Теперь волновую функцию q следует сопоставить некоторому исходному триплету элементарных частиц, а $\tilde{q}$ — триплету античастиц. Другие мультиплеты получаются по методике, упомянутой ранее в связи с изотопическими. Надо находить все парные произведения компонент исходных спиноров q и $\tilde{q}$ и выделять из них совокупности, преобразующиеся только друг через друга. Это неприводимые представления $SU(3)$. Матрица их преобразования является частью новой матрицы $U^+ \times U$. Выясним отдельные вопросы, касающиеся числа элементов в супермультиплете.

Скаляр преобразований $SU(3)$ — формула (28.27) — соответствует синглету — одной частице без семейства подобных.

Исходные спиноры q и $\tilde{q}$ соответствуют триплетам.

Далее надо рассматривать попарные произведения q и $\tilde{q}$, затем тройные произведения и т. д. и выделять из них самостоятельные части. Число элементов в каждой такой части будет соответствовать возможному супермультиплету.

С помощью теории групп установлена последовательность этих чисел. Включая уже рассмотренные синглет и базисный триплет, имеем 1, 3, 6, 8, 10, 15, 24, 27, 35 и т. д.

Далее нужно попытаться отождествить их с реальными супермультиплетами элементарных частиц. Здесь идея симметрии дополняется кварковой моделью. *Триплет играет особую роль: его компоненты называемые кварками, оказываются составляющими частями всех частиц, а не одним из семейств.* Кварки выступают в качестве истинно элементарных частиц, тогда как все адроны не элементарны, а являются составными частицами. На этом пути из возможных мультиплетов отбираются лишь следующие: 1, 8, 10. Они действительно обнаруживаются в природе и получают свое объяснение, подобно изотопическому спину, например такие параметры, как страниость и гиперзаряд; делаются некоторые заключения о спектре масс в мультиплете.

Приложение I

Сингулярная дельта-функция Дирака

1. $\delta(x)=\begin{cases}\infty, & x=0,\\ 0, & x\neq 0,\end{cases}$

$$\int_a^b \delta(x)\,dx=1,\quad a\leqslant 0\leqslant b$$

определение δ-функции.

2. $\int_a^b f(x)\,\delta(x)\,dx=f(0)$, $a\leqslant 0\leqslant b$, или $\int_c^d f(x)\,\delta(x-\alpha)\,dx=f(\alpha)$, $c\leqslant\alpha\leqslant d$ — основное свойство δ-функции.

3. $\lim_{\alpha\to\infty}\dfrac{\sin\alpha x}{\pi x}=\delta x$

одно из аналитических выражений δ-функции.

4. $\dfrac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}dk=\delta(x)$.

5. $\delta(-x)=\delta(x)$, $\quad x\delta(x)=0$, $\quad \delta'(-x)=-\delta'(x)$, $\quad x\delta'(x)=-\delta(x)$, $\delta(ax)=\dfrac{1}{|a|}\delta(x)$ — важные свойства δ-функции.

6. $\delta(x,\ y,\ z)\equiv\delta(\vec{r})=\delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z)$ — трехмерное обобщение δ-функции.

7. $\int F(\vec{r})\,\delta(\vec{r})\,d\vec{r}=F(0)$, $\int \vec{F}(\vec{r})\,\delta(\vec{r}-\vec{a})\,d\vec{r}=\vec{F}(\vec{a})$ — основное свойство трехмерной δ-функции.

8. $\delta(\vec{r})=\dfrac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\vec{k}\vec{r}}d\vec{r}$ — разложение δ-функции в интеграл Фурье.

9. $\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\delta(\vec{r})$.

Последнее равенство показывает, что $\frac{1}{r}$ есть решение уравнения $\Delta U = 0$ везде, кроме точки $\vec{r} = 0$.

Приложение II

Матрицы и действия с ними

Матрица — это табличка с упорядоченным расположением элементов по столбцам и строкам. Применяются квадратные матрицы, у которых число строк и столбцов совпадает, матрицы-столбцы и матрицы-строки. Элементы квадратной матрицы A обозначаются той же буквой, но с индексами — A_{ik} (первый индекс — строка, второй — столбец):

$$A = \begin{pmatrix} A_{1,1} A_{1,2} \ldots A_{1n} \\ A_{2,1} A_{2,2} \ldots A_{2n} \\ \ldots\ldots\ldots \\ A_{n1} A_{n2} \ldots A_{nn} \end{pmatrix}.$$

Элементы матрицы-столбца или матрицы-строки имеют один индекс:

$$C = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{pmatrix}, \quad C = (C_1 C_2 \ldots C_n).$$

Далее предполагается, что ранг складываемых или перемножаемых матриц (число строк или столбцов) одинаков и элементами матриц являются комплексные числа.

Матрицы можно складывать друг с другом: $C = A + B$, если $C_{ik} = A_{ik} + B_{ik}$; умножать на число: $B = \lambda A$, если $B_{ik} = \lambda A_{ik}$.

Матрица $C = A \cdot B$ является произведением матриц A и B, если $C_{ik} = \sum\limits_s A_{is} B_{sk}$. Перемножая квадратные матрицы, получаем квадратную матрицу того же ранга:

$$\square \cdot \square = \square.$$

Имеет смысл умножение квадратной матрицы на матрицу-столбец:

$$\square \cdot ▯ = ▯.$$

матрицы-строки на квадратную матрицу:

$$▭ \cdot \square = ▭.$$

Умножение строки на столбец и столбца на строку дает число

$$▭ \cdot ▯ = \text{число}, \quad ▯ \cdot ▭ = \text{число}.$$

Операция умножения матриц в общем случае некоммутативна.

Среди квадратных матриц выделяют нулевую матрицу: $0_{ik} = 0$. Очевидно, что $A + 0 = A$, $A \cdot 0 = 0$. Важное значение имеет единичная матрица I. Она обладает свойствами: $A \cdot \mathrm{I} = \mathrm{I} \cdot A = A$. Ее элементы определяются равенством $\mathrm{I}_{ik} = \delta_{ik}$.

Единичная матрица является частным случаем диагональной матрицы. Так называется матрица вида

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{2,2} & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Матрица A^{-1} называется обратной матрицей к матрице A, если $A^{-1}\cdot A=1$. (Заметим, что $A^{-1}\cdot A=A\cdot A^{-1}$.) Элементы обратной и прямой матриц связаны соотношением

$$(A^{-1})_{ik}=(-1)^{i+k}\frac{D_{ki}}{\Delta(A)}.$$

Здесь $\Delta(A)$ — определитель, составленный из элементов матрицы A; D_{ki} — минор, получающийся вычеркиванием из определителя k-й строки и i-го столбца. Очевидно, что матрицы с $\Delta=0$ не имеют обратных матриц.

Матрица $\tilde{A}$ с элементами $\tilde{A}_{ik}=A_{ki}$ называется транспонированной (по отношению к матрице A). Она получается из матрицы A перестановкой строк и столбцов.

Матрица A^+ с элементами $A^+_{ik}=A^*_{ki}$ называется сопряженной к матрице A. Если матрица $A^+=A^{-1}$, то матрица A называется унитарной. Поскольку $\Delta(AB)=\Delta(A)\cdot\Delta(B)$ и $\Delta(A^+)=[\Delta(A)]^*$, определитель унитарной матрицы удовлетворяет соотношению

$$|\Delta(A)|^2=1.$$

Легко доказать: $(\widetilde{AB})=\tilde{B}\tilde{A}$, $(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$, $(AB)^+=B^+A^+$.

Приложение III

Элементы теории представлений

Использование математического аппарата, адекватного физическим объектам, позволяет достаточно просто и логически стройно изложить соответствующую физическую теорию, расширяет возможности ее применения, способствует глубокому пониманию ее идей. Использованный ранее математический формализм волновых функций и действующих на них функциональных операторов является частным случаем более общего описания квантовых систем на языке понятий линейной алгебры.

В нашем курсе в основном применялось координатное представление функции состояния и операторов физических величин. Оно является не только наглядным, но и наиболее исчерпывающим для описания пространственного распределения микрочастиц. Однако в релятивистской области взаимодействий микрочастиц координатное представление теряет смысл, поэтому используются импульсное и энергетическое. Они и в нерелятивистской области в ряде случаев позволяют выяснить необходимые детали взаимодействия.

