наблюдаемой. Легко показать, что если каждый общий собственный вектор наблюдаемых A и B есть собственный вектор линейного оператора F, то последний есть некоторая операторная функция A и B.

Все это без труда обобщается на случай любого числа коммутирующих между собой наблюдаемых.

Наконец, говорят, что последовательность A, B, C, ... наблюдаемых составляет *полный набор коммутирующих наблюдаемых*, если эти наблюдаемые все коммутируют между собой и если их общая базисная система определяется единственным образом. Каждому множеству собственных значений a, b, c, ... соответствует один и только один общий собственный вектор (определенный с точностью до постоянного множителя). Этот вектор может рассматриваться как функция собственных значений a, b, c, ... Его обычно обозначают символом $|abc\ldots\rangle$.

Раздел III. ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

§ 16. Общее понятие о конечных матрицах

По определению матрица A типа $M \times N$ есть совокупность MN элементов A_{mn} $(m = 1, 2, \ldots, M;\ n = 1, 2, \ldots, N)$, которые обычно располагают в виде прямоугольной таблицы с M строками и N столбцами

$$(A) \equiv \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & \cdots & & \\ \vdots & & & \\ A_{M1} & \cdots & & A_{MN} \end{pmatrix};$$

A_{mn} есть элемент матрицы, расположенный на пересечении m-й строки и n-го столбца.

Если $M = N$, то мы имеем *квадратную матрицу*, число ее строк и столбцов дает число измерений, или порядок матрицы. Если одно из двух целых чисел M или N равно 1, то элементы матрицы могут рассматриваться как компоненты вектора. Мы будем называть *правым вектором* матрицу с одним столбцом (M = размерности вектора, $N = 1$) и *левым вектором* — матрицу с одной строкой ($M = 1$, N = размерности вектора). Тогда *скаляр* есть матрица с $M = N = 1$.

Из матрицы A типа $M \times N$ можно получить новые матрицы с помощью некоторых *операций сопряжения*, именно:

а) *комплексно сопряженную матрицу* A^* — это матрица типа $M \times N$, элементы которой суть величины, комплексно сопряженные элементам матрицы A: $(A^*)_{kl} = A^*_{kl}$;

б) *транспонированную матрицу* $\tilde{A}$ — это матрица типа $N \times M$, получаемая перестановкой строк и столбцов: $(\tilde{A})_{kl} = A_{lk}$;

в) *эрмитово сопряженную матрицу* $A^{\dagger}$ — это матрица типа $N \times M$, получаемая применением обеих указанных выше операций: $(A^{\dagger})_{kl} = A^{*}_{lk}$.

Комплексно сопряженный правый вектор есть правый вектор. Транспонированный правый вектор и эрмитово сопряженный правый вектор суть левые векторы и наоборот. Комплексно сопряженная, транспонированная и эрмитово сопряженная квадратные матрицы порядка N суть квадратные матрицы порядка N.

Определяют следующие *операции матричной алгебры*:

а) *умножение матрицы* A *на постоянную* c; произведение cA есть матрица того же типа, что и A:

$$(cA)_{mn} = cA_{mn};$$

б) *сумма* $S = A + B$ двух матриц одного типа; S есть матрица того же типа, что A и B:

$$S_{mn} = A_{mn} + B_{mn};$$

в) *произведение* (справа) $P = AB$ матрицы B типа $M_B \times N_B$ на матрицу A типа $M_A \times N_A$, причем число столбцов матрицы A должно быть равно числу строк матрицы B: $N_A = M_B = K$. Это матрица типа $M_A \times N_B$, элементы которой даются формулой

$$P_{mn} = \sum_{k=1}^{K} A_{mk} B_{kn}.$$

Имеют место следующие равенства

$$(A + B)^{*} = A^{*} + B^{*}, \quad (\widetilde{A + B}) = \tilde{A} + \tilde{B}, \quad (A + B)^{\dagger} = A^{\dagger} + B^{\dagger}.$$
$$(AB)^{*} = A^{*}B^{*}, \qquad (\widetilde{AB}) = \tilde{B}\tilde{A}, \qquad (AB)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger}.$$

Отметим изменение порядка сомножителей в правых частях двух последних равенств.

Умножение слева N-мерного левого вектора на N-мерный правый вектор дает скаляр. Умножение слева N-мерного правого вектора на N-мерный левый вектор дает квадратную матрицу порядка N.

Другой важной операцией является *тензорное произведение* двух матриц. С помощью матрицы $A^{(1)}$ типа $M_1 \times N_1$ и матрицы $A^{(2)}$ типа $M_2 \times N_2$ можно образовать матрицу $A^{(12)} \equiv A^{(1)} \otimes A^{(2)}$ типа $M_1M_2 \times N_1N_2$. M_1M_2 строк этой матрицы обозначаются двумя индексами m_1 и m_2 ($m_1 = 1, 2, \ldots, M_1$, $m_2 = 1, 2, \ldots, M_2$), N_1N_2 столбцов матрицы обозначаются двумя индексами n_1 и n_2 ($n = 1, 2, \ldots, N_1$, $n_2 = 1, 2, \ldots, N_2$). При этом

$$A^{(12)}_{m_1m_2;\, n_1n_2} = A^{(1)}_{m_1n_1} A^{(2)}_{m_2n_2}.$$

§ 17. Квадратные матрицы

В этом параграфе мы дадим несколько определений и перечислим ряд свойств квадратных матриц.

В квадратной матрице A порядка N мы различаем N диагональных элементов A_{nn} ($n = 1, 2, \ldots, N$) и недиагональные элементы A_{kl} ($k \neq l$). *Шпур* (или *след*) матрицы A есть сумма ее диагональных элементов:

$$\operatorname{Sp} A \equiv \operatorname{Tr} A \equiv \sum_n A_{nn}. \tag{60}$$

Детерминант или *определитель* матрицы A, $\det A$, есть детерминант, образованный таблицей ее элементов.

