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

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

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

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

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 $\hat{V}(t)$

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

при условии (см. (49,1)) $\hat{V}(0)=1$. Если оператор $\hat{H}$ не зависит от времени явно, то решение уравнения (49,2) можно формально написать в виде

$$\hat{V}(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \tag{49,3}$$

где экспонента понимается в смысле разложения в степенной ряд.

Оператор $\hat{V}(t)$ является, очевидно, унитарным:

$$\hat{V}^{+}(t)\hat{V}(t)=1.$$

Унитарность оператора $\hat{V}(t)$ имеет простой смысл: она отвечает сохранению во времени условия нормировки волновой функции

$$\int \psi^*(x,\ 0)\psi(x,\ 0)\,dV=\int \psi^*(x,\ t)\psi(x,\ t)\,dV=$$
$$=\int \hat{V}^*\psi^*(x,\ 0)\hat{V}\psi(x,\ 0)\,dV=\int \psi^*(x,\ 0)\hat{V}^{+}\hat{V}\psi(x,\ 0)\,dV.$$

Таким образом, описание эволюции системы во времени сводится к тому, что волновая функция или вектор состояния $\psi(x,\ t)$ изменяется во времени. Это изменение можно характеризовать при помощи унитарного оператора $\hat{V}(t)$, действующего на начальную волновую функцию $\psi(x,\ 0)$ и в каждый данный момент превращающего ее в функцию $\psi(x,\ t)$. При этом операторы, характеризующие систему, например, операторы $\hat{x}$, $\hat{p}$ или любые операторы $\hat{F}(\hat{x},\hat{p})$, не изменяются во времени явно.

Если характеризовать состояние системы с помощью гильбертова пространства, то ход эволюции системы можно описать следующим образом: пусть задана система ортов в пространстве Гильберта. Эта система ортов определяется системой собственных функций операторов, образующих полный набор для данной системы. В начальный момент состояние системы задается вектором состояния $\psi(x,\ 0)$. Эволюция системы во времени отвечает повороту вектора ψ состояния в гильбертовом пространстве. При этом его длина $(\psi,\ \psi)$ имеет постоянное значение. Такое описание системы, при котором волновая функция изменяется во времени, а операторы от времени не зависят, носит название представления Шредингера. Заметим, что слово «представление» имеет при этом более общий смысл, чем тот, который вкладывался в него до сих пор, и характеризует именно способ описания изменения состояния во времени. В частности, можно задать состояние системы в шредингеровском координатном представлении, шредингеровском импульсном представлении, шредингеровском энергетическом представлении и т. д. До сих пор, говоря о задании волновой функции в том или ином представлении, мы имели в виду соответствующее шредингеровское представление. Как сами операторы $\hat{x}$, $\hat{p}$ и вообще $\hat{F}$, так и операторы соответствующих производных по времени $\hat{\dot{x}}$, $\hat{\dot{p}}$ и $\hat{\dot{F}}$, в представлении Шредингера не изменяются во времени (мы предполагаем, что нет нестационарных внешних полей). Действительно, оператор $\hat{\dot{F}}$, например, согласно (31,2) имеет вид

$$\hat{\dot{F}} = [\hat{H}, \hat{F}]$$

и не изменяется во времени, так как не изменяются операторы $\hat{F}$ и $\hat{H}$. Не представляет труда определить и матричные элементы оператора $\hat{\dot{F}}$:

$$(\dot{F})_{mn} = [\hat{H}, \hat{F}]_{mn}. \tag{49,4}$$

В энергетическом представлении (шредингеровском энергетическом), т. е. в таком представлении, в котором диагональна матрица $\hat{H}$, соотношение (49,4) имеет вид

$$(\dot{F})_{mn} = \frac{i}{\hbar}(H_{mm}F_{mn} - F_{mn}H_{nn}) = i\omega_{mn}F_{mn}, \tag{49,5}$$

где

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}(E_m - E_n), \qquad F_{mn} = \int \psi_m^*(x)\hat{F}\psi_n(x)\,dV.$$

Матрица $(\dot{F})_{mn}$, как и матрица (F_{mn}), не зависит явно от времени. Наряду с представлением Шредингера в квантовой механике часто используется другое представление, именуемое представлением Гейзенберга.

В представлении Гейзенберга эволюция системы во времени описывается при помощи операторов, зависящих от времени. При этом сама волновая функция $\Phi(x)$ считается зависящей только от координат, но не зависящей от времени. Наглядно картину эволюции в представлении Гейзенберга можно представить себе как поворот системы базисных векторов в гильбертовом пространстве относительно неподвижного вектора состояния $\Phi(x)$.

Переход к представлению Гейзенберга в общем случае осуществляется с помощью унитарного преобразования

$$\Phi(x) = \hat{V}^{-1}(t)\psi(x, t) = \psi(x, 0). \tag{49,6}$$

где $\Phi(x)$ — волновая функция (вектор состояния) в представлении Гейзенберга.