По указанным причинам учебная книга, посвященная квантовой механике, не может считаться полной без изложения теории представлений; основы этой теории и изложены в нижеследующем приложении.

Векторы и операторы в гильбертовом пространстве

1. Векторы в линейном векторном пространстве

Векторами могут быть различные математические объекты, для которых определены операции сложения и умножения вектора на комплексное число. Множество векторов образует линейное векторное (комплексное) пространство, если любая линейная комбинация векторов из этого множества есть вектор, входящий в данное множество.

Вектор как элемент линейного векторного пространства в квантовой механике обозначается символом $|>$ и называется кет-вектором или просто *кет*. Чтобы различать векторы пространства между собой, используются буквы или индексы, которые могут пробегать как дискретный, так и непрерывный ряды значений. Так, для дискретного множества применяется обозначение $|n>$, где $n=1, 2, 3, \ldots$, для непрерывного $|x>$; непрерывная переменная величина x изменяется в некотором конечном или бесконечном интервале. Используются и другие обозначения, отражающие (или оставляющие без внимания) дискретный или непрерывный характер множества векторов: $|u_n>$ и $|u>$, $|\psi(x)>$ и $|\psi>$ и т. д.

Уточним определения сложения векторов и умножения вектора на число. Сложение векторов есть операция, в результате которой двум векторам $|a>$ и $|b>$ сопоставляется третий вектор $|c>=|a>+|b>$. Умножение вектора $|a>$ на комплексное число α определяет вектор $|b>=\alpha|a>$. Для этих операций постулируются свойства:

$$\left.\begin{array}{l}
1)\ |a>+|b>=|b>+|a>;\\
2)\ (|a>+|b>)+|c>=|a>+(|b>+|c>);\\
3)\ 1\cdot|a>=|a>;\\
4)\ (\alpha+\beta)\,|a>=\alpha|a>+\beta|a>;\\
5)\ \alpha\,(\beta|a>)=\alpha\beta|a>;\\
6)\ \alpha\,(|a>+|b>)=\alpha|a>+\alpha|b>,\\
7)\ \text{множество содержит нулевой вектор, такой, что}\\
\qquad\qquad |a>+0=|a>;\\
8)\ \text{для каждого } |a> \text{ существует } |-a>\text{, такой, что}\\
\qquad\qquad |a>+|-a>=0
\end{array}\right\} \qquad (1)$$

Названные свойства или правила действий с векторами справедливы, например, для обычных (геометрических) векторов, матриц и комплексных функций действительного переменного. Поэтому из указанных объектов можно построить линейные векторные пространства.

Линейные комбинации векторов записываются в виде суммы:

$$|u>=\sum_n c_n|n>, \qquad (2)$$

или интеграла:

$$|u\rangle=\int c(k)|k\rangle dk, \qquad (3)$$

где c_n — в общем случае комплексные числа, а $c(k)$ — комплексная функция непрерывного аргумента k. По определению линейного векторного пространства, если $|n\rangle$ — векторы этого пространства, а c_n — произвольные комплексные числа, то $|u\rangle$ также вектор пространства, причем в ряд (2) входит произвольное число слагаемых.

Возьмем несколько векторов. Если ни один из них нельзя выразить линейной комбинацией всех других, то говорят, что эти векторы линейно независимы.

В этом случае из равенства

$$\lambda_1|a_1\rangle+\lambda_2|a_2\rangle+\ldots=0$$

следует, что $\lambda_1=\lambda_2=\ldots=0$. В противном случае векторы $|a_1\rangle$, $|a_2\rangle$ и т. д. линейно зависимы и один из них может быть выражен в виде линейной комбинации остальных. Например,

$$|a_1\rangle=-\frac{\lambda_2}{\lambda_1}|a_2\rangle-\frac{\lambda_3}{\lambda_1}|a_3\rangle\ldots$$

Если линейное векторное пространство содержит максимум n независимых векторов, то это конечномерное пространство, и число его измерений равно n. Всякий вектор в этом пространстве может быть представлен в виде линейной комбинации n линейно независимых векторов, образующих базис. Базисные векторы можно выбрать бесконечным числом различных способов.

Существуют линейные векторные пространства, в которых число независимых векторов неограниченно. В них базис представляет собой бесконечную (счетную или континуальную) последовательность векторов. Другие векторы в таких пространствах находятся как линейные комбинации (в виде бесконечных рядов или интегралов) векторов базиса. При этом должны быть учтены все векторы базиса, т. е. взята полная их система.

Пусть базис составляет система линейно независимых векторов $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle\ldots$ или (в случае бесконечномерного пространства) взята полная система базисных векторов. Тогда любой вектор линейного векторного пространства выражается суммой:

$$|a\rangle=\alpha_1|e_1\rangle+\alpha_2|e_2\rangle+\ldots \qquad (4)$$

При этом бесконечная сумма в правой части (4) сходится к вектору $|a\rangle$. Совокупность чисел α_1, α_2, ... является координатами вектора в системе координат, определяемой базисом $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$, ...

2. Унитарное и гильбертово пространства

Комплексное пространство называется унитарным, если в нем определена операция скалярного произведения, ставящая в соответствие каждой паре векторов $|a\rangle$ и $|b\rangle$ комплексное число

$\langle a|b\rangle$. Постулируются следующие свойства скалярных произведений векторов:

1) $\langle a|b\rangle^*=\langle b|a\rangle$ — эрмитова симметрия; (5)

2) $\langle a|b+c\rangle=\langle a|b\rangle+\langle a|c\rangle$ — закон дистрибутивности; (6)

3) $\langle a|\alpha b\rangle=\alpha\langle a|b\rangle$ — закон ассоциативности; (7)

4) $\langle a|a\rangle\geqslant 0$ — положительная определенность нормы вектора (8)

Из (5), (6) и (7) следуют, в частности, равенства

$$\left.\begin{aligned}\langle a|\sum_i \beta_i b_i\rangle&=\sum_i \beta_i\langle a|b_i\rangle,\\ \sum_i\langle \alpha_i a_i|b\rangle&=\sum_i \alpha_i^*\langle a_i|b\rangle.\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

Первое равенство выражает линейность скалярного произведения по второму сомножителю, а второе можно назвать свойством антилинейности по первому сомножителю.

Скалярный квадрат вектора называется нормой или квадратом модуля вектора:

$$a^2=\langle a|a\rangle.$$

С помощью свойства (5) находим, что $(a^2)^*=a^2$ — вещественное число; свойство (8) приводит к вещественности a.

В квантовой механике используются унитарные векторные пространства, как бесконечномерные, так и с конечным числом измерений. Для бесконечномерных пространств имеют место две особенности: 1) норма вектора в бесконечномерном пространстве может быть как конечным числом, так и бесконечной величиной; 2) пространство может быть полным, т. е. содержать все необходимые векторы для разложения любого своего вектора в сумму (2) или (3), но может быть и неполным, и тогда упомянутые равенства смысла не имеют. Математической основой для наиболее общей формулировки законов квантовой механики являются бесконечномерные полные унитарные пространства с конечной нормой для всех векторов. Это гильбертовы пространства. Таким образом, гильбертово пространство есть бесконечномерное полное линейное векторное пространство со скалярным произведением и конечной нормой. Сложные математические вопросы полноты мы оставляем без рассмотрения. Далее полнота обеспечивается во всех необходимых случаях.

В конечномерном унитарном пространстве можно выбрать ортогональную систему линейно независимых векторов с единичными модулями:

$$\langle e_i|e_k\rangle=\delta_{ik}. \tag{10}$$

Из условия ортогональности векторов $|e_i\rangle$ в разложении (2) можно найти все коэффициенты — координаты вектора. В самом деле, умножая равенство

$$|a\rangle=\sum_i \alpha_i|e_i\rangle \tag{11}$$

слева скалярно на $|e_k\rangle$, получим

$$\alpha_k = \langle e_k | a \rangle. \tag{12}$$

Координаты вектора в ортонормированном базисе называются его проекциями. Совокупность проекций вектора дает исчерпывающую информацию о нем, т. е. вектор при известном базисе может быть задан как упорядоченная совокупность (табличка, матрица) своих проекций.