Единичная матрица I есть матрица, все диагональные элементы которой равны 1, а все недиагональные элементы равны нулю

$$I_{mn} = \delta_{mn}.$$

Произведение единичной матрицы на постоянную есть, по определению, *постоянная матрица*. *Диагональная матрица* есть матрица, все недиагональные элементы которой равны нулю.

Квадратная матрица является вещественной, симметричной или эрмитовой, если она равна своей комплексно сопряженной, своей транспонированной или своей эрмитово сопряженной, соответственно.

Сумма и произведение двух матриц порядка N всегда определены — это также матрицы порядка N. Сумма ассоциативна и коммутативна. Произведение ассоциативно, дистрибутивно по отношению к сумме, но не обязательно коммутативно. Алгебра матриц порядка N есть *некоммутативная алгебра*.

Чтобы матрица порядка N коммутировала со всеми матрицами порядка N необходимо и достаточно, чтобы она была постоянной (пропорциональной единичной) (задача 4). В частности, единичная матрица I такова, что

$$IA = AI = A \tag{61}$$

при любой матрице A.

Две диагональные матрицы всегда коммутируют. Чтобы матрица порядка N коммутировала со всеми диагональными матрицами порядка N необходимо и достаточно, чтобы она была диагональной (задача 4).

Шпур (или *след*) произведения ряда матриц *инвариантен относительно циклической перестановки сомножителей*

$$\operatorname{Sp} ABC = \operatorname{Sp} CAB. \tag{62}$$

Детерминант произведения матриц равен произведению детерминантов этих матриц

$$\det ABC = \det A \cdot \det B \cdot \det C. \tag{63}$$

Матрица B, по определению, является обратной к матрице A, если

$$AB = I \quad \text{и} \quad BA = I. \tag{64}$$

Впрочем, если выполняется одно из этих равенств, то другое выполняется также. Обратную матрицу обычно обозначают символом

$$B = A^{-1}.$$

Чтобы данная матрица A имела обратную необходимо и достаточно, чтобы детерминант матрицы был отличен от нуля: $\det A \neq 0$. Если $\det A = 0$, то матрица называется *сингулярной*.

Нетрудно проверить, что

$$(\tilde{A})^{-1} = (\widetilde{A^{-1}}), \quad (A^*)^{-1} = (A^{-1})^*, \quad (A^\dagger)^{-1} = (A^{-1})^\dagger$$

и что

$$(PQ)^{-1} = Q^{-1}P^{-1}.$$

Матрица O называется *ортогональной*, если транспонированная матрица $\tilde{O}$ равна обратной

$$O\tilde{O} = \tilde{O}O = I.$$

Матрица U называется *унитарной*, если эрмитово сопряженная матрица $U^\dagger$ равна обратной

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I.$$

Если мы умножим слева матрицу размерности N на правый N-мерный вектор, то получим правый N-мерный вектор. Если умножить справа матрицу размерности N на левый N-мерный вектор, то получим левый N-мерный вектор.

Особенно просто действие диагональной матрицы. Пусть

$$D_{mn} = d_m \delta_{mn}$$

суть элементы такой матрицы, а u_n — компоненты правого вектора u, тогда

$$(Du)_n = d_n u_n.$$

Аналогично, если v_n — компоненты левого вектора v, то

$$(vD)_n = v_n d_n.$$

Если матрица сингулярна, то существует по крайней мере один правый вектор u такой, что $Au = 0$, и обратно. Из этого факта вытекает важная теорема:

Пусть A и B две матрицы порядка N. Для того, чтобы существовал правый N-мерный вектор u, удовлетворяющий уравнению

$$Au = \lambda Bu,$$

необходимо и достаточно, чтобы постоянная λ являлась решением уравнения

$$\det(A - \lambda B) = 0.$$

В частности, если A есть матрица порядка N, то для того, чтобы существовал правый вектор u, удовлетворяющий уравнению

$$Au = \lambda u,$$

необходимо и достаточно, чтобы постоянная λ являлась решением уравнения

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

Это алгебраическое уравнение порядка, не превосходящего N называется *секулярным уравнением.*

Аналогичные результаты имеют место для левых векторов.

Тензорное произведение двух матриц порядка N_1 и N_2 есть матрица порядка N_1N_2. В частности, тензорное произведение единичных матриц $I^{(1)}$, $I^{(2)}$ также представляет собой единичную матрицу $I^{(12)}$ размерности N_1N_2.

В качестве примера рассмотрим матрицы порядка 4, получающиеся в результате тензорного умножения матриц порядка 2 на матрицы порядка 2. В теории часто используются следующие матрицы второго порядка (матрицы Паули):

$$1^{(\sigma)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{65}$$

Всякая матрица второго порядка может быть представлена как линейная комбинация этих четырех эрмитовых матриц. Рассмотрим теперь матрицы Паули в другом двумерном пространстве:

$$1^{(\rho)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{66}$$

Производя тензорное умножение матрицы типа (σ) на матрицу типа (ρ), мы получим матрицу типа (4×4). Дадим явное выражение нескольких матриц типа ($\rho\sigma$):

$$\rho_1 \otimes \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{Vmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix},$$

$$\rho_1 \otimes \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{Vmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix},$$

$$\rho_3 \otimes 1^{(\sigma)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}.$$

Полученные матрицы можно рассматривать как матрицы, принадлежащие одному из пространств, скажем пространству (ρ), но тогда каждый элемент матрицы есть матрица из другого пространства: это выражено в средних частях равенств. Правые части равенства представляют матрицы в явном виде; если условиться отмечать строки (и столбцы) двумя индексами $m_\rho m_\sigma$, причем первый относится к составляющим пространства ρ, а второй — к составляющим пространства (σ), то строки (и столбцы) располагаются в порядке: 11, 12, 21, 22.