Пользуясь выражением (49,6) и учитывая, что

$$\hat{V}^{-1}(t) = \hat{V}^{+}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t},$$

получаем

$$\Phi(x)=\psi(x,\ 0)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi(x,\ t). \tag{49,7}$$

В соответствии с общими правилами (46,15) произвольный оператор $\hat{F}$, заданный в шредингеровском представлении, будет иметь в гейзенберговском представлении (обозначим через $\hat{F}_H$) следующий вид:

$$\hat{F}_H=\hat{V}^+(t)\hat{F}\hat{V}(t)$$

или

$$\hat{F}_H=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{F}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}. \tag{49,8}$$

В начальный момент времени выражения как для волновых функций, так и для операторов в обоих представлениях совпадают. Заметим, что оператор $\hat{H}$ в представлении Гейзенберга будет тот же самый, что и в представлении Шредингера $\hat{H}_H=\hat{H}$. Это сразу следует из формулы (49,8), если учесть, что оператор $\hat{H}$ коммутирует со всеми членами ряда разложения функции $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$.

Определим матричные элементы оператора $\hat{F}_H$ с помощью собственных функций оператора $\hat{H}$ (гейзенберговское энергетическое представление).

$$(F_H)_{mn}=\sum_{k,\,l}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)_{mk}F_{kl}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)_{ln}=e^{\frac{i}{\hbar}E_mt}F_{mn}e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}=e^{i\omega_{mn}t}F_{mn}. \tag{49,9}$$

Если оператор $\hat{F}$ является некоторой функцией от $\hat{x}$ и $\hat{p}$, то, как следует из формулы (49,8), мы получим оператор $\hat{F}$ в гейзенберговском представлении, беря в этом представлении операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}$

$$\hat{F}_H=F(\hat{x}_H,\ \hat{p}_H). \tag{49,10}$$

Действительно, если, например, $\hat{F}=\hat{\boldsymbol{p}}^2$, то

$$\hat{F}_H=e^{\frac{1}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\boldsymbol{p}}^2e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\boldsymbol{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\boldsymbol{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=\hat{\boldsymbol{p}}_H^2.$$

Аналогичным образом легко проверить, что

$$\left[\hat{p}_{x_H},\ \hat{x}_H\right]=\left[\hat{p}_x,\ \hat{x}\right]=1. \tag{49,11}$$

Уравнение движения в гейзенберговском представлении получим, дифференцируя (49,8)

$$\frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{F}_H - \hat{F}_H\hat{H}) = [\hat{H}, \hat{F}_H]. \tag{49,12}$$

Если взять матричный элемент от левой и правой части равенства по функциям $\psi_n(x)$, то получим, аналогично (49,5),

$$\left(\frac{\partial F_H}{\partial t}\right)_{mn} = i\omega_{mn}(F_H)_{mn}. \tag{49,13}$$

Конечно, к точно такому же выражению мы придем, если будем исходить из выражения (49,9), а производную от матрицы F_H по времени t определим как такую матрицу, каждый матричный элемент которой равен производной по времени от соответствующего матричного элемента матрицы F_H, т. е

$$\left(\frac{\partial F_H}{\partial t}\right)_{mn} = \frac{\partial (F_H)_{mn}}{\partial t} = i\omega_{mn}(F_H)_{mn}. \tag{49,14}$$

Таким образом, если оператор $\hat{F}_H$ изображает некоторую физическую величину, то оператор $\frac{\partial \hat{F}_H}{\partial t}$ — соответственно ее производную по времени.

Отметим, что уравнения (31,7), (31,8) также могут быть выражены в гейзенберговском представлении. Пользуясь (49,11), (49,12), имеем

$$\frac{\partial \hat{x}_H}{\partial t} = \frac{1}{m}\hat{p}_H; \quad \frac{\partial \hat{p}_H}{\partial t} = -\frac{\partial \hat{U}_H}{\partial x} \tag{49,15}$$

или, в гейзенберговском энергетическом представлении

$$\left(\frac{\partial x_H}{\partial t}\right)_{mn} = \frac{\partial}{\partial t}(x_H)_{mn} = i\omega_{mn}(x_H)_{mn} = \frac{1}{m}(p_H)_{mn}, \tag{49,16}$$

$$\left(\frac{\partial p_H}{\partial t}\right)_{mn} = \frac{\partial}{\partial t}(p_H)_{mn} = i\omega_{mn}(p_H)_{mn} = \left(-\frac{\partial U}{\partial x}\right)_{mn}. \tag{49,17}$$

Матричные соотношения (49,16) и (49,17) по внешнему виду соответствуют классическим законам Ньютона.