Сказанное относится и к гильбертову пространству, однако число векторов его полного базиса бесконечно. Бесконечно соответственно и число проекций вектора.

Найдем выражение скалярного произведения двух векторов через их проекции в ортонормированном базисе. Пользуясь равенством (11) и свойствами скалярного произведения (6) и (9), имеем

$$\langle a | b \rangle = \sum_{i,\,k} \alpha_i^* \beta_k \langle e_i | e_k \rangle.$$

С учетом ортонормированности векторов базиса (10) получаем важнейшую формулу для расчета скалярного произведения:

$$\langle a | b \rangle = \sum_i \alpha_i^* \beta_i. \tag{13}$$

Скалярный квадрат, или норма вектора (8), выражается аналогичной формулой

$$\langle a | a \rangle = \sum_i \alpha_i^* \alpha_i. \tag{14}$$

Для гильбертова пространства бесконечный ряд в правой части формулы (14) сходится к конечному вещественному числу.

В квантовой механике в ряде задач оказывается необходимым использовать в качестве базисных такие векторы, норма которых не является конечным числом: $\langle e_i | e_i \rangle = \infty$, т. е. векторы не гильбертова пространства. Не вдаваясь в математические подробности, укажем только, что во всех таких случаях система базисных векторов оказывается непрерывной, и она нормируется на δ-функцию Дирака:

$$\langle k | k' \rangle = \delta\,(k - k'). \tag{15}$$

Любой вектор гильбертова пространства может быть представлен через векторы базиса (15) разложением (3). Коэффициенты разложения находятся по формуле

$$c\,(k) = \langle k | u \rangle. \tag{16}$$

Обобщаются на непрерывный базис и формулы (13), (14) для расчета скалярного произведения в проекциях:

$$\langle u | v \rangle = \int c^*(k)\, F\,(k)\, dk, \quad F\,(k) = \langle k | v \rangle, \tag{17}$$

$$\langle u | u \rangle = \int c^*(k)\, c\,(k)\, dk, \tag{18}$$

причем несобственные интегралы здесь должны быть сходящимися.

3. Сопряженные векторы

Роль сомножителей $|a\rangle$ и $|b\rangle$ в скалярном произведении $\langle a|b\rangle$ неодинакова, что видно из формулы (13). В связи с этим $\langle a|b\rangle$ можно рассматривать как произведение двух векторов разного типа: кет-вектора $|b\rangle$ и так называемого бра-вектора $\langle a|$:

$$\langle a|b\rangle = \langle a|\cdot|b\rangle.$$

Бра-вектор $\langle a|$ считается сопряженным вектору $|a\rangle$. Процедура сопряжения зависит от конкретного смысла кет-векторов как математических объектов. Сопряжение, или эрмитово сопряжение, будем обозначать следующим образом:

$$|a\rangle^{+} = \langle a|. \tag{19}$$

Операции сопряжения и умножения бра-вектора на кет-вектор выбирается в соответствии с определением и свойствами скалярного произведения векторов (см. (5)...(9)). В этом смысле скалярное произведение задает взаимно однозначное соответствие между сопряженными векторами. Из соотношения (19) следует $\langle a|^{+} = |a\rangle$. Если $|a\rangle = \sum_i \alpha_i|e_i\rangle$ и $|b\rangle = \sum_i \beta_i|e_i\rangle$, то на основании формулы (13) получаем выражение для скалярного произведения в проекциях:

$$\langle b|a\rangle = \sum_i \beta_i^* \alpha_i.$$

Величина произведения не зависит от выбора базиса. Поэтому разложению по кет-векторам $|e_i\rangle$ сопоставляется разложение $\langle a|$ по сопряженным бра-векторам $\langle e_i|$:

$$\langle a| = \sum_i \alpha_i^* \langle e_i|.$$

Аналогичным образом для непрерывного множества векторов базиса имеем, кроме

$$|u\rangle = \int c(k)|k\rangle dk,$$

разложение

$$\langle u| = \int c^*(k)\langle k|dk.$$

Все сказанное позволяет утверждать, что функционал $\langle a|b\rangle$ при фиксированном $|b\rangle$ порождает новое линейное векторное пространство $\langle a|$, которое называется сопряженным исходному векторному пространству. Каждому вектору $|a\rangle$ ставится во взаимно однозначное соответствие вектор $\langle a|$. Ортонормированному базису $|e_i\rangle$ в сопряженном пространстве отвечает ортонормированный базис $\langle e_i|$. Всякая линейная комбинация кет-векторов $\sum_i \alpha_i|a_i\rangle$ переходит в антилинейную $\sum_i \alpha_i^*\langle a_i|$. Оба пространства идентичны по свойствам, но это два разных пространства: бра- и кет-векторы нельзя складывать.

4. Два частных вида гильбертовых пространств, используемых в квантовой механике

Совокупность матриц-столбцов:

$$u=\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{20}$$

где u_i — комплексные числа, образует линейное векторное пространство, так как матрицы можно складывать друг с другом и умножать на комплексное число, причем эти операции обладают постулированными свойствами (1). Число элементов матрицы может быть как конечным, так и бесконечным.

Пространство кет-векторов (20) является унитарным, так как в нем можно задать операцию скалярного произведения:

$$|a> = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |b> = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad <a|b> = \sum_i a_i^* b_i. \tag{21}$$

При таком определении произведения векторов выполняются требования (5)...(8).

Данное пространство будет гильбертовым, если для любого вектора $|u>$ сумма

$$\sum_i u_i^* u_i$$

есть конечное число.

Совокупность матриц

$$|1> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \\ \cdot \end{pmatrix}, \quad |2> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}, \ \ldots$$

образует ортонормированный базис. В нем для вектора $|u>$ имеем

$$|u> = u_1|1> + u_2|2> + \ldots$$

При действиях с матрицами вводится понятие о матрице A^+, эрмитово сопряженной матрице $A: A_{ik}^+ = A_{ki}^*$. Матрицу-строку $(a_1^*, a_2^*, \ldots)$, эрмитово сопряженную матрице-столбцу $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$, назовем бра-вектором $<a|$, сопряженным кет-вектору $|a>$. Это оказывается возможным потому, что произведение $<a|b>$ вычисляется по правилу умножения матриц ($C = AB$, если $C_{ik} = \sum_s A_{is} \cdot B_{sk}$), совпадает со скалярным произведением (21).

Частный случай комплексного векторного пространства матриц-столбцов был использован нами при изучении спина электрона. Спиновые функции $|u> = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ образуют двумерное унитарное пространство с базисом:

$$u\left(\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad u\left(-\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Возвратимся к заданию векторов гильбертова пространства с помощью их проекций (см. п. 2 этого приложения). Поскольку вектор при известном базисе полностью определяется упорядоченной совокупностью комплексных чисел-проекций этого вектора, то рассмотренные сейчас матрицы-столбцы могут считаться аналитической формой задания векторов дискретного множества. Соответственно матрицы-строки выражают сопряженные векторы. Формула скалярного произведения векторов в проекциях (13) отвечает правилу матричного умножения «строка на столбец». В этой связи рассмотренная в первом примере гильбертова пространства совокупность матриц-столбцов или матриц-строк есть в то же время и общее аналитическое представление (в числах) гильбертова пространства векторов, определенных ранее, в п. 1, аксиоматически.