Линейно комбинируя тензорные произведения матриц, получают квадратные матрицы с двойными индексами $A_{m_1 m_2;\ n_1 n_2}$ ($m_1, n_1 = 1, 2, \ldots, N_1$; $m_2, n_2 = 1, 2, \ldots, N_2$), размерности $N_1 N_2$. Как показывает рассмотренный пример, можно считать их матрицами типа (1), элементы которых суть матрицы типа (2). Суммируя диагональные элементы такой матрицы, получаем матрицу типа (2) в обычном смысле; по определению это частичный шпур в пространстве (1) исходной матрицы:

$$(\mathrm{Sp}_1 A)_{m_2 n_2} \equiv \sum_{n=1}^{N_1} A_{nm_2;\ nn_2}. \tag{67}$$

Аналогично можно определить частичный шпур в пространстве (2). Очевидно, что

$$\mathrm{Sp}\, A = \mathrm{Sp}_2 (\mathrm{Sp}_1 A) = \mathrm{Sp}_1 (\mathrm{Sp}_2 A), \tag{68}$$

и если матрица A есть тензорное произведение $A^{(1)} \otimes A^{(2)}$, то

$$\mathrm{Sp}\,(A^{(1)} \otimes A^{(2)}) = (\mathrm{Sp}_1 A^{(1)})\,(\mathrm{Sp}_2 A^{(2)}). \tag{69}$$

§ 18. Бесконечные матрицы

Большую часть результатов, относящихся к конечным матрицам, можно распространить и на бесконечные матрицы. В этом случае также строки и столбцы нумеруются одним или несколькими индексами, но эти индексы могут составлять бесконечное счетное множество или даже континуальное множество значений в некоторой области. Бесконечная матрица является квадратной, если ее строки и столбцы отмечаются одной системой индексов. При наличии только одного столбца мы имеем правый вектор, при наличии только одной строки — левый вектор.

Операции комплексного сопряжения, транспонирования и эрмитового сопряжения без изменений переносятся на случай бесконечных матриц. То же самое можно сказать относительно умножения на постоянную и операции суммирования. Что же касается умножения A на B, то подразумевается, естественно, что строки B и столбцы A отмечаются одной системой индексов. Если, кроме того, некоторые индексы являются непрерывными, суммирование должно быть заменено интегрированием. Предположим, например, что A и B являются квадратными матрицами, элементы которых зависят от некоторого непрерывного индекса q, изменяющегося в интервале (q_1, q_2). Тогда элемент матрицы $P = AB$ выражается формулой

$$P(q;\ q') = \int_{q_1}^{q_2} A(q;\ q'')\, B(q'';\ q')\, dq''.$$

Произведение определено, конечно, только в том случае, если суммы и интегралы, входящие в формулу, сходятся.

Если отвлечься от проблем сходимости, то все результаты § 17, относящиеся к квадратным матрицам, переносятся без изменения на случай бесконечных матриц, за исключением понятия детерминанта. Следует уточнить только определение диагональной матрицы в случае непрерывно изменяющихся индексов и условия существования обратной матрицы.

По определению непрерывная матрица $D(q;\ q')$ диагональна, если она имеет форму

$$D(q;\ q') = d(q)\,\delta(q - q'), \tag{70}$$

где $d(q)$ есть произвольная функция индекса q. При этом оказываются справедливыми два основных характерных свойства диагональных матриц: их свойство коммутировать друг с другом и то свойство, что действие диагональной матрицы на вектор состоит в умножении каждой компоненты вектора на соответствующий диагональный элемент матрицы. Так, при действии диагональной матрицы (70) на правый вектор g с компонентами $g(q)$ получается вектор $h = Dg$ с компонентами

$$h(q) = \int D(q; q')\, g(q')\, dq' = d(q)\, g(q).$$

Заметим, что непрерывная матрица $\delta'(q - q')$ не является диагональной.

Что же касается *существования* матрицы, *обратной* к данной, то, в противоположность случаю конечных матриц, выполнение условия

$$AB = I \tag{71а}$$

не влечет за собой, вообще говоря, выполнения равенства

$$BA = I. \tag{71б}$$

Для утверждения, что матрицы A и B обратны друг другу, требуется одновременное выполнение равенств (71а, б).

Для того чтобы матрица A имела обратную, вовсе не обязательно, чтобы она была квадратной. Например, возможен случай, когда строки матрицы A нумеруются дискретным индексом, а столбцы — непрерывным, и тем не менее она имеет обратную матрицу; в этом случае обратная матрица A^{-1} будет иметь дискретным индекс столбца и непрерывным — индекс строки. В частном случае унитарной матрицы U, которая, по определению, удовлетворяет двум уравнениям

$$UU^{\dagger} = I, \quad U^{\dagger}U = I, \tag{72}$$

индексы строк и столбцов не обязательно имеют одинаковую природу. Однако единичные матрицы, стоящие в правых частях этих равенств, необходимо являются квадратными матрицами. Если матрица U не квадратна, то системы индексов единичных матриц в правых частях (72) различны.

§ 19. Представление векторов и операторов матрицами

Рассмотрим векторное пространство $\mathscr{E}$ и выберем в этом пространстве полную ортонормированную систему векторов; эта система может, вообще говоря, состоять из собственных векторов полного набора коммутирующих наблюдаемых. Для краткости будем использовать в рассуждениях базисную систему с дискретным индексом n. Предположим, например, что мы имеем дело с собственными векторами некоторой наблюдаемой Q

$$Q\,|n\rangle = q_n\,|n\rangle.$$

Будем говорить, что это базисные векторы в представлении $\{Q\}$.

