Мы видим, что удобно ввести «представление», промежуточное между «представлениями» Шредингера и Гейзенберга, а именно то, которое получается при действии на векторы и наблюдаемые «представления» Шредингера унитарного оператора $U^{(0)\dagger}(t, t_0)$. Обозначим с помощью индекса $I$ векторы и наблюдаемые этого нового «представления»:

$$|\psi_I(t)\rangle = U^{(0)\dagger}|\psi_S(t)\rangle, \tag{53}$$

$$A_I(t) = U^{(0)\dagger}A_S U^{(0)}. \tag{54}$$

В промежуточном «представлении» вектор $|\psi_I(t)\rangle$, представляющий возможное движение квантовой системы, равен $U'|\psi_S(t_0)\rangle$. Согласно уравнению (51), этот вектор эволюционирует (медленно) во времени, подчиняясь уравнению Шредингера с гамильтонианом, выражающим энергию возмущения $H'_I$

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_I(t)\rangle = H'_I|\psi_I(t)\rangle. \tag{55}$$

С другой стороны, физические величины представляются подвижными наблюдаемыми; эти наблюдаемые подчиняются уравнениям движения Гейзенберга с «невозмущенным» гамильтонианом $H_I^0$:

$$i\hbar\frac{d}{dt}A_I = [A_I, H_I^{(0)}] + i\hbar\frac{\partial A_I}{\partial t}, \tag{56}$$

что легко показать, производя с уравнением (54) те же манипуляции, которые в случае уравнения (38) привели к выводу уравнения Гейзенберга.

## Раздел III. РАЗЛИЧНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ТЕОРИИ

### § 15. Определение представления

Согласно теории, развитой в двух первых разделах, все необходимые для описания квантовой системы элементы оказываются в наличии, если определены ее основные динамические переменные, коммутационные соотношения, которым подчиняются представляющие их наблюдаемые, и явное выражение через эти основные наблюдаемые гамильтониана, который определяет эволюция системы во времени. Тогда можно построить пространство $\mathscr{E}$ векторов, представляющих различные возможные динамические состояния системы, определить физический смысл векторов пространства, решая задачи на собственные значения для различных наблюдаемых, выписать и решить фундаментальные уравнения эволюции и, наконец, осуществить вычисление статистических распределений результатов измерений, которые теория должна предсказать.

Чтобы решить все эти проблемы анализа и алгебры в пространстве $\mathscr{E}$, всегда можно выбрать (и бесконечным числом способов) полную ортонормированную систему векторов и представить операторы и векторы в $\mathscr{E}$ с помощью матриц в представлении, где базисом служит выбранная полная система векторов.

Таким образом, всякая динамическая переменная системы представляется квадратной эрмитовой матрицей, всякое динамическое состояние — правым вектором (или эрмитово сопряженным левым вектором), определенным с точностью до постоянного множителя.

Существует столько возможных представлений теории, сколько имеется различных базисных систем векторов. Переход от одного представления к другому осуществляется с помощью унитарного преобразования. Эти унитарные преобразования матриц не следует смешивать с унитарными преобразованиями операторов и векторов, которые позволяют, согласно разделу II, изменять «представление» движения самой квантовой системы.

Чаще всего представление определяется заданием полного набора коммутирующих наблюдаемых: общие собственные векторы этих наблюдаемых как раз и являются базисными векторами представления. Базисные наблюдаемые представления и все функции этих наблюдаемых в этом представлении выражаются диагональными матрицами.

## § 16. Волновая механика

Волновая механика является частной формулировкой квантовой теории, когда принимается «представление» Шредингера и выбирается представление, в котором диагональными являются операторы координат.

Вернемся к квантовой системе, обладающей классическим аналогом, с $N$ степенями свободы, которая рассматривалась в § 7. Координаты $q_1, q_2, \ldots, q_N$ образуют полный набор коммутирующих наблюдаемых и определяют представление $\{q\}$. Это представление уже использовалось выше при построении самого пространства $\mathscr{E}$. При подходящем выборе фаз и нормировки базисных векторов мы получили очень простые выражения для матричных элементов операторов $q$ и $p$ (уравнения (26—27)).