Множество однозначных, непрерывных и квадратично-интегрируемых комплексных функций $\varphi(x)$, $f(x)$, ... образует бесконечномерное (гильбертово) пространство. Если $\varphi(x)$ есть кет-вектор $|\varphi>$, то комплексно-сопряженная ей функция $\varphi^*(x)$ есть соответствующий бра-вектор $\langle\varphi|$. Скалярное произведение определяется интегралом:

$$\langle\varphi|f\rangle=\int\varphi^*(x)f(x)\,dx. \tag{22}$$

В качестве базиса выбирается любая полная ортонормированная система функций $\varphi_k(x)$. Разложению функций по векторам базиса отвечает разложение в обобщенный ряд Фурье. Соответственно проекции вектора $|\psi\rangle$, данного разложением

$$|\psi(x)>=\sum_k c_k|\varphi_k(x)>,$$

находятся как коэффициенты Фурье, т. е.

$$c_k=<\varphi_k|\psi>=\int\varphi_k^*(x)\psi(x)\,dx.$$

В случае непрерывного базиса, нормированного на δ-функцию, имеем разложение в интеграл Фурье:

$$|\psi(x)>=\int c(k)\varphi(k,x)\,dk,$$

где $c(k)$ есть Фурье-образ функции ψ:

$$c(k)=<\varphi(k,x)|\psi(x)>=\int\varphi^*(k,x)\psi(x)\,dx.$$

Из сказанного следует, что математический формализм ψ-функций, применявшийся на протяжении всего курса, сводится к случаю так называемого координатного представления векторов состояния $|\psi(x)>$, при котором ортонормированный базис составляют векторы $|\delta(x-x')>$. В этом базисе проекции вектора $\psi(x)$ на оси в соответствии с формулой (22) будут такие:

$$\int \psi(x')\,\delta(x-x')\,dx' = \psi(x),$$

т. е. получим непрерывную матрицу-столбец значений $\psi(x)$.

Выше рассмотрено так называемое функциональное пространство. В нем функции можно формально свести к матрицам, если рассматривать матрицы-столбцы и матрицы-строки с непрерывно переходящими друг в друга элементами (матрицы-столбцы с непрерывной числовой последовательностью элементов по строкам и матрицы-строки с непрерывной числовой последовательностью по столбцам). Соответственно каждое значение функции $\psi(x)$ — вектора гильбертова пространства — есть проекция этого вектора на векторы базиса $\delta(x-x')$ и в то же время элемент непрерывной матрицы-строки или столбца. В дираковских обозначениях кет-вектор $|\psi(x)>$ оказывается матрицей, индекс строки которой является непрерывным аргументом x. Такой подход значительно расширяет возможности применения дираковских обозначений «бра» и «кет» для векторов гильбертова пространства. В частности, все формулы приобретают матричный смысл.

5. Операторы в линейном векторном пространстве

В главе III рассмотрено понятие о линейном операторе $\widehat{L}$, действующем на ψ-функцию. Поскольку ψ-функции могут рассматриваться как векторы гильбертова пространства, то целесообразно обобщение понятия о функциональном операторе на операторы, действующие в линейном векторном пространстве. Ниже такое обобщение выполняется в очень краткой форме, так как все основные сведения об операторах уже изложены в § 7.

Предположим, что имеется правило, по которому вектору $|u>$ ставится во взаимно однозначное соответствие некоторый вектор $|v>$. Про это говорят, что вектор $|v>$ получается из вектора $|u>$ в результате действия оператора A. (Здесь операторы обозначены только большими латинскими буквами без значка «$\wedge$».) Можно записать, что

$$|v> = A|u>. \qquad (23)$$

Далее будут рассматриваться только линейные операторы, для которых

$$A(c_1|a> + c_2|b>) = c_1A|a> + c_2A|b>.$$

Определим сумму операторов: $M = A + B$, если

$$A|a> + B|a> = M|a>.$$

Оператор M есть произведение операторов A и B, если

$$A(B|a>)=M|a>.$$

Значит, при выполнении данного равенства $M=AB$. Произведение операторов в общем случае некоммутативно, т. е. $AB \neq BA$.

Символом I обозначается единичный оператор:

$$I|a>=|a>. \quad (24)$$

Заметим, что $I \cdot A = A \cdot I$ для любого оператора.

Оператор A^{-1} называется обратным по отношению к оператору A, если

$$A^{-1}A=AA^{-1}=I. \quad (25)$$

Операторы A и A^{-1} коммутируют. (Но не все операторы имеют обратные к ним операторы.)

Скалярное произведение векторов $|b>$ и $A|a>$ записывается в виде

$$<b|A|a>.$$

Оператор A^+ называется сопряженным оператору A, если

$$<b|A^+|a>=<a|A|b>^*. \quad (26)$$

Для самосопряженных или эрмитовых операторов $A=A^+$.

Нам потребуются далее унитарные операторы, для которых $A^+=A^{-1}$ и, следовательно, $A^+A=AA^+=I$.

В заключение укажем два полезных соотношения, доказательство которых предлагается читателю в качестве задачи:

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}, \ (AB)^+=B^+A^+.$$

6. Собственные векторы и собственные значения операторов

Если выполняется равенство

$$A|a>=a|a>, \quad (27)$$

то вектор $|a>$ называется собственным вектором оператора A, а число a — его собственным значением. Если равенству (27) удовлетворяет несколько линейно независимых собственных векторов $|a_\nu>$, то собственное значение называется вырожденным:

$$A|a_\nu>=a|a_\nu>; \ \nu=1, 2, ..., f,$$

где f — кратность вырождения.

Можно показать, что коммутирующие операторы имеют общую систему собственных векторов.

Можно также показать, что собственные векторы эрмитового оператора попарно ортогональны. Выбрав условие нормировки, получим ортонормированную систему собственных векторов.

Самосопряженный оператор может иметь как дискретный, так и непрерывный спектры. (Случай смешанного спектра для упрощения записей не рассматривается.)

Если спектр дискретен, то

$$A|i> = a_i|i>$$

и

$$<k|i> = \delta_{ik}.$$

Если спектр непрерывен, то

$$A|a> = a|a>$$

и

$$<a|a'> = \delta(a-a'),$$

где $\delta(a-a')$ — δ-функция Дирака.

Система собственных векторов эрмитовых операторов, применяемых в квантовой механике, является полной, т. е. для любого гильбертова вектора $|u>$ справедливо разложение

$$|u> = \sum_i c_i|i>,$$

или

$$|u> = \int c(a)|a> da,$$

где $|i>$ или $|a>$ — собственные векторы самосопряженного оператора A.

Из сходимости разложений к раскладываемому вектору следуют соотношения

$$<u|u> = \sum_i c_i^* c_i, \quad <u|u> = \int c^*(a)\, c(a)\, da. \tag{28}$$

Они называются условиями полноты и замкнутости. Справедливо и обратное: если эти условия выполняются, то указанные разложения сходятся в среднем, например,

$$\left|\, |u> - \sum_i c_i|i> \right|^2 = 0. \tag{29}$$

Очевидно, что система собственных векторов эрмитова оператора может быть принята за базис системы координат в гильбертовом пространстве.

В приложениях часто используются операторы:

$$I = \sum_i |i><i|$$

и

$$I = \int da|a><a|. \tag{30}$$

Их смысл определяется соотношениями

$$I|u> = \sum_i |i><i|u> = \sum_i u_i|i> = |u>,$$

$$I|u> = \int da|a><a|u> = \int c(a)|a> da = |u>.$$

Поэтому в гильбертовом пространстве операторы (30) совпадают с единичным оператором.

Векторы и операторы в F-представлении

1. Векторы в F-представлении

Выберем в качестве базиса в линейном векторном пространстве совокупность собственных векторов любого самосопряженного оператора F. Для простоты предполагаем спектр оператора дискретным. Вектор $|i>$ есть собственный вектор, принадлежащий собственному значению f_i. (Для перехода к непрерывному спектру нужно везде суммирование заменить интегрированием.)

Разложим произвольный вектор по векторам базиса:

$$|a> = \sum_i <i|a>|i> = \sum_i a_i|i>.$$

Числа $a_i = <i|a>$ расположим в виде матрицы-столбца:

$$|a_f> = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Множество таких матриц образует линейное векторное пространство, находящееся во взаимно однозначном соответствии с исходным. Вектору $|a>$ сопоставляется вектор в матричном пространстве $|a_f>$. Свойства нового пространства совпадают со свойствами взятого первоначально. Поэтому говорят, что множество векторов $|a_f>$ образует представление исходного векторного пространства. Вектор $|a_f>$ есть вектор $|a>$ в F-представлении.