Эти векторы образуют полную ортонормированную систему:

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn}, \tag{73}$$

$$P_Q \equiv \sum_n | n \rangle \langle n | = 1. \tag{74}$$

Уравнения (73) и (74) являются основными уравнениями представления $\{Q\}$.

Для всякого кет-вектора $|u\rangle$ имеем

$$| u \rangle = P_Q | u \rangle = \sum_n | n \rangle \langle n | u \rangle.$$

Величины $u_n = \langle n | u \rangle$ можно рассматривать как элементы матрицы с одним столбцом, причем n есть индекс, нумерующий строки. Задание этого правого вектора полностью определяет кет-вектор $|u\rangle$: это матрица, представляющая $|u\rangle$ в представлении $\{Q\}$.

Для всякого бра-вектора $\langle v|$ имеем

$$\langle v | = \langle v | P_Q = \sum_n \langle v | n \rangle \langle n |.$$

Величины $\langle v | n \rangle$ являются комплексно сопряженными по отношению к компонентам v_n правого вектора, представляющего кет-вектор $|v\rangle$ в представлении $\{Q\}$. Они могут рассматриваться также как компоненты левого вектора; задание этого левого вектора полностью определяет бра-вектор $\langle v|$: это вектор, представляющий $\langle v|$ в представлении $\{Q\}$. Таким образом, бра-вектор, сопряженный данному кет-вектору, представляется вектором, эрмитово сопряженным вектору, представляющему кет-вектор.

Всякий линейный оператор A может быть единственным образом представлен в виде двойного ряда по базисным операторам $|m\rangle\langle n|$:

$$A = P_Q A P_Q = \sum_{m,\, n} | m \rangle \langle m | A | n \rangle \langle n |.$$

Коэффициенты разложения $A_{mn} = \langle m | A | n \rangle$ полностью определяют A и могут рассматриваться как элементы квадратной матрицы, причем m есть индекс строки, а n — индекс столбца: это матрица, представляющая оператор A в представлении $\{Q\}$.

Установив таким образом взаимооднозначное соответствие между векторами и операторами, с одной стороны, и матрицами — с другой стороны, выясним теперь, каким образом каждая операция с операторами и векторами в пространстве $\mathscr{E}$ переводится на язык представляющих их матриц.

Соотношениям сопряжения между векторами и операторами соответствуют соотношения эрмитового сопряжения между мат-

рицами. Мы это уже отмечали на примере сопряжения между бра- и кет-векторами. Подобно этому матрицы, представляющие два эрмитово сопряженных оператора A и $A^\dagger$, сами эрмитово сопряжены: их элементы удовлетворяют соотношениям

$$A^\dagger_{mn} \equiv \langle m \mid A^\dagger \mid n \rangle = \langle n \mid A \mid m \rangle^* = A^*_{nm}.$$

Что же касается различных алгебраических операций с векторами и операторами, то им соответствуют различные операции матричной алгебры. Чтобы убедиться в этом, следует рассмотреть каждую из элементарных операций, упомянутых в двух предшествующих параграфах.

Наиболее просто дело обстоит в случае умножения на постоянную и операции суммирования; так, всякой линейной комбинации $\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2$ двух операторов соответствует та же линейная комбинация двух представляющих матриц:

$$\langle m \mid (\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2) \mid n \rangle = \lambda_1 \langle m \mid A_1 \mid n \rangle + \lambda_2 \langle m \mid A_2 \mid n \rangle.$$

Различные произведения векторов и операторов представляются произведениями соответствующих матриц. Именно:

а) скалярное произведение $|u\rangle$ на $|v\rangle$:

$$\langle v \mid u \rangle = \langle v \mid P_Q \mid u \rangle = \sum_n \langle v \mid n \rangle \langle n \mid u \rangle = \sum_n v_n^* u_n;$$

таким образом, $\langle v|u\rangle$ равно произведению (справа) матрицы (правого вектора), представляющей $|u\rangle$, на матрицу, эрмитово сопряженную матрице, представляющей $|v\rangle$;

б) действие оператора A на кет-вектор $|u\rangle$ или бра-вектор $\langle v|$:

$$\langle n \mid A \mid u \rangle = \langle n \mid A P_Q \mid u \rangle = \sum_k \langle n \mid A \mid k \rangle \langle k \mid u \rangle,$$

$$\langle v \mid A \mid n \rangle = \langle v \mid P_Q A \mid n \rangle = \sum_l \langle v \mid l \rangle \langle l \mid A \mid n \rangle,$$

Матрица (правый вектор), представляющая $A|u\rangle$, есть произведение (справа) матрицы, представляющей $|u\rangle$, на матрицу, представляющую A. Матрица (левый вектор), представляющая $\langle v|A$, есть произведение (слева) матрицы, представляющей $\langle v|$, на матрицу, представляющую A;

в) произведение AB:

$$\langle m \mid AB \mid n \rangle = \langle m \mid A P_Q B \mid n \rangle = \sum_k \langle m \mid A \mid k \rangle \langle k \mid B \mid n \rangle;$$

матрица, представляющая AB, выражается в виде произведения (справа) матрицы, представляющей B, на матрицу, представляющую A;

г) оператор $|u\rangle\langle v|$: (m, n) — элемент матрицы, представляющей этот оператор, есть $\langle m|u\rangle\langle v|n\rangle$; искомая матрица, следовательно, получается при умножении (справа) матрицы (левый вектор), представляющей $\langle v|$, на матрицу (правый вектор), представляющую $|u\rangle$ (это дает квадратную матрицу).

