ГЛАВА VII

ОБЩИЙ ФОРМАЛИЗМ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ
А. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ

§ 1. Принцип суперпозиции и представление динамических состояний векторами

Изложение основ волновой механики в гл. IV и V начиналось с определения плотностей вероятности положения и импульса с помощью волновых функций Ψ и Φ, относящихся, соответственно, к пространству конфигураций и пространству импульсов. Мы уже указывали, что эти функции соответствуют эквивалентным представлениям. Параллелизм здесь может быть доведен до конца. Действительно, основные постулаты, касающиеся средних значений (§ V. 3), могут быть с тем же успехом выражены с помощью операций, производимых в импульсном пространстве. Обобщение (IV. 13) и (IV. 20) средних значений функций вида $F(\boldsymbol{r})$ и $G(\boldsymbol{p})$ может быть проведено, исходя из соответствующих выражений (IV. 21) и (IV. 14), построенных с помощью функций Φ. Вместо постулатов а), б) из § V. 3 можно принять эквивалентные постулаты:

а′) Всякой динамической переменной $\mathscr{A} = A(q_1, \ldots, q_R; p_1, \ldots, p_R)$ сопоставляется линейный оператор

$$A\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_1}, \ldots, i\hbar \frac{\partial}{\partial p_R};\ p_1, \ldots, p_R\right).$$

б′) Среднее значение, принимаемое этой динамической переменной, когда система находится в динамическом состоянии, представляемом функцией $\Phi(p_1, \ldots, p_R)$, дается выражением

$$\langle A\rangle = \frac{\langle\Phi, A\Phi\rangle}{\langle\Phi, \Phi\rangle},$$

где скобки в правой части обозначают скалярные произведения в пространстве импульсов:

$$\langle\Phi, A\Phi\rangle = \int \ldots \int \Phi^*(A\Phi)\, dp_1 \ldots dp_R,$$

$$\langle\Phi, \Phi\rangle = \int \ldots \int \Phi^*\Phi\, dp_1 \ldots dp_R.$$

Эквивалентность постулатов а) и б) и постулатов а′) и б′) основана на свойствах преобразования Фурье (см. Дополнение A). Доказательство не составляет труда и мы не будем проводить его здесь.

Если функции Φ и Ψ дают *эквивалентные представления* одного и того же *динамического состояния*, то наблюдаемые

$$A\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p_1}, \ldots, i\hbar\frac{\partial}{\partial p_R};\ p_1, \ldots, p_R\right)$$

и

$$A\left(q_1, \ldots, q_R;\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_1}, \ldots, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_R}\right)$$

дают *эквивалентные представления* одной и той же *динамической переменной* (см. гл. IV и замечание в конце § 5). Вся теория наблюдаемых может быть с равным успехом развита как в одном, так и в другом из этих представлений. Таким образом, мы получаем две вполне эквивалентные формулировки квантовой теории.

Все это становится очевидным, если принять, что волновые функции Φ и Ψ представляют один и тот же вектор в пространстве с бесконечным числом измерений. Тогда все понятия, введенные в гл. V: функциональное пространство, скалярное произведение, норма, ортогональность и т. д., получают простое геометрическое истолкование. Согласно этой картине значения, принимаемые функцией $\Psi(q_1, \ldots, q_R)$ в каждой точке конфигурационного пространства, являются составляющими данного вектора по некоторой системе ортогональных осей координат. Аналогично значения, принимаемые функцией $\Phi(p_1, \ldots, p_R)$ в каждой точке импульсного пространства, являются составляющими указанного вектора по другой системе ортогональных осей координат. Что же касается коэффициентов $c_p^{(r)}$ разложения (V. 14) функции Ψ в ряд по собственным функциям некоторой заданной полной ортонормированной системы, то они являются составляющими указанного вектора по некоторой третьей системе координат и т. д.

Таким образом, можно построить всю квантовую теорию, исходя непосредственно из понятия вектора без ссылок на конкретное представление. В качестве основного принципа теории принимается *принцип суперпозиции динамических состояний*, согласно которому возможные динамические состояния квантовой системы должны обладать свойством, характерным в общем случае для всяких волн, а именно, допускать линейное сложение, и поэтому могут быть представлены как векторы в некотором линейном пространстве. Следовательно, каждому динамическому состоянию сопоставляется некоторый вектор в абстрактном пространстве, а каждой динамической переменной сопоставляется линейный оператор, действующий в этом пространстве. При таком подходе теория оказывается формально проще и элегантнее волновой механики; она к тому же имеет и более широкую область применения, так как может быть использована для изучения квантовых систем, не имеющих классических аналогов.

В изложении этой общей формулировки квантовой теории мы будем следовать Дираку, используя введенные им чрезвычайно удобные обозначения[1]). Содержание данной главы посвящено понятиям линейной алгебры[2]), которые составляют математический аппарат теории. Описание физических явлений с помощью этого формализма и будет предметом гл. VIII.

Раздел I. ВЕКТОРЫ И ОПЕРАТОРЫ

§ 2. Векторное пространство. Кет-векторы

Согласно идеям предшествующего параграфа, каждому динамическому состоянию мы сопоставляем вектор, который, согласно Дираку, будем называть *кет-вектором* или просто *кет* и обозначать символом $|\rangle$. Чтобы отличать кет-векторы один от другого, мы снабдим каждый символ либо некоторой буквой, либо одним или несколькими индексами, могущими принимать как дискретные, так и непрерывно изменяющиеся значения в зависимости от конкретной ситуации. Так, кет u представляется символом $|u\rangle$.

Кет-векторы образуют линейное векторное пространство: всякая линейная комбинация нескольких кет-векторов также является кет-вектором. Пусть, например, заданы два кет-вектора $|1\rangle$ и $|2\rangle$ и два произвольных комплексных числа λ_1, λ_2, тогда линейная комбинация

$$|v\rangle = \lambda_1 |1\rangle + \lambda_2 |2\rangle \tag{1}$$

есть вектор в пространстве кет-векторов.

Аналогично, если $|\xi\rangle$ зависит от непрерывно изменяющегося индекса ξ, а $\lambda(\xi)$ — некоторая комплекснозначная функция ξ, то интеграл

$$|w\rangle = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda(\xi)\,|\xi\rangle\,d\xi \tag{2}$$

есть вектор в пространстве кет-векторов. Мы также будем говорить, что $|w\rangle$ есть линейная комбинация (или линейная суперпозиция) кет-векторов $|\xi\rangle$.

---

[1]) *P. A. M. Dirac, loc. cit.*, сноска II [8].

[2]) Строгое и полное изложение всех этих вопросов можно найти в книгах *A. Lichnerowicz* и *M. H. Stone, loc. cit.*, сноска V [3].