Если кет-вектору $|a>$ в F-представлении сопоставляется матрица-столбец $|a_f>$, то сопряженный ему бра-вектор $<a|$ в этом же представлении изображается матрицей-строкой, сопряженной к $|a_f>$:

$$<a_f| = (a_1^*, a_2^*, \ldots).$$

2. Операторы в F-представлеиии

Дано равенство

$$|b> = A|a>.$$

Разложим векторы $|b>$ и $|a>$ по векторам базиса $|f>$:

$$\sum_i <i|b>|i> = A\sum_k <k|a>|k> = \sum_k <k|a>A|k>. \tag{1}$$

Умножим теперь равенство (1) на $|n>$. Используя ортонормированность базиса, получаем

$$<n|b> = \sum_k <k|a><n|A|k>,$$

или

$$b_n = \sum_k A_{nk}a_k, \quad A_{nk} = <n|A|k>. \tag{2}$$

Выражение (2) соответствует произведению матриц:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \qquad (3)$$

Матрица $\{A_{nk}\}$ переводит вектор $|a_f>$ в вектор $|b_f>$. Поэтому ее следует рассматривать как оператор A в F-представлении:

$$|b_f> = A_{(f)}|a_f>. \qquad (4)$$

По правилам действия с матрицами найдем выражение, эрмитово сопряженное к выражению (4). Получим

$$<b_f| = <a_f|A^+_{(f)}. \qquad (5)$$

Элементы матрицы $A^+_{(f)}$ равны:

$$(A^+_{(f)})_{ik} = (A_{(f)})^*_{ki} = <k|A|i>^* = <i|A^+|k>. \qquad (6)$$

Из равенства (5) следует, что бра-векторы в F-представлении преобразуются с помощью матрицы $A^+_{(f)}$, сопряженной с матрицей $A_{(f)}$. Согласно (6) матрица $A^+_{(f)}$ совпадает с матрицей оператора A^+, сопряженного с A.

Это дает основание для утверждения, что оператору A в данном векторном пространстве отвечает оператор A^+ в сопряженном пространстве, т. е. равенству

$$|b> = A|a>$$

отвечает в пространстве бра-векторов равенство

$$<b| = <a|A^+.$$

(Операторы пишутся справа от бра-вектора, на который действуют.)

Если $A = F$, то

$$<n|A|k> = <n|F|k> = f_k<n|k> = f_k\delta_{nk}.$$

Таким образом, матрица оператора в своем собственном представлении является диагональной.

Сумме операторов A и B соответствует сумма матриц $A_{(f)}$ и $B_{(f)}$, произведению — произведение матриц $A_{(f)}$ и $B_{(f)}$:

$$(A+B)_{(f)} = A_{(f)} + B_{(f)}, \quad (AB)_{(f)} = A_{(f)}B_{(f)}.$$

3. Переход от одного представления к другому

Пусть $|f>$ — собственные векторы оператора F, а $|q>$ — собственные векторы оператора Q. Матрица-столбец $<f|a>$ задает вектор $|a_f>$ в F-представлении, а матрица-столбец $<q|a>$ есть вектор $|a_q>$, т. е. $|a>$ в Q-представлении. Чтобы найти связь между двумя указанными представлениями, разложим векторы $|f>$ по новому базису $|q>$:

$$|f>=\sum_q <q|f>|q>.$$

Тогда

$$|a>=\sum_f <f|a>|f>=\sum_f <f|a>\sum_q <q|f>|q>=$$
$$=\sum_q |q>\sum_f <q|f><f|a>.$$

Но

$$\sum_f <q|f><f|a>=<q|(\sum_f |f><f|)|a>=$$
$$=<q|I|a>=<q|a>.$$

Поэтому

$$|a>=\sum_q <q|a>|q>. \tag{6}$$

Таким образом, мы пришли к Q-представлению вектора $|a>$. Запишем равенство

$$<q|a>=\sum_f <q|f><f|a>$$

в виде

$$|a_q>=\{U_{qf}\}|a_f>. \tag{7}$$

Согласно последнему соотношению $\{U_{qf}\}$ есть оператор перехода от F- к Q-представлению. Это квадратная матрица с элементами:

$$U_{qf}=<q|f>. \tag{8}$$

Обратное преобразование осуществляется матрицей $\{U_{fq}\}$ с элементами:

$$U_{fq}=<f|q>. \tag{9}$$

Матрицы $\{U_{qf}\}$ и $\{U_{fq}\}$ соотносятся как прямая и обратная. Их произведение дает единичную матрицу:

$$\sum_q U_{f'q}U_{qf''}=\sum_q <f'|q><q|f''>=<f'|\Big(\sum_q |q><q|\Big)|f''>=$$
$$=\delta_{f'f''}.$$

Матрица с элементами U^*_{ki} является эрмитово сопряженной по отношению к матрице $\{U_{ik}\}$. У нас

$$<f|q>^*=<q|f>.$$

Поэтому $U^+=U^{-1}$. Таким образом, переход к новому представлению осуществляется с помощью унитарной матрицы. (Заметим, что определитель, составленный из элементов унитарной матрицы, равен единице.)

4. Перевод оператора из F- в Q-представление

Матрицы $\{A_{q'q''}\}$ и $\{A_{f'f''}\}$ задают оператор A в Q- и F-представлениях. С помощью (2) имеем

$$A_{q'q''} = \langle q'|A|q''\rangle = \langle q'|IAI|q''\rangle =$$
$$= \langle q'|\Big(\sum_{f'} |f'\rangle\langle f'|\Big) A \Big(\sum_{f''} |f''\rangle\langle f''|\Big)|q''\rangle =$$
$$= \sum_{f'}\sum_{f''} \langle q'|f'\rangle\langle f'|A|f''\rangle\langle f''|q''\rangle .$$

Если ввести матрицу $\{U_{qf}\}$ с элементами $\langle q|f\rangle$, то можно записать, что

$$A_{(q)} = \{U_{qf}\} A_{(f)} \{U_{qf}\}^{+}. \qquad (10)$$

Таким образом, перевод оператора из одного представления в другое также осуществляется с помощью унитарной матрицы $\{U_{qf}\}$.

5. Обобщение формул перехода на непрерывный спектр

Если имеется непрерывная совокупность базисных векторов, то разложение по базису имеет вид

$$|a\rangle = \int \langle f|a\rangle |f\rangle df.$$

В F-представлении $|a\rangle$ отображается матрицей-столбцом с непрерывной последовательностью элементов, которые мы обозначим $|a(f)\rangle$ (или просто $a(f)$):

$$|a(f)\rangle = \langle f|a\rangle . \qquad (11)$$

Произвольному оператору отвечает в F-представлении непрерывная квадратная матрица $\{A(f', f'')\}$ с элементами:

$$A(f', f'') = \langle f'|A|f''\rangle . \qquad (12)$$

Используя формулу произведения матриц, вместо $|b\rangle = A|a\rangle$ имеем выражение

$$|b(f')\rangle = \{A(f', f'')\}|a(f'')\rangle = \int A(f', f'')|a(f'')\rangle df''. \qquad (13)$$

В своем собственном представлении оператор изображается диагональной матрицей:

$$F(f', f'') = f'\delta(f' - f''). \qquad (14)$$

Для перехода из F- в Q-представление применим непрерывную квадратную матрицу $\{U(q, f)\}$ с элементами $U(q, f) = \langle q|f\rangle$. Перевод вектора в Q-представление осуществляется с помощью формул

$$|a(q)\rangle = \{U(q, f)\}|a(f)\rangle , \qquad (15)$$

или

$$|a(q)\rangle = \int U(q, f)|a(f)\rangle df. \qquad (16)$$

Для перевода операторов применим соотношеиия

$$A_{(q)} = \{U(q, f)\} A_{(f)} \{U(q, f)\}^{+}, \qquad (17)$$

или

$$A(q', q'') = \iint U(q', f') A(f', f'') U(f'', q'') df' df''. \qquad (18)$$

6. Функции от операторов

Для операторов определены действия сложения и умножения. Поэтому функцию оператора можно задать через степенной ряд:

$$\varphi(A)=\sum_{i=0}^{\infty}\alpha_i A^i. \tag{19}$$

Если $|a>$ есть собственный вектор оператора A, то

$$A|a>=a|a>,$$
$$A^2|a>=a^2|a>,$$
$$\cdots\cdots$$
$$A^i|a>=a^i|a>,$$

поэтому

$$\varphi(A)|u>=\Big(\sum_{i=0}^{\infty}\alpha_i A^i|a>=\varphi(a)|a>. \tag{20}$$

Чтобы найти результат действия оператора $\varphi(A)$ на произвольный вектор $|x>$, его нужно предварительно разложить по базису $|a>$.