Таким образом, определено представление векторов и операторов из пространства $\mathscr{E}$ матрицами, причем установлены простые правила соответствия между различными действиями с векторами и операторами и действиями с матрицами. Любую геометрическую задачу в пространстве $\mathscr{E}$ можно решать либо чисто геометрическими методами, рассматривая векторы и операторы, о которых идет речь, либо методами алгебры и анализа, оперируя с матрицами в подходящем представлении.

В последнем случае соответствующий выбор представления может привести к упрощению задачи, подобно тому как подходящий выбор системы координат позволяет упростить решение задачи в аналитической геометрии. На практике следует выбирать представление, в котором данные векторы и операторы представляются матрицами наиболее простой формы.

Заметим в этой связи, что в представлении $\{Q\}$ наиболее простой вид имеет наблюдаемая Q: она представляется диагональной матрицей. Вообще всякая функция $f(Q)$ в этом представлении выражается диагональной матрицей

$$\langle m \,|\, f(Q) \,|\, n\rangle = f(q_n)\, \delta_{mn}.$$

Операторы, коммутирующие с Q, также представляются простыми матрицами. Действительно, если $[X, Q] = 0$, то

$$(q_n - q_m)\langle m \,|\, X \,|\, n\rangle = 0$$

и поэтому $\langle m|X|n\rangle = 0$ для всякой пары индексов (m, n) таких, что $q_m \neq q_n$. Иными словами, все элементы матрицы, индекс строки и индекс столбца которых относятся к различным собственным значениям Q, равны нулю (ср. § 15).

Все результаты без труда распространяются на всякое пространство $\mathscr{E}_1 \otimes \mathscr{E}_2$, получающееся путем тензорного умножения пространств $\mathscr{E}_1$ и $\mathscr{E}_2$. Векторы и операторы, образованные тензорным умножением, могут быть представлены матрицами, которые являются тензорными произведениями матриц, представляющих векторы и операторы пространств $\mathscr{E}_1$ и $\mathscr{E}_2$.

§ 20. Преобразования матриц

Рассмотрим вновь матрицы конечного порядка. Будем обозначать прописной буквой квадратные матрицы порядка N, а строчной буквой — N-мерные векторы (правые и левые). Пусть T — несингулярная матрица (T^{-1} существует). Эта матрица позволяет определить преобразование подобия матрицы A по формуле

$$A' = TAT^{-1}. \tag{75}$$

Соответствие между A и A' взаимооднозначно; матрица A получается из A' в результате обратного преобразования

$$A = T^{-1}A'T. \tag{76}$$

Такое преобразование сохраняет след (шпур) и детерминант матрицы

$$\operatorname{Sp} A = \operatorname{Sp} A', \quad \det A = \det A' \tag{77}$$

(это следует непосредственно из указанных выше свойств шпура и детерминанта произведения матриц). Равным образом очевидно, что такое преобразование сохраняет всякое алгебраическое соотношение между матрицами. Если, например, мы имеем

$$A = \lambda BC + \mu DEF,$$

то умножая почленно слева на T и справа на T^{-1} и вставляя там, где это нужно, произведение $T^{-1}T$, получим

$$TAT^{-1} = \lambda TBT^{-1}TCT^{-1} + \mu TDT^{-1}TET^{-1}TFT^{-1},$$

т. е.

$$A' = \lambda B'C' + \mu D'E'F'.$$

Аналогично можно определить преобразование правого вектора u

$$u' = Tu, \quad u = T^{-1}u' \tag{78}$$

и левого вектора v

$$v' = vT^{-1}, \quad v = v'T. \tag{79}$$

Нетрудно проверить, что указанное преобразование в самом общем случае *сохраняет все алгебраические уравнения*, в которые входят квадратные матрицы и векторы обоих типов. Заметим также, что если c — произвольная постоянная, то квадратная матрица преобразуется с помощью T и cT одинаково; правый вектор при этом умножается на c, а левый — на $1/c$.

В то же время это преобразование в общем случае не сохраняет соотношений сопряженности между матрицами (задача 5). Посмотрим, например, какому условию должна удовлетворять матрица T, чтобы преобразование сохраняло эрмитовую сопряженность. Чтобы из $A' = TAT^{-1}$ следовало

$$A'^{\dagger} = TA^{\dagger}T^{-1},$$

какой бы ни была матрица A, необходимо, чтобы

$$TAT^{-1} = \left(TA^{\dagger}T^{-1}\right)^{\dagger} = \left(T^{-1}\right)^{\dagger} AT^{\dagger},$$

или, если умножить равенство слева на $T^{\dagger}$ и справа на T,

$$T^{\dagger}TA = AT^{\dagger}T.$$

Необходимо, следовательно, чтобы матрица $T^{\dagger}T$ коммутировала со всеми матрицами A, т. е. чтобы она была единичной с точностью до постоянного множителя

$$T^{\dagger}T = cI.$$

Далее, для того чтобы из $u' = Tu$ следовало $u'^{\dagger} = u^{\dagger}T^{-1}$ при любом u необходимо, чтобы $u = T^{\dagger}Tu$ при любом u, т. е. $c = 1$. Это значит, что матрица T должна быть унитарной. Очевидно, что это условие, необходимое для сохранения условия эрмитовой сопряженности, является также и достаточным.

Преобразование, матрица которого является унитарной, называется *унитарным преобразованием*. Поскольку в этом случае $U^{-1} = U^{\dagger}$ преобразования матрицы A, правого вектора u и левого вектора v выражаются формулами:

$$\begin{aligned} A' &= UAU^{\dagger}, & A &= U^{\dagger}A'U, \\ u' &= Uu, & u &= U^{\dagger}u', \\ v' &= vU^{\dagger}, & v &= v'U. \end{aligned} \tag{80}$$

Как и всякое преобразование подобия, *унитарное преобразование сохраняет след и детерминант матриц и все алгебраические уравнения между матрицами и векторами. Но, кроме этого, оно сохраняет и эрмитово сопряжение.*

Далее, имеют место две следующие фундаментальные теоремы, которые мы приведем без доказательства.