Первоначально квантовая механика была сформулирована Гейзенбергом именно как матричная механика. Каждой механической переменной Гейзенберг сопоставлял некоторую матрицу с элементами, гармонически зависящими от времени. Соотношения между матрицами брались в форме классических соотношений, например (49,17).

Представления Шредингера и Гейзенберга не исчерпывают все использующиеся на практике методы описания квантовых систем.

Очень часто в квантовой механике приходится иметь дело с системами, гамильтониан которых может быть разбит на две части: одна из них, $\hat{H}^{(0)}$, представляет собой собственно гамильтониан системы, а другая, $\hat{H}'$, описывает взаимодействие данной системы с внешними полями или другими системами.

В этом случае часто оказывается удобным пользоваться так называемым представлением взаимодействия, введенным Дираком.

Представление взаимодействия является в некотором смысле промежуточным между представлениями Шредингера и Гейзенберга. Именно, определим волновую функцию в представлении взаимодействия соотношением

$$\varphi(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)\psi(x, t). \tag{49,18}$$

Аналогично, произвольный оператор $\hat{F}$ в представлении взаимодействия определим как

$$\hat{F}_{\text{в}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)\hat{F}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right). \tag{49,19}$$

В отличие от (49,7) и (49,8), в формулах преобразования (49,18) и (49,19) входит не полный гамильтониан, но лишь гамильтониан системы без взаимодействия $\hat{H}_0$.

Не представляет труда получить уравнение, которому удовлетворяет функция $\varphi(x, t)$. Для этого продифференцируем соотношение (49,18) по времени и воспользуемся уравнением Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(x, t)}{\partial t} = -\hat{H}_0\varphi(x, t) + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}(\hat{H}_0 + \hat{H}')\psi(x, t) =$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{H}'\psi(x, t) = e^{\frac{1}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{H}'e^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}_0 t}\varphi(x, t) \tag{49,20}$$

или, учитывая (49,19), получим

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}'_{\text{в}}\varphi(x, t), \tag{49,21}$$

т. е. мы получили уравнение Шредингера с гамильтонианом $H'_{\text{в}}$.

Из соотношения (49,21) находим закон изменения во времени оператора, заданного в представлении взаимодействия

$$\frac{\partial\hat{F}_{\text{в}}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0\hat{F}_{\text{в}} - \hat{F}_{\text{в}}\hat{H}_0) = [\hat{H}_0, \hat{F}_{\text{в}}]. \tag{49,22}$$

Заметим, что оператор $\hat{H}_0$ имеет один и тот же вид как в представлении Шредингера, так и в представлении взаимодействия.

Если оператор $\hat{F}$ зависит от $\hat{x}$ и $\hat{p}$, то аналогично (49,10) легко показать, что

$$\hat{F}_{\text{в}} = F(\hat{x}_{\text{в}}, \hat{p}_{\text{в}}). \tag{49,23}$$

Итак, мы видим, что в представлении взаимодействия зависимость от времени волновой функции определяется оператором взаимодействия $\hat{H}'_{\text{в}}$, в то время как зависимость от времени, связанная с оператором $\hat{H}_0$ перенесена непосредственно на операторы.

§ 50. Линейный осциллятор (матричное представление)

В § 10 мы рассмотрели линейный гармонический осциллятор при помощи волнового уравнения Шредингера. Однако первоначально эта задача была исследована матричным методом[1]). Мы приведем здесь это решение. С одной стороны, оно служит хорошей иллюстрацией использования матричных методов, а с другой стороны, ряд полученных выражений понадобится нам в дальнейшем.

Будем исходить из известного выражения для гамильтониана системы

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}. \tag{50,1}$$

Здесь ω — «классическая частота осциллятора». Под операторами $\hat{p}$ и $\hat{x}$ в (50,1) понимаются некоторые матрицы, связь между которыми дается уравнениями (49,15). Задачу решаем в гейзенберговском энергетическом представлении. Тогда в соответствии с (49,9) имеем:

$$(x_H)_{nm} = x_{nm} e^{i\omega_{nm}t}. \tag{50.2}$$

Здесь индексами m, n мы обозначаем уровни энергии исследуемой системы. Как следует из (49,15) и (50,1), оператор $\hat{x}_H$ удовлетворяет следующему уравнению движения:

$$\frac{\partial^2 \hat{x}_H}{\partial t^2} + \omega^2 \hat{x}_H = 0. \tag{50,3}$$

Мы видим, что в гейзенберговском представлении уравнения движения имеют вид обычных уравнений движения классической механики. В последних, однако, классическая координата x заменена квантовомеханическим оператором $\hat{x}_H$. Соответственно для матричных элементов x_{nm} с учетом (50,2) получаем

$$\left(\omega^2 - \omega_{nm}^2\right) x_{nm} = 0. \tag{50,4}$$

[1]) M. Born, W. Heisenberg, P. Iordan, Zeits. f. Physik **35**, 557 (1925).