Некоторые представления, часто используемые в квантовой механике

1. Аксиоматика квантовой механики

Изложим исходные положения квантовой механики с помощью математического аппарата векторов и операторов в гильбертовом пространстве.

Аксиома I

Состояние системы описывается вектором абстрактного гильбертова пространства. (Абстрактность означает, что заранее математическая или физическая природа векторов не определяется.)

Следует заметить, что вектор $|u>$ описывает то же состояние, что и $c|u>$. Даже задание нормы вектора $<u|u>$ оставляет неопределенность, связанную с произвольным выбором фазового множителя.

Аксиома II

Физическим характеристикам системы — физическим величинам — сопоставляются линейные самосопряженные операторы, действующие в гильбертовом пространстве. При этом используются эрмитовы операторы, собственные векторы которых образуют полную ортонормированную систему, а собственные значения действительны.

Аксиома III

Единственно возможными результатами измерения динамической переменной A являются собственные значения сопоставляемого ей оператора $\hat{A}$.

Аксиома IV

Результат однократного измерения величины A в общем случае неоднозначен. Вероятность — $W(a)$ — получить значение a величины A для системы, находящейся в состоянии $|u\rangle$, равна $|\langle a|u\rangle|^2$.

При непрерывном спектре $|\langle a|u\rangle|^2$ следует рассматривать как плотность вероятности.

Аксиома V

Операторы координаты $\hat{x}$ и проекции импульса $\hat{p}_x$ удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \tag{1}$$

Аналогичные соотношения можно записать для $\hat{y}$ и $\hat{p}_y$, $\hat{z}$ и $\hat{p}_z$.

Аксиома VI

Изменение среднего значения величины A в состоянии $|u\rangle$ определяется уравнением

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{A}]\rangle. \tag{2}$$

(Скобки $\langle\ \rangle$ используются для обозначения средних значений соответствующих величин; $\hat{H}$ — оператор Гамильтона, оператор полной энергии системы.)

Как нетрудно видеть,

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle u|\hat{A}|u\rangle.$$

Действительно,

$$\langle u|\hat{A}|u\rangle = \langle u|\hat{A}\left(\sum_a \langle a|u\rangle |a\rangle\right) = \langle u|\sum_a \langle a|u\rangle \hat{A}|a\rangle =$$
$$= \langle u|\sum_a a\langle a|u\rangle |a\rangle = \sum_a a\langle a|u\rangle \langle u|a\rangle =$$
$$= \sum_a |\langle a|u\rangle|^2 a = \sum_a aW(a) = \bar{A}.$$

2. Изменение состояния системы со временем

Основное динамическое уравнение квантовой механики (2) допускает несколько способов описания изменения состояния системы со временем. Их называют различными представлениями или картинами эволюции системы. Выбор того или иного представления не меняет физического содержания теории и определяется соображениями математического удобства.

В шредингеровском представлении изменение состояния описывается уравнением Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|u\rangle = \hat{H}|u\rangle. \tag{3}$$

Нетрудно показать, что из уравнения (3) следует уравнение (2). Продифференцируем по времени среднее значение:

$$\frac{d}{dt}\langle u|\widehat{A}|u\rangle=\left(\frac{\partial}{\partial t}\langle u|\right)\widehat{A}|u\rangle+\langle u|\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t}|u\rangle+ \\ +\langle u|\widehat{A}\left(\frac{\partial}{\partial t}|u\rangle\right). \tag{4}$$

Используя самосопряженность оператора $\widehat{A}$, имеем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\langle u|\right)\widehat{A}|u\rangle=\langle u|\widehat{A}\frac{\partial}{\partial t}|u\rangle^*. \tag{5}$$

На основании уравнения (3)

$$\frac{\partial}{\partial t}|u\rangle=-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}|u\rangle.$$

Если подставить это выражение для производной $\frac{\partial}{\partial t}|u\rangle$ в формулы (4) и (5) и учесть, что $(\widehat{A}\widehat{H})^+=\widehat{H}^+\widehat{A}^+=\widehat{H}\widehat{A}$, то приходим к уравнению (2).

Согласно уравнению Шредингера (3) может быть введен оператор:

$$\hat{\tau}=1-\frac{i}{\hbar}\tau\widehat{H}, \tag{6}$$

переводящий систему из состояния $|u(t)\rangle$ в состояние $|u(t+\tau)\rangle$, где τ — бесконечно малый промежуток времени.

Действительно,

$$\hat{\tau}|u(t)\rangle=|u(t)\rangle-\frac{i}{\hbar}\tau\widehat{H}|u(t)\rangle=|u(t)\rangle+\frac{\partial}{\partial t}|u(t)\rangle\tau.$$

Оператор $\hat{\tau}$ является унитарным, так как обратный оператор:

$$\hat{\tau}^{-1}=1+\frac{i}{\hbar}\tau\widehat{H}$$

совпадает с сопряженным оператором $\hat{\tau}^+$.

В построении других представлений большую роль играет оператор эволюции системы $\widehat{S}(0, t)$. Он переводит систему из состояния $|u(0)\rangle$ в состояние $|u(t)\rangle$:

$$|u(t)\rangle=\widehat{S}(0, t)|u(0)\rangle.$$

Оператор $\widehat{S}(0, t)$ можно представить как произведение многих операторов $\hat{\tau}_i$, записанных для последовательных малых интервалов времени. Поэтому он тоже является унитарным: $\widehat{S}^+=\widehat{S}^{-1}$.

В представлении Гейзенберга система описывается неизменяемым с течением времени вектором $|u_{\Gamma}\rangle$. Эволюция системы связана с тем, что от времени зависят операторы всех физических величин. Из соотношения для средних (2) в этом случае следует

$$\frac{d\widehat{A}_{\Gamma}}{dt}=\frac{\partial\widehat{A}_{\Gamma}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\widehat{H}_{\Gamma}, \widehat{A}_{\Gamma}].$$

Это равенство нужно понимать как определение оператора $\frac{d\widehat{A}_{\Gamma}}{dt}$.

Связь между шредингеровской и гейзенберговской картиной развития системы осуществляется унитарным преобразованием, производимым с помощью оператора эволюции $\widehat{S}(0, t)$. Полагаем

$$|u_{\text{г}}\rangle = \widehat{S}^{+}|u_{\text{ш}}(t)\rangle \tag{7}$$

и

$$\widehat{A}_{\text{г}} = \widehat{S}^{+}\widehat{A}_{\text{ш}}\widehat{S}.$$

С помощью простых преобразований можно показать, что

$$|u_{\text{г}}\rangle = |u_{\text{ш}}(0)\rangle \tag{8}$$

и

$$\langle a_{\text{г}}|\widehat{A}_{\text{г}}|b_{\text{г}}\rangle = \langle a_{\text{ш}}|\widehat{A}_{\text{ш}}|b_{\text{ш}}\rangle. \tag{9}$$

Первое равенство прямо следует из формулы (7) и унитарности оператора $\widehat{S}(0, t)$.

Для доказательства формулы (9) используем соотношение (7) и тождество $(AB)^{+} = B^{+}A^{+}$:

$$\langle a_{\text{г}}|\widehat{A}_{\text{г}}|b_{\text{г}}\rangle = \langle a_{\text{г}}|\widehat{S}^{+}A_{\text{ш}}S|b_{\text{г}}\rangle,$$

но

$$\widehat{S}|b_{\text{г}}\rangle = \widehat{S}\widehat{S}^{+}|b_{\text{ш}}\rangle = |b_{\text{ш}}\rangle,$$

поэтому

$$\langle a_{\text{г}}|\widehat{A}_{\text{г}}|b_{\text{г}}\rangle = \langle a_{\text{г}}|\widehat{S}^{+}A_{\text{ш}}|b_{\text{ш}}\rangle = \langle b_{\text{ш}}|\widehat{A}_{\text{ш}}S|a_{\text{г}}\rangle^{*} =$$
$$= \langle b_{\text{ш}}|\widehat{A}_{\text{ш}}|a_{\text{ш}}\rangle^{*} = \langle a_{\text{ш}}|\widehat{A}_{\text{ш}}|b_{\text{ш}}\rangle.$$

На последнем шаге учтена эрмитовость оператора $\widehat{A}$.