А) *Всякая эрмитова матрица H может быть приведена к диагональному виду с помощью унитарного преобразования*

$$H' = UHU^{\dagger}, \quad H' \text{ — диагональная.}$$

Диагональные элементы H' суть «собственные значения» H. Все они вещественны (H' — эрмитова матрица) и являются решениями секулярного уравнения

$$\det(H - xI) = 0.$$

Б) *Чтобы две эрмитовы матрицы H, K могли быть одновременно приведены к диагональному виду с помощью одного унитарного преобразования необходимо и достаточно, чтобы они коммутировали.*

Все эти определения и свойства, относящиеся к матрицам конечного порядка, без труда распространяются на случай бесконечных матриц. Всякая бесконечная матрица T, обладающая обратной матрицей T^{-1}, определяет преобразование подобия квадратных матриц и векторов (правых и левых) при выполнении условий сходимости соответствующих сумм и интегралов. В противоположность случаю конечных матриц нет необходимости, чтобы T была обязательно квадратной матрицей. Конечно, строки и столбцы матрицы (квадратной), подвергающейся преобразованию, должны нумероваться той же системой индексов, что и столбцы T, а также компоненты правых и левых векторов. Но строки и столбцы преобразованной матрицы и компоненты преобразованных векторов нумеруются той системой индексов, которой нумеруются строки T.

Свойства сохранения следа (при условии его сходимости), алгебраических уравнений и эрмитового сопряжения (для унитарных матриц преобразования) справедливы и для бесконечных матриц. Что же касается фундаментальных теорем о диагонализации эрмитовых матриц унитарным преобразованием, то они не справедливы для всех эрмитовых матриц, но мы будем предполагать, что они выполняются в рассматриваемых нами случаях.

§ 21. Смена представления

Вернемся к проблеме матричного представления операторов и векторов векторного пространства $\mathscr{E}$. Каждой базисной системе векторов в этом пространстве соответствует некоторое представление. Следует научиться переходить от одного такого представления к другому. Имеются в виду, конечно, различные представления одного и того же вектора или оператора. Мы увидим, что переход от одного представления к другому совершается с помощью унитарного преобразования.

Возьмем для определенности две базисные системы: одну, образованную собственными векторами $|n\rangle$ ($n = 1, 2, \ldots, \infty$) наблюдаемой Q из § 19, и вторую, образованную собственными векторами $|\xi\rangle$ другой наблюдаемой Ξ, спектр которой будем предполагать непрерывным. Две эти системы определяют представления $\{Q\}$ и $\{\Xi\}$. Основные уравнения представления $\{Q\}$ уже были выписаны ранее (уравнения (73) и (74)). Аналогичные уравнения для представления $\{\Xi\}$ записываются в форме

$$\langle\xi\,|\,\xi'\rangle = \delta(\xi - \xi'), \tag{81}$$

$$P_\Xi \equiv \int |\,\xi\rangle\, d\xi\, \langle\xi\,| = 1. \tag{82}$$

Базисные векторы одного представления могут быть разложены по базисным векторам другого представления в виде

$$|\,n\rangle = \int |\,\xi\rangle\, d\xi\, \langle\xi\,|\,n\rangle, \quad |\,\xi\rangle = \sum_n |\,n\rangle\langle n\,|\,\xi\rangle. \tag{83}$$

Скалярное произведение $\langle \xi | n \rangle$, фигурирующее в качестве коэффициента разложения $|n\rangle$, может рассматриваться как элемент $S(\xi; n)$ матрицы S, причем ξ есть индекс строки, а n — индекс столбца; скалярное произведение $\langle n | \xi \rangle$ во втором разложении может рассматриваться как элемент $T(n; \xi)$ матрицы T, причем n есть индекс строки, а ξ — индекс столбца. Впрочем, поскольку $\langle \xi | n \rangle = \langle n | \xi \rangle^*$, имеем

$$T = S^\dagger.$$

Кроме того,

$$\sum_n \langle \xi | n \rangle \langle n | \xi' \rangle = \langle \xi | \xi' \rangle = \delta(\xi - \xi'),$$

$$\int \langle n | \xi \rangle \, d\xi \, \langle \xi | n' \rangle = \langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}.$$

Иначе говоря,

$$SS^\dagger = I, \tag{84а}$$

$$TT^\dagger \equiv S^\dagger S = I, \tag{84б}$$

матрица S унитарна.

Удобно обозначить символом $(u)_Q$ правый вектор с компонентами $\langle 1 | u \rangle$, $\langle 2 | u \rangle$, ..., представляющий кет-вектор $|u\rangle$ в представлении $\{Q\}$, и символом $(u)_\Xi$ правый вектор с компонентами $\langle \xi | u \rangle$, представляющий тот же вектор $|u\rangle$ в представлении $\{\Xi\}$. Применяя соотношение (74), имеем

$$\langle \xi | u \rangle = \sum_k \langle \xi | k \rangle \langle k | u \rangle;$$

другими словами,

$$(u)_\Xi = S(u)_Q. \tag{85}$$

Обозначим также с помощью $(A)_Q$ и $(A)_\Xi$ матрицы, соответствующие заданному оператору A в представлениях $\{Q\}$ и $\{\Xi\}$; тогда

$$\langle \xi | A | \xi' \rangle = \sum_{k,\, l} \langle \xi | k \rangle \langle k | A | l \rangle \langle l | \xi' \rangle$$

или

$$(A)_\Xi = S(A)_Q S^\dagger. \tag{86}$$

Аналогично для левых векторов $(v)_Q$ и $(v)_\Xi$, представляющих один и тот же бра-вектор $\langle v |$, имеем

$$(v)_\Xi = (v)_Q S^\dagger. \tag{87}$$

Уравнения (85), (86), (87) являются искомыми уравнениями, характеризующими унитарное преобразование S (ср. формулы (80)).