Основными уравнениями представления $\{q\}$ являются соотношения ортонормированности (25) и соотношение замкнутости, которое в сокращенных обозначениях § 7 записывается в форме

$$P_q \equiv \int |q'\rangle\, dq' \langle q'| = 1 \qquad (dq = dq_1\, dq_2 \ldots dq_N). \tag{57}$$

Каждый кет-вектор $|\psi\rangle$ представляется матрицей с одним столбцом и компонентами $\langle q'|\psi\rangle$. Эта функция координат $q_1', q_2', \ldots, q_N'$ в конфигурационном пространстве, которую можно записать в виде $\psi(q_1', q_2', \ldots, q_N')$, и есть волновая функция, представляющая динамическое состояние системы на языке волновой механики:

$$\langle q'|\psi\rangle \equiv \langle q_1'q_2' \ldots q_N'|\psi\rangle \equiv \psi(q_1', q_2', \ldots, q_N'). \tag{58}$$

Скалярное произведение $|\psi\rangle$ на $|\varphi\rangle$ равно скалярному произведению соответствующих волновых функций в том виде, как оно определялось в волновой механике:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|P_q|\psi\rangle = \int\langle\varphi|q'\rangle\, dq'\,\langle q'|\psi\rangle = \int\varphi^*(q')\,\psi(q')\,dq'. \tag{59}$$

Проверим тождественность операторов волновой механики и матриц, представляющих наблюдаемые в $\{q\}$-представлении.

Пользуясь выражением (26) для матрицы наблюдаемой $q_n$, убеждаемся, что $q_n|\psi\rangle$ представляется волновой функцией

$$\langle q'|q_n|\psi\rangle = q_n'\langle q'|\psi\rangle = q_n'\psi(q')$$

и вообще действие некоторой функции $V(q) \equiv V(q_1, q_2, \ldots, q_N)$ от координат пространства конфигураций на кет-вектор $|\psi\rangle$ сводится к умножению $\psi(q')$ на $V(q')$

$$\langle q'|V(q)|\psi\rangle = V(q')\,\psi(q'). \tag{60}$$

Далее, пользуясь явным выражением (27) для матрицы, представляющей наблюдаемую $p_n$, убеждаемся, что состояние $p_n|\psi\rangle$ представляется волновой функцией:

$$\begin{aligned}\langle q'|p_n|\psi\rangle &= \int\langle q'|p_n|q''\rangle\, dq''\,\langle q''|\psi\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{i}\int\frac{\partial}{\partial q_n'}[\delta(q'-q'')]\,\psi(q'')\,dq'' = \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_n'}\psi(q').\end{aligned} \tag{61}$$

Следовательно, наблюдаемая $p_n$ представляется операцией частного дифференцирования $-i\hbar\,\partial/\partial q_n$ волновой функции, стоящей справа от оператора $p_n$.

Таким образом, интересующая нас тождественность без труда проверяется для функций координат (уравнение (60)) и для составляющих импульса (уравнение (61)). Но поскольку всякая наблюдаемая выражается некоторой алгебраической функцией от $p$ и $q$, мы приходим к общему заключению: любая физическая величина $A(q; p)$ в волновой механике представляется оператором $A\left(q; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)$.

В качестве примера рассмотрим энергию $H$. Если предположить, что потенциальная энергия не зависит от времени, то наблюдаемая $H$ имеет вид

$$H(q; p) = \sum_i \frac{p^2}{2m_i} + V(q_1, \ldots, q_N).$$

Матрица, задающая энергию в представлении $\{q\}$, имеет форму:

$$\langle q' | H | q'' \rangle = H\left(q'; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\delta(q' - q'') =$$
$$= \left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)\frac{\partial^2}{\partial q_i'^2} + V(q')\right]\delta(q' - q'').$$

Выражение в квадратных скобках является оператором, действующим на $\delta(q' - q'')$ как функцию $q'$. Следовательно, вектор $H|\psi\rangle$ представляется волновой функцией:

$$\langle q' | H | \psi \rangle \equiv H\psi(q') = \left[-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i}\frac{\partial^2}{\partial q_i'^2} + V(q')\right]\psi(q').$$

Если, наконец, в «представлении» Шредингера, написать фундаментальное уравнение движения (35) в представлении $\{q\}$, то мы получим уравнение Шредингера в его обычной форме

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q; t) = H\psi(q; t).$$

Это завершает доказательство того, что волновая механика представляет собой, формулировку квантовой теории в представлении $\{q\}$ и «представлении» Шредингера.