Из равенства (9) следует, что в гейзенберговском представлении сохраняют свои значения матричные элементы операторов, их собственные значения, скалярные произведения векторов, вероятности отдельных значений физических величин, их средние значения. Это доказывает полную эквивалентность обоих представлений: шредингеровского и гейзенберговского.

Если оператор Гамильтона $\widehat{H}$ не зависит от времени явно, то оператор эволюции $\widehat{S}$ может быть найден в общем виде. Подставим в уравнение Шредингера (3) вместо вектора $|u\rangle$ выражение

$$|u\rangle = \widehat{S}|u(0)\rangle,$$

получим

$$i\hbar\frac{\partial\widehat{S}}{\partial t}|u(0)\rangle = \widehat{H}\widehat{S}|u(0)\rangle.$$

В виду произвольности вектора $|u(0)\rangle$ следует операторное уравнение

$$i\hbar\frac{\partial\widehat{S}}{\partial t} = \widehat{H}\widehat{S},$$

которое имеет решение:

$$\hat{S}(0, t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}.$$

Другие представления, описывающие изменение физического состояния системы со временем, также получаются с помощью унитарных преобразований. Часто используется представление взаимодействия, в котором от времени зависят как векторы состояний, так и операторы физических величин. Оно удобно, если можно выделить в гамильтониане малую часть $\hat{w}$, так что

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{w}$$

и $\hat{H}_0$ не зависит от времени. Ищем решение уравнения Шредингера (3) в виде

$$|u>=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}|g>.$$

После подстановки имеем

$$\hat{H}_0e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}|g>+i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\frac{\partial}{\partial t}|g>=(\hat{H}_0+\hat{w})\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}|g>.$$

Отсюда следует, что изменение векторов $|g>$ определяется уравнением

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|g>=\hat{v}\,|g>,$$

где

$$\hat{v}=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{w}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}.$$

Изменение операторов определяется другим уравнением, в которое входит только $\hat{H}_0$. Как следует из уравнения (2),

$$\frac{d\hat{B}}{dt}=\frac{\partial\hat{B}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{B}],$$

где

$$\hat{B}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{A}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}.$$

В конкретных расчетах оператор Гамильтона $\hat{H}_0$ описывает, например, систему невзаимодействующих частиц, а оператор $\hat{w}$ учитывает их взаимодействие. Отсюда и название представления. Представление взаимодействия очень удобно при использовании теории возмущений. Оно часто применяется в квантовой теории поля.

3. Координатное представление

Далее предполагается, что эволюция системы описывается уравнением Шредингера (3). В этом случае для решения практических задач часто используется координатное, или, как его еще называют, шредингеровское представление. В качестве базиса в гильбертовом пространстве выбираются собственные векторы оператора координаты x (в трехмерном случае — общие собственные векторы операторов $\hat{x}$, $\hat{y}$ и $\hat{z}$).

Очевидно, это $\delta(\vec{r}-\vec{r}')$.

Уравнение

$$\hat{x}|x'> = x'|x'>$$

должно иметь решение при любом вещественном x', так как частица может находиться в любой точке пространства. Следовательно, спектр оператора $\hat{x}$ непрерывен. Условие

$$<x'|x''> = \delta(x'-x'')$$

выражает ортонормированность базиса.

Состояние системы в x-представлении описывается непрерывной матрицей-столбцом $\psi(x)$:

$$\psi(x) = <x|\psi>,$$

где $|\psi>$ — вектор состояния системы.

Оператору $\hat{x}$ в данном представлении соответствует диагональная матрица:

$$\hat{x}_{xx'} = x\delta(x-x').$$

Действие этого оператора на вектор $\psi(x)$ определится равенством

$$\int \hat{x}_{xx'}\psi(x')\,dx' = \int x\delta(x-x')\,\psi(x')\,dx' = x\psi(x).$$

Оно сводится к умножению матрицы $\psi(x)$ на переменную x.

Введем оператор $\hat{p}_{xx'}$, определяемый квадратной непрерывной матрицей:

$$\hat{p}_{xx'} = -i\hbar\delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x}. \tag{10}$$

Подействуем им на произвольный кет $|\psi>$, также взятый в x-представлении:

$$\hat{p}_{xx'}|\psi(x')> = -i\hbar\int\delta(x-x')\frac{\partial\psi}{\partial x}\,dx' = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}.$$

Специальная проверка показывает, что операторы $x_{xx'}$ и $\hat{p}_{xx'}$ удовлетворяют коммутационным соотношениям (1). Поэтому оператор $\hat{p}_{xx'}$ следует отождествлять с оператором импульса в шредингеровском представлении.

Нетрудно видеть, что в координатном представлении можно вообще отказаться от понятий о векторе и операторе, выраженных на языке линейной алгебры. Для описания достаточно использовать состояния системы функций от координат $\psi(x)$ и действующие на них функциональные операторы $\hat{x}=x$ и $\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. Операторы всех других величин находятся как функции от операторов координат и проекций импульса. Такой способ изложения квантовой механики был принят в предыдущих главах данного курса.

4. Импульсное представление

Из физических соображений спектр собственных значений оператора импульса предполагается непрерывным, поэтому матрица оператора в своем собственном представлении есть

$$\hat{p}_{pp'} = p\delta(p - p').$$

Произвольный вектор $|\psi>$ в p-представлении изображается матрицей-столбцом:

$$\psi(p) = <p|\psi>.$$

Действие на него оператора $\hat{p}_{pp'}$ сводится к умножению на значение импульса p:

$$\int p\delta(p-p') <p'|\psi> dp' = \int p\delta(p-p')\,\psi(p')\,dp' = p\psi(p).$$

Из симметрии коммутационных соотношений (1) и вида формулы (10) заключаем, что оператор $\hat{x}$ в импульсном представлении имеет вид

$$\hat{x}_{pp'} = i\hbar\delta(p-p')\frac{\partial}{\partial p}.$$

Уравнение на собственные функции и собственные значения оператора импульса в координатном представлении записывается в виде

$$-i\hbar\frac{\partial\psi_p(x)}{\partial x} = p\psi_p(x) \quad (\psi_p(x) = <x|p>).$$

Нам известны его решения:

$$<x|p> = \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}.$$

Аналогично собственные функции и собственные значения оператора $\hat{x}$ в импульсном представлении находятся из уравнения

$$i\hbar\frac{\partial\psi_x(p)}{\partial p} = x\psi_x(p) \quad (\psi_x(p) = <p|x>).$$

Его решения:

$$<p|x> = \psi_x(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{ipx}{\hbar}}. \tag{11}$$

Пусть известен вектор состояния (волновая функция) в координатном представлении. Переход в импульсное представление осуществляется обычным порядком (см. предыдущую часть, п. 5):

$$<p|\psi> = \int <p|x><x|\psi> dx = \int \psi_x(p)\,\psi(x)\,dx =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\psi(x)\,dx.$$

Таким образом, функции (11) играют роль матрицы перехода. С ее помощью переводятся в импульсное представление операторы физических величин. Матрица $<p|\psi>$ есть коэффициент разложения волновой функции $\psi(x)$ в интеграл Фурье по системе собственных функций оператора импульса.

5. Гармонический осциллятор в энергетическом представлении

В качестве примера применения энергетического представления рассмотрим задачу о гармоническом осцилляторе. Она была решена ранее (см. § 6, п. 3) в координатном представлении.

