_{nlm} обозначается соответственно через $\langle nlm|$). Название бра и кэт происходит от английского слова «bracket» — скобка $\langle\ \rangle$. В матричных обозначениях кэт-вектору отвечает некоторый столбец, а бра-вектору — строка. Скалярное произведение бра-вектора $\psi^{*}_{b} = \langle b|$ и кэт-вектора $\psi_{a} = |a\rangle$ обозначается через $\langle b|a\rangle$, т. е.

$$\int \psi^{*}_{b}(x)\,\psi_{a}(x)\,dx = \langle b|a\rangle. \qquad (48,14)$$

С другой стороны, это скалярное произведение можно, очевидно трактовать как волновую функцию ψ_{a} в b-представлении. Действительно, если мы напишем разложение

$$\psi_{a}(x) = \int c_{a}(b)\,\psi_{b}(x)\,db \qquad (48,15)$$

(для дискретного спектра интеграл заменяется суммой), то $c_{a}(b)$ представляет волновую функцию состояния «a» в b-представлении

$$c_{a}(b) = \int \psi^{*}_{b}(x)\,\psi_{a}(x)\,dx = \langle b|a\rangle. \qquad (48,16)$$

Соответственно волновая функция состояния «a» в x-представлении $\psi_a(x)$ в обозначениях Дирака имеет вид

$$\psi_a(x) = \langle x \mid a \rangle. \tag{48,17}$$

В этих обозначениях разложение (48,15) можно переписать как

$$\langle x \mid a \rangle = \int_b \langle x \mid b \rangle \langle b \mid a \rangle \, db. \tag{48,18}$$

Из (48,16) вытекает соотношение

$$\langle b \mid a \rangle = \langle a \mid b \rangle^*, \tag{48,19}$$

связывающее волновую функцию состояния «a» в b-представлении с волновой функцией состояния «b» в a-представлении. Волновая функция, описывающая состояние с заданным импульсом, в координатном представлении $\psi_p(\boldsymbol{r})$ в обозначениях Дирака имеет вид

$$\psi_p(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{pr}} = \langle \boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{p} \rangle. \tag{48,20}$$

Соответственно разложение произвольной функции $\psi(\boldsymbol{r})$ по плоским волнам напишем как

$$\langle \boldsymbol{r} \mid \psi \rangle = \int_p \langle \boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{p} \rangle \langle \boldsymbol{p} \mid \psi \rangle \, d\boldsymbol{p} \tag{48,21}$$

или

$$\langle \boldsymbol{r} \mid \rangle = \int_p \langle \boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{p} \rangle \langle \boldsymbol{p} \mid \rangle \, d\boldsymbol{p}. \tag{48,22}$$

Собственная функция оператора момента количества движения $\hat{L}^2$ в координатном представлении в обозначениях Дирака имеет вид

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \langle \vartheta, \varphi \mid l, m \rangle = \left\langle \frac{\boldsymbol{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle. \tag{48,23}$$

Функция $\left\langle \frac{\boldsymbol{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle$ осуществляет переход от представления lm к координатному представлению. Функция

$$Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) = \left\langle \frac{\boldsymbol{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle^* = \left\langle l, m \middle| \frac{\boldsymbol{r}}{r} \right\rangle$$

[см. (48,19)], наоборот, осуществляет переход от координатного представления к угловому.

В том случае, когда углы ϑ, φ определяют направление вектора импульса, функция

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \langle \vartheta, \varphi \mid l, m \rangle = \left\langle \frac{\boldsymbol{p}}{p} \middle| l, m \right\rangle \tag{48,24}$$

осуществляет переход от представления lm к импульсному представлению. Она является собственной функцией оператора $\hat{L}^2$ в импульсном представлении. Матричный элемент F_{ba} в обозначениях Дирака имеет вид

$$F_{ba} = \int \psi_b^* \hat{F} \psi_a \, dV = \langle b \mid F \mid a \rangle. \qquad (48{,}25)$$

Величины a и b, характеризующие состояния системы, могут пробегать как дискретный, так и непрерывный набор значений. Если каждое из состояний a и b характеризуется набором квантовых чисел, например n', l', m' и n, l, m, то матричный элемент, обозначаемый обычно через $F_{n'l'm';\,nlm}$ или $F_{nlm}^{n'l'm'}$, в обозначениях Дирака имеет вид

$$\langle n'l'm' \mid F \mid nlm \rangle.$$

§ 49. Представления Шредингера, Гейзенберга и представление взаимодействия

В этом параграфе мы обсудим некоторые вопросы, связанные с дальнейшим развитием и обобщением математического аппарата квантовой механики. Имеется в виду рассмотрение способов описания развития процесса во времени.

До сих пор мы всецело основывались на уравнении Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi,$$

согласно которому волновая функция системы $\psi(x, t)$ могла быть найдена в произвольный момент времени t, если известно ее начальное значение $\psi(x, 0)$. При таком подходе развитию процесса во времени отвечает соответствующее изменение волновой функции системы $\psi(x, t)$.

Развитие процесса во времени можно описать с помощью оператора $\hat{V}(t)$, действующего на волновую функцию, заданную в некоторый начальный момент времени

$$\psi(x, t) = \hat{V}(t) \psi(x, 0). \qquad (49{,}1)$$

Здесь за начало отсчета времени мы взяли момент $t = 0$. С равным успехом, конечно, за начало отсчета можно было взять произвольный момент времени $t = t_0$. Подставляя выражение (49,1) в уравнение Шредингера, получаем уравнение для оператора $\hat{V}(t)$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{V}(t)}{\partial t} = \hat{H} \hat{V}(t) \qquad (49{,}2)$$