## § 17. Представление $\{p\}$

В качестве следующего примера возьмем представление $\{p\}$, в котором диагональными являются составляющие импульса. Пусть $|p'\rangle \equiv |p_1'\rangle|p_2'\rangle \ldots |p_N'\rangle$ суть базисные векторы этого представления. Это общие собственные векторы наблюдаемых $p_1, p_2, \ldots, p_N$, принадлежащие собственным значениям $p_1'$, $p_2'$, $\ldots$, $p_N'$. Будем предполагать, что они ортонормированы

$$\langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p''),$$

и удовлетворяют соотношению замкнутости

$$P_p \equiv \int |p'\rangle\, dp' \langle p'| = 1$$

(мы используем здесь сокращенные обозначения индексов, подобно §§ 7, 16).

Согласно результатам § 6 волновая функция вектора $|p'\rangle$ в представлении $\{q\}$ есть

$$\langle q' \mid p' \rangle \equiv \prod_{i=1}^{N} \langle q'_i \mid p'_i \rangle = (2\pi\hbar)^{-N/2} e^{\frac{i}{\hbar}\left(p'_1 q'_1 + \ldots + p'_N q'_N\right)}.$$

Эта величина $\langle p' | q' \rangle = \langle q' | p' \rangle^*$, если ее рассматривать как функцию $q'$ и $p'$, является элементом унитарной матрицы $S$, преобразующей матрицы представления $\{q\}$ в матрицы представления $\{p\}$. Кет-вектор $|\psi\rangle$ в этом последнем представлении описывается «волновой функцией в импульсном пространстве»

$$\Phi(p') \equiv \langle p' \mid \psi \rangle.$$

Очевидно, что $\Phi(p')$ есть образ Фурье (соответствующим образом нормированный) волновой функции $\Psi(q') \equiv \langle q' | \psi \rangle$ в конфигурационном пространстве:

$$\Phi(p') = \langle p' \mid \psi \rangle = \int \langle p' \mid q' \rangle \, dq' \, \langle q' \mid \psi \rangle =$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N/2}} \int \Psi(q') \, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(p'_1 q'_1 + \ldots + p'_N q'_N\right)} \, dq'.$$

Нетрудно проверить (это можно сделать и непосредственно), что действие оператора $p_n$ на функцию $\Phi(p')$ сводится к умножению на $p'_n$, а действие оператора $q_n$ выражается взятием частной производной $i\hbar\, \partial/\partial p'_n$.

Для иллюстрации выпишем в представлении $\{p\}$ уравнение Шредингера для частицы с массой $m$ в поле статического потенциала $V(\boldsymbol{r})$. Энергия системы представляется наблюдаемой

$$H(\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{p}) \equiv \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}).$$

Базисные векторы $|\boldsymbol{p}'\rangle$ зависят от трех компонент импульса $p'_x$, $p'_y$, $p'_z$ и удовлетворяют условиям ортонормированности и замкнутости:

$$\delta(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}'') \equiv \delta(p'_x - p''_x)\, \delta(p'_y - p''_y)\, \delta(p'_z - p''_z) = \langle \boldsymbol{p}' \mid \boldsymbol{p}'' \rangle,$$
$$P_p \equiv \int | \boldsymbol{p}' \rangle \, d\boldsymbol{p}' \, \langle \boldsymbol{p}' | = 1.$$

Унитарная матрица $S$, преобразующая матрицы представления $\{\boldsymbol{r}\}$ в матрицы представления $\{\boldsymbol{p}\}$, дается формулой

$$\langle \boldsymbol{p}' \mid \boldsymbol{r}' \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-\frac{i}{\hbar} \boldsymbol{p}'\boldsymbol{r}'}.$$