Таким образом, переход от представления $\{Q\}$ к представлению $\{\Xi\}$ осуществляется при помощи унитарного преобразования S.

Элементы полученной матрицы S обладают следующими замечательными свойствами:

— рассматриваемые как функции индекса столбца n элементы $\langle\xi|n\rangle$ ξ-й строки являются компонентами левого вектора $(\xi)_Q$, представляющего собственный бра-вектор $\langle\xi|$ оператора Ξ в представлении $\{Q\}$;

— рассматриваемые как функции индекса строки ξ элементы $\langle\xi|n\rangle$ n-го столбца являются компонентами правого вектора $(n)_\Xi$, представляющего собственный кет-вектор $|n\rangle$ оператора Q в представлении $\{\Xi\}$.

В частности, решение в представлении $\{Q\}$ проблемы собственных значений оператора Ξ есть задача, математически эквивалентная нахождению преобразования S, диагонализующего матрицу $(\Xi)_Q$. Аналогично решение в представлении $\{\Xi\}$ проблемы собственных значений оператора Q эквивалентно нахождению преобразования $S^\dagger$, диагонализующего матрицу $(Q)_\Xi$.

Важно выделить те величины и те соотношения, которые могут быть определены независимо от вида представления. Этим качеством обладают величины и соотношения, определяемые непосредственно с помощью векторов и операторов. Так, *скалярное произведение* двух векторов есть величина, инвариантная относительно изменения представления. *Соотношения эрмитового сопряжения* и все *алгебраические уравнения* между векторами и между операторами также обладают этим свойством инвариантности.

Отметим еще *сохранение следа*: след (если он сходится) матрицы, представляющей оператор, сохраняет свое значение независимо от выбранного представления; эта величина характеризует сам оператор. Нетрудно показать, что (задача 6)

$$\mathrm{Sp}\,|u\rangle\langle u| = \langle u|u\rangle, \tag{88}$$

$$\mathrm{Sp}\,|u\rangle\langle v| = \langle v|u\rangle. \tag{89}$$

§ 22. Унитарные преобразования операторов и векторов

Матрица S, введенная в предшествующем параграфе, не представляет никакого оператора. Матрица, представляющая некоторый оператор, определена в заданном представлении, в то время как матрица преобразования зависит как бы сразу от двух представлений. Это хорошо видно на примере, разобранном выше, ибо матрица S не является квадратной.

Тем не менее в некоторых случаях может оказаться, что существует взаимооднозначное соответствие между базисными векторами двух разных представлений. В этом случае векторы обеих базисных систем нумеруются одной системой индексов. Рассмотрим, например, представление $\{Q\}$ с базисной системой $|n\rangle$, нумеруемой дискретным индексом n, и представление $\{\bar{Q}\}$ с базисной системой $|\bar{n}\rangle$, нумеруемой тем же самым индексом. Два кет-вектора $|n\rangle$ и $|\bar{n}\rangle$, нумеруемые одним индексом, как-то соответствуют один другому. Пусть это соответствие выражается оператором U:

$$|n\rangle = U\,|\bar{n}\rangle.$$

Тогда

$$U = U\left(\sum_n |\bar{n}\rangle\langle\bar{n}|\right) = \sum_n |n\rangle\langle\bar{n}| \tag{90}$$

и

$$U^\dagger = \sum_n |\bar{n}\rangle\langle n|;$$

поэтому, учитывая условия ортонормированности $|n\rangle$ и $|\bar{n}\rangle$, получаем

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1. \tag{91}$$

Следовательно, U есть *унитарный оператор*. Вообще же унитарная матрица $\langle\bar{m}|n\rangle$, определяющая переход от представления $\{Q\}$ к представлению $\{\bar{Q}\}$, есть матрица, представляющая U в представлении $\{\bar{Q}\}$.

В том случае когда можно построить унитарный оператор U, можно определить операцию, которая является в некотором смысле дополнительной к операции изменения представления. Вместо того чтобы преобразовывать базисную систему $\{Q\}$ в новую базисную систему $\{\bar{Q}\}$, векторы которой даются уравнением

$$|\bar{n}\rangle = U^\dagger\,|n\rangle, \tag{92}$$

можно осуществить преобразование самих векторов и операторов пространства $\mathscr{E}$, поставив в соответствие каждому вектору $|u\rangle$ вектор $|\hat{u}\rangle = U|u\rangle$, а каждому оператору A — оператор $\hat{A} = UAU^\dagger$.

Ввиду того что оператор U унитарен, очевидно, что преобразование U сохраняет соотношения сопряжения и уравнения между векторами и операторами. В частности:

а) сохраняется скалярное произведение: $\langle\hat{u}|\hat{A}|\hat{v}\rangle = \langle u|A|v\rangle$;

б) сохраняется эрмитовость.

Если A — наблюдаемая, то $\hat{A}$ есть наблюдаемая с тем же спектром собственных значений, ибо уравнение на собственные значения

$$A\,|a\rangle = a\,|a\rangle$$

переходит в уравнение

$$\hat{A}\,|\hat{a}\rangle = a\,|\hat{a}\rangle. \tag{93}$$

Собственные кет-векторы $\hat{A}$, принадлежащие заданному собственному значению a, являются преобразованными собственными кет-векторами A, принадлежащими тому же собственному значению. Заметим, что матрица, представляющая $\hat{A}$ в $\{Q\}$, совпадает с той, которая представляет A в $\{\bar{Q}\}$. Аналогично вектор $|\hat{a}\rangle$ имеет в $\{Q\}$ те же компоненты, что и вектор $|a\rangle$ в $\{\bar{Q}\}$.