Для осциллятора оператор полной энергии имеет вид

$$\hat{H}=\frac{\widehat{\vec{p}^2}}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

С помощью подстановки

$$\xi=x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

перейдем к операторам:

$$\hat{\xi}=\xi,\ \hat{p}=-i\frac{\partial}{\partial\xi}.$$

Тогда

$$\hat{H}=\frac{\hbar\omega}{2}(\hat{\xi}^2+\hat{p}^2).$$

Из перестановочного соотношения (1) вытекает формула

$$[\hat{\xi},\ \hat{p}]=i.$$

Введем новые операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ с помощью соотношений

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi}+i\hat{p}),\ \hat{a}^+=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi}-i\hat{p}).$$

Теперь

$$\hat{H}=\frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^++\hat{a}^+a).$$

Коммутатор операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ равен 1:

$$[\hat{a}\hat{a}^+]=1. \qquad (12)$$

Поэтому гамильтониан записывается в виде

$$\hat{H}=\hbar\omega\,(\hat{n}+1/2), \qquad (13)$$

где

$$\hat{n}=\hat{a}^+\hat{a}.$$

Рассмотрим подробнее некоторые свойства операторов $\hat{a}$, $\hat{a}^+$

и $\hat{n}$. Пусть $|\nu\rangle$ — собственный вектор оператора $\hat{n}$, принадлежащий собственному значению ν:

$$\hat{n}|\nu\rangle=\nu|\nu\rangle.$$

Определим результат действия на этот вектор операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$. Из коммутационного соотношения (12) следует, что

$$\hat{n}\hat{a}=\hat{a}(\hat{n}-1),$$
$$\hat{n}\hat{a}^+=\hat{a}^+(\hat{n}+1).$$

Подействуем операторами $\hat{n}\hat{a}$ и $\hat{n}\hat{a}^+$ на кет $|\nu\rangle$. Получаем

$$\hat{n}\hat{a}|\nu\rangle=(\nu-1)\,\hat{a}|\nu\rangle,$$
$$\hat{n}\hat{a}^+|\nu\rangle=(\nu+1)\,\hat{a}^+|\nu\rangle.$$

Отсюда видно, что

$$\hat{a}|\nu\rangle=c_\nu|\nu-1\rangle,$$
$$\hat{a}^+|\nu\rangle=d_\nu|\nu+1\rangle,$$

где c_ν и d_ν — неизвестные постоянные множители. Для нахождения c_ν вычислим двумя способами $\langle\nu|\hat{a}^+\hat{a}|\nu\rangle$:

$$\langle\nu|\hat{a}^+\hat{a}|\nu\rangle=\langle\nu|\hat{n}|\nu\rangle=\nu\langle\nu|\nu\rangle=\nu,$$
$$\langle\nu|\hat{a}^+\hat{a}|\nu\rangle=c_\nu\langle\nu|\hat{a}^+|\nu-1\rangle=c_\nu\langle\nu-1|\hat{a}|\nu\rangle^*=$$
$$=|c_\nu|^2\langle\nu-1|\nu-1\rangle=|c_\nu|^2.$$

Отсюда

$$c_\nu=\sqrt{\nu}.$$

Аналогично из расчета $\langle\nu|\hat{a}\hat{a}^+|\nu\rangle$ выводится значение d_ν:

$$d_\nu=\sqrt{\nu+1}.$$

Векторы $|\nu\rangle$ являются также собственными векторами гамильтониана (13). Так как энергия осциллятора — положительная величина, то $\nu\geqslant-\frac{1}{2}$. Если $\nu\geqslant\frac{1}{2}$, то

$$\hat{a}|\nu\rangle=\sqrt{\nu}|\nu-1\rangle.$$

Снова подействуем на это равенство оператором $\hat{a}$. Получим

$$\hat{a}^2|\nu\rangle=\sqrt{\nu(\nu-1)}|\nu-2\rangle,$$
$$\hat{a}^3|\nu\rangle=\sqrt{\nu(\nu-1)(\nu-2)}|\nu-3\rangle,$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

Наконец, на p-м шаге мы должны получить нуль, так как значение $\nu-p$ выйдет за пределы возможного:

$$\hat{a}^p|\nu\rangle=\sqrt{\nu(\nu-1)\ldots(\nu-p)}|\nu-p\rangle.$$

Отсюда видно, что ν должно быть целым положительным числом или нулем.

Переход к энергетическому представлению означает, что в качестве базиса выбираются собственные векторы оператора Гамильтона (13). В этом представлении матрица операторов $\widehat{H}$ и $\hat{n}$ диагональна:

$$\widehat{H}_{nm} = \hbar\omega\,(n + 1/2)\,\delta_{nm},$$
$$\hat{n}_{nm} = n\delta_{nm}\ (n = 0,\ 1,\ \ldots,\ m = 0,\ 1,\ \ldots).$$

Состояние осциллятора описывается векторами в виде матриц-столбцов:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Из уравнения для собственных векторов и собственных значений оператора Гамильтона следует

$$\sum_m \widehat{H}_{nm} c_m = \varepsilon_n c_n.$$

Исходя из этого равенства видим, что стационарным состояниям с энергией $\varepsilon_n = \hbar\omega\,(n + 1/2)$ соответствуют матрицы-столбцы:

$$|0> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix},\quad |1> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix},\quad |2> = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix},\ \ldots$$

Собственные значения оператора $\hat{n}$ равны n, т. е. 0, 1, 2, ... Чтобы возбудить осциллятор до n-го квантового состояния, ему нужно передать n квантов энергии величиной $\hbar\omega$. Поэтому оператор $\hat{n}$ называется оператором числа возбуждения или оператором количества квантов колебаний.

Матрицы операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ находятся из условий

$$\hat{a}\,|n> = \sqrt{n}\,|n-1>,$$
$$\hat{a}^+\,|n> = \sqrt{n+1}\,|n+1>.$$

Вычисление матричных элементов дает

$$\hat{a}^+_{mn} = \sqrt{n+1}\ \delta_{m,\ n+1},\quad \hat{a}^+_{mn} = \sqrt{n}\ \delta_{m,\ n-1},$$

или

$$\{\hat{a}_{nm}\} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \ldots \end{pmatrix},\quad \{\hat{a}^+_{nm}\} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ldots \end{pmatrix}.$$

Оператор $\hat{a}$ переводит систему в состояние с энергией, меньшей на один квант; напротив, оператор $\hat{a}^+$ на столько же увеличивает энергию осциллятора. Поэтому их называют операторами уничтожения и рождения кванта колебаний.

Эти операторы играют особо важную роль в теории поля. Электромагнитное поле с помощью введения специальных переменных можно представить как совокупность бесконечного числа осцилляторов с различными частотами и направлениями колебаний. При переходе к квантовому описанию поля возбуждение осциллятора до n-го уровня рассматривается как появление n частиц с энергией $\hbar\omega$ каждая. Эти частицы и есть фотоны. Состояние поля задается через указание числа фотонов определенных частот, направлений движения и поляризаций. При таком описании оператор $\hat{n}$ играет роль оператора числа частиц данного сорта. Операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ называются соответственно операторами рождения и уничтожения фотонов. Они необходимы для описания взаимодействия поля с частицами и в других случаях, когда изменяется состояние поля.

В соответствии с этим языком энергетическое представление можно назвать представлением чисел заполнения (квантовых состояний отдельных частиц). Переход к такому описанию системы называется вторичным квантованием.

Аналогичный подход используется при изучении квантовых полей любой природы и многих других вопросов. Например, колебания кристаллической решетки также можно свести к рассмотрению системы гармонических осцилляторов. Здесь возбуждение кванта колебаний толкуется как появление особой квазичастицы — фонона. Через указание числа фононов в различных возможных для них состояниях можно передать любое квантовое состояние всей системы колеблющихся атомов в решетке.

Упражнение X

1. Покажите, что $(AB)^+ = B^+A^+$.

Решение.

Пусть

$$B|y\rangle = |z\rangle. \tag{1}$$

Тогда

$$\langle x|AB|y\rangle = \langle x|A|z\rangle = \langle z|A^+|x\rangle^*.$$

Допустим

$$A^+|x\rangle = |f\rangle. \tag{2}$$

Тогда

$$\langle z|A^+|x\rangle^* = \langle z|f\rangle^* = \langle f|z\rangle.$$

Учитывая (1) и (2), имеем

$$\langle f|z\rangle = \langle f|B|y\rangle = \langle y|B^+|f\rangle^* = \langle y|B^+A^+|x\rangle^*.$$

Таким образом,

$$\langle x|AB|y\rangle = \langle y|B^+A^+|x\rangle^*,$$

но, с другой стороны,

$$\langle x|AB|y\rangle = \langle y|(AB)^+|x\rangle^*.$$