Поэтому элементы матрицы $V(\boldsymbol{r})$ в представлении $\{\boldsymbol{p}\}$ можно записать в явном виде так:

$$\langle \boldsymbol{p}' \mid V \mid \boldsymbol{p}'' \rangle = \int\int \langle \boldsymbol{p}' \mid \boldsymbol{r}' \rangle \, d\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r}' \mid V(\boldsymbol{r}) \mid \boldsymbol{r}'' \rangle \, d\boldsymbol{r}'' \langle \boldsymbol{r}'' \mid \boldsymbol{p}'' \rangle =$$
$$= (2\pi\hbar)^{-3} \int\int e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\boldsymbol{r}'} \, d\boldsymbol{r}' V(\boldsymbol{r}') \, \delta(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}'') \, d\boldsymbol{r}'' e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}''\boldsymbol{r}''} =$$
$$= (2\pi\hbar)^{-3} \int V(\boldsymbol{r}') \, e^{-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}'')\boldsymbol{r}'} \, d\boldsymbol{r}'.$$

Положим

$$\mathscr{V}(\boldsymbol{\omega}) = (2\pi\hbar)^{-3} \int V(\boldsymbol{r}) \, e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{r}} \, d\boldsymbol{r},$$

тогда

$$\langle \boldsymbol{p}' \mid V \mid \boldsymbol{p}'' \rangle = \mathscr{V}(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}''),$$

так что элементы матрицы оператора $H$ в представлении $\{\boldsymbol{p}\}$ записываются в форме

$$\langle \boldsymbol{p}' \mid H \mid \boldsymbol{p}'' \rangle = \frac{p'^2}{2m} \delta(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}'') + \mathscr{V}(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}'').$$

Пусть $\Phi(\boldsymbol{p}')$ есть волновая функция в импульсном пространстве динамического состояния $|\psi\rangle$

$$\Phi(\boldsymbol{p}') = \langle \boldsymbol{p}' \mid \psi \rangle = \int \langle \boldsymbol{p}' \mid \boldsymbol{r}' \rangle \, d\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r}' \mid \psi \rangle =$$
$$= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\boldsymbol{r}'} \, \Psi(\boldsymbol{r}') \, d\boldsymbol{r}'.$$

Тогда уравнение Шредингера, имеющее в волновой механике вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\boldsymbol{r};\, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\boldsymbol{r}) \right] \Psi(\boldsymbol{r};\, t),$$

в представлении $\{\boldsymbol{p}\}$ принимает форму интегро-дифференциального уравнения

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\boldsymbol{p};\, t) = \frac{p^2}{2m} \Phi(\boldsymbol{p};\, t) + \int \mathscr{V}(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}') \, \Phi(\boldsymbol{p}';\, t) \, d\boldsymbol{p}'.$$

## § 18. Пример: движение свободного волнового пакета

В качестве приложения вышеприведенных результатов изучим движение свободного волнового пакета ($V = 0$).

Пусть $|\psi\rangle$ есть вектор состояния в момент времени $t = 0$, а $\psi(\boldsymbol{r})$ и $\varphi(\boldsymbol{p})$ — волновые функции, выражающие этот вектор в представлениях $\{\boldsymbol{r}\}$ и $\{\boldsymbol{p}\}$ соответственно. В момент времени $t$ динамическое состояние системы дается вектором

$$|\Psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \, |\psi\rangle,$$

где $H \equiv p^2/2m$ есть гамильтониан свободной частицы. Поскольку импульс является постоянной движения, его среднее значение остается неизменным во времени; то же самое верно относительно групповой скорости

$$v = \langle p\rangle/m.$$

Мы знаем, что расплыванием пакета можно пренебречь при достаточно малых промежутках времени (§ VI. 3). Уточним здесь этот результат и покажем, что при выполнении условий слабого расплывания волновой пакет распространяется практически без искажений и может быть в очень хорошем приближении описан функцией $\psi(r - vt)$.