Произвести последовательно два преобразования с операторами U и V значит то же самое, что произвести одно преобразование с оператором $W = VU$. Поскольку оператор W унитарен, результирующее преобразование будет унитарным. Иными словами, *произведение двух унитарных преобразований есть унитарное преобразование.*

Если оператор U, определяющий унитарное преобразование, «бесконечно близок» единице, то преобразование называется *инфинитезимальным*. Оператор U принимает вид

$$U \equiv 1 + i\varepsilon F, \tag{94}$$

где ε есть бесконечно малое вещественное число. Условие унитарности (91) принимает вид

$$\left(1 - i\varepsilon F^{\dagger}\right)(1 + i\varepsilon F) = (1 + i\varepsilon F)\left(1 - i\varepsilon F^{\dagger}\right) = 1$$

или, сохраняя только члены первого порядка по ε, $F = F^{\dagger}$.

Следовательно, оператор F *эрмитов.*

При инфинитезимальном преобразовании векторы и операторы преобразуются по формулам

$$|\hat{u}\rangle \equiv |u\rangle + \delta|u\rangle = (1 + i\varepsilon F)|u\rangle,$$

$$\hat{A} \equiv A + \delta A = (1 + i\varepsilon F) A (1 - i\varepsilon F) = A + i\varepsilon [F, A]$$

или

$$\delta|u\rangle = i\varepsilon F|u\rangle, \tag{95}$$

$$\delta A = i\varepsilon [F, A]. \tag{96}$$

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Пусть заданы два проектора P_i, P_j. По определению P_i не превосходит P_j, если $P_iP_j = P_i$; при этом пишут $P_i \leqslant P_j$. Показать, что если $P_i \leqslant P_j$, то $\langle u|P_i|u\rangle \leqslant \langle u|P_j|u\rangle$ при любом $|u\rangle$, и обратно. Показать либо непосредственно, либо используя это последнее свойство, что установленное неравенство действительно удовлетворяет аксиомам неравенств, а именно: а) если $P_i \leqslant P_j$ и $P_j \leqslant P_i$, то $P_i = P_j$ и б) если $P_i \leqslant P_j$ и $P_j \leqslant P_k$, то $P_i \leqslant P_k$.

2. Пусть $P_1, P_2, \ldots, P_K$ — проекторы. Показать, что их сумма также является проектором в том и только том случае, если

$$\sum_{i=1}^{K} \langle u | P_i | u\rangle \leqslant \langle u | u\rangle$$

для каждого вектора $|u\rangle$ в пространстве Гильберта.

3. а) Наблюдаемая A обладает конечным числом N собственных значений. Обозначим эти собственные значения буквами a_1, a_2, ..., a_N и положим

$$f(A) \equiv (A - a_1)(A - a_2) \ldots (A - a_N) \equiv (A - a_n)\, g_n(A)$$

Показать, что $f(A) = 0$ и что оператор проектирования P_n на подпространство n-го собственного значения дается выражением

$$P_n = g_n(A)/g_n(a_n)$$

б) Доказать обратное свойство, а именно: если A есть эрмитов оператор, удовлетворяющий алгебраическому уравнению порядка N

$$f(A) \equiv (A - a_1)(A - a_2) \ldots (A - a_N) = 0,$$

и если он не удовлетворяет никакому другому алгебраическому уравнению более низкого порядка, то это наблюдаемая, обладающая N собственными значениями, которые суть корни (обязательно вещественные и различные) уравнения $f(x) = 0$.

4. Показать, что матрица порядка N:

а) есть матрица, кратная единичной, если она коммутирует со всеми матрицами порядка N;

б) есть диагональная матрица, если она коммутирует со всеми диагональными матрицами порядка N.

5. Показать, что:

а) для того чтобы преобразование сохраняло комплексную сопряженность матриц необходимо и достаточно, чтобы матрица преобразования была вещественной;

б) для того чтобы преобразование сохраняло транспонированность матриц необходимо и достаточно, чтобы матрица преобразования была ортогональной.

6. Пусть $|u\rangle$ и $|v\rangle$ — два вектора с конечной нормой. Показать, что

$$\mathrm{Sp}\, |u\rangle\langle u| = \langle u | u\rangle, \quad \mathrm{Sp}\, |u\rangle\langle v| = \langle v | u\rangle.$$

7. Пусть H есть положительно определенный эрмитов оператор. Показать, что при любых $|u\rangle$ и $|v\rangle$

$$|\langle u | H | v\rangle|^2 \leqslant \langle u | H | u\rangle \langle v | H | v\rangle,$$

и что равенство $\langle u|H|u\rangle = 0$ необходимо влечет за собой $H|u\rangle = 0$. Показать, кроме того, что $\mathrm{Sp}\, H \geqslant 0$, причем знак равенства реализуется только, если $H = 0$.

8. Показать, что если H и K являются двумя положительно определенными наблюдаемыми, то $\mathrm{Sp}\, HK \geqslant 0$, а равенство влечет за собой $HK = 0$.

9. Пусть A — некоторый линейный оператор. Показать, что A^+A есть положительно определенный эрмитов оператор и его след равен сумме квадратов модулей элементов матрицы, представляющей A в некотором произвольно выбранном представлении. Вывести отсюда, что $\mathrm{Sp}\, A^+A \geqslant 0$, а равенство выполняется только, если $A = 0$.