Эта приближенная волновая функция представляет вектор

$$|\overline{\Psi}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}pvt}\,|\psi\rangle,$$

в чем нетрудно убедиться, используя и обобщая свойство (16) или исследуя соответствующую волновую функцию в представлении $\{p\}$. Приближение тем лучше, чем ближе к единице вероятность для системы находится в состоянии $|\overline{\Psi}\rangle$; иными словами, необходимо, чтобы

$$1 - |\langle\Psi\,|\,\overline{\Psi}\rangle|^2 \ll 1.$$

Заменяя $|\Psi\rangle$ и $|\overline{\Psi}\rangle$ выражениями, приведенными выше, находим

$$|\langle\Psi\,|\,\overline{\Psi}\rangle| = \left|\langle\psi\,|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\frac{(p-mv)^2}{2m}\,t\right)|\,\psi\rangle\right|.$$

Матричный элемент в правой части просто вычислить в представлении $\{p\}$; получаем

$$\langle\psi\,|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\frac{(p-mv)^2}{2m}\,t\right)|\,\psi\rangle = \int |\,\varphi(p)\,|^2\, e^{i\frac{(p-mv)^2}{2m\hbar}t}\,dp.$$

Если предположить, что мы имеем дело с волновым пакетом типа приведенного на рис. 17, то функция $\varphi(p)$ имеет острый максимум линейных размеров $\Delta p$ около среднего значения $p = mv$; $\Delta p$ есть модуль вектора $\Delta p$, дающего среднее квадратичное отклонение импульса частицы $p$. В этом предположении экспонента в правой части равенства близка к единице в области максимума, т. е. при

$$\frac{(\Delta p)^2\,t}{2m\hbar} \ll 1$$

или

$$\frac{\Delta p}{m}\,t \ll \frac{2\hbar}{\Delta p}.$$

Приближение справедливо, пока выполнено это условие. Но это неравенство выражает условие:

расплывание $\ll$ ширины пакета,

которое мы уже получили при изучении расплывания волнового пакета в § VI. 3 (условие (VI. 15)).

## § 19. Другие представления. Представление, в котором диагональна энергия

Примеры, приведенные выше, показывают, что уравнения теории имеют различную форму в зависимости от выбранного представления; ввиду этого и вычисления в разных представлениях могут быть существенно различными.

Среди представлений квантовой теории некоторые оказываются особенно удобными при рассмотрении консервативных систем из-за простой формы уравнения Шредингера: это те представления, в которых энергия $H$ диагональна [9]). Базисные векторы $|E\alpha\rangle$ такого представления отмечаются собственным значением энергии $E$ и набором $\alpha$ собственных значений других постоянных или интегралов движения, которые вместе с $H$ составляют полный набор наблюдаемых. Вектор $|\psi(t)\rangle$ «представления» Шредингера, описывающий динамическое состояние системы, в этом представлении дается «волновой функцией»

$$\psi(E, \alpha; t) \equiv \langle E\alpha | \psi(t)\rangle,$$

которая удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(E, \alpha; t) = \langle E\alpha | H | \psi(t)\rangle = E\psi(E, \alpha; t).$$

Таким образом, имеем

$$\psi(E\alpha; t) = \psi(E\alpha; t_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E (t-t_0)}.$$

Зная вектор состояния $\{E\alpha\}$ в начальный момент времени, легко определить его эволюцию с течением времени. На практике вектор в начальный момент времени часто дается в другом представлении, например, представлении $\{q\}$. Уравнение движения будет, следовательно, решено, если мы сумеем перейти от представления $\{q\}$ к представлению, где $H$ диагонален. С математической точки зрения задача построения унитарной матрицы, обеспечивающей эту смену представления, эквивалентна задаче о собственных значениях оператора $H$ в представлении $\{q\}$, т. е. решению в этом представлении стационарного уравнения Шредингера.

## Раздел IV. КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА

### § 20. Системы с неполной информацией и смешанные состояния

Когда динамическое состояние системы известно не полностью, некоторые предсказания о ее поведении все же могут быть сделаны, если прибегнуть к обычным статистическим методам. Обсуждение этого вопроса, начатое в гл. V (§ 16), без труда можно изложить в рамках общего формализма.

---

[9]) В своей первоначальной форме матричная механика Борна, Гейзенберга и Иордана была частной формулировкой квантовой теории в «представлении» Гейзенберга, выраженной в представлении, где диагональна энергия.