3.4. Матричная форма представления линейных операторов

В матричной форме квантовая механика была изложена Гейзенбергом, она оказалась эквивалентна операторной.

Для любой квантовой системы с конечномерным пространством состояний устанавливается соответствие между её состояниями $|\psi\rangle$ и векторами-столбцами. Если

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_1\rangle + ... + c_n|\psi_n\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i|\psi_i\rangle, \tag{63}$$

$|\psi_1\rangle ... |\psi_n\rangle$ – полный набор векторов состояний,

то можно представить $|\psi\rangle$ как столбец

$$|\psi\rangle \sim \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ ... \\ c_n \end{pmatrix}. \tag{63′}$$

При этом вектор, сопряжённый исходному, $\langle\psi| = (|\psi\rangle)^+$, будет представлен в виде строки:

$$\langle\psi| \sim \left(c_1^* \;\; c_2^* ... \;\; c_n^*\right). \tag{64}$$

Каждому оператору $\hat{A}$ в этом базисе соответствует матрица A, связывающая векторы-столбцы $|\varphi\rangle$ и $|\psi\rangle$:

$$A|\psi\rangle = |\varphi\rangle, \tag{65}$$

так что матрицу A можно определить с помощью соотношений

$$\hat{A}|\psi_j\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}|\psi_i\rangle, \; j = 1,2,...,n. \tag{66}$$

Если полная система базисных векторов $|\psi_j\rangle$ в $\mathcal{L}_n$, ортонормирована, то матричные элементы a_{ij} в (66) можно легко вычислить, домножив (66) слева на $\langle\psi_k|$ (благодаря линейности скалярного произведения можем вынести числа a_{ij} за знак произведения):

$$\langle\psi_k|\hat{A}|\psi_j\rangle \overset{(66)}{=} \langle\psi_k|\sum_{i=1}^{n} a_{ij}|\psi_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}\langle\psi_k|\psi_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}\delta_{ki} = a_{kj},$$

ввиду ортонормированности функций $|\psi_i\rangle, i = 1,2,...,n$. Так что

$$a_{ij} = \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_j\rangle. \tag{67}$$

Рассмотрим, как с помощью определения (66) можно найти действие оператора $\hat{A}$ на функцию $|\psi\rangle$ (65):

$$\hat{A}|\psi\rangle \overset{(63)}{=} \hat{A}\sum_{i=1}^{n} c_i|\psi_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i\hat{A}|\psi_i\rangle \overset{(66)}{=} \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_{j=1}^{n} a_{ji}|\psi_j\rangle = \sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{ji}c_i\right)|\psi_j\rangle =$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \tilde{c}_j \,|\,\psi_j\rangle = |\,\varphi\rangle\text{, где}\quad \tilde{c}_j = \sum_{i=1}^{n} a_{ji} c_i \quad\text{и}\quad |\,\varphi\rangle \sim \begin{pmatrix} \tilde{c}_1 \\ \tilde{c}_2 \\ \dots \\ \tilde{c}_n \end{pmatrix}.$$

Формулы (66) и (67), определяющие действие оператора $\hat{A}$ на функцию $|\,\psi\rangle$ (63), можно использовать и в бесконечномерных пространствах состояний, при этом размерность n заменяем на ∞.

Оператор $\hat{A}$ полностью определяется набором чисел $\langle\psi_i\,|\,\hat{A}\,|\,\psi_j\rangle$ (67), которые называются <u>*матричными элементами наблюдаемой*</u> <u>A</u>. Можно представить оператор $\hat{A}$ через сумму его матричных элементов a_{ij} (67), эта формула называется <u>*квазиспектральным разложением оператора*</u>:

$$\hat{A} = \sum_{i,j=1}^{\infty} a_{ij}\,|\,\psi_i\rangle\langle\psi_j\,|. \tag{68}$$

Получим формулу (68):

$$\hat{A}\,|\,\psi\rangle = \hat{1}\hat{A}\hat{1}\,|\,\psi\rangle \overset{(48')}{=} \sum_{i=1}^{\infty} |\,\psi_i\rangle\langle\psi_i\,|\hat{A} \sum_{j=1}^{\infty} |\,\psi_j\rangle\langle\psi_j\,|\psi\rangle \overset{(67)}{=} \sum_{i,j=1}^{\infty} |\,\psi_i\rangle a_{ij}\langle\psi_j\,|\,\psi\rangle =$$

$$= \sum_{i,j=1}^{\infty} a_{ij}\,|\,\psi_i\rangle\langle\psi_j\,|\,\psi\rangle \Rightarrow \quad \hat{A} = \sum_{i,j=1}^{\infty} a_{ij}\,|\,\psi_i\rangle\langle\psi_j\,|.$$

Пришли к формуле (68). При выводе учли, что оператор проектирования на всё пространство $\hat{1} = \hat{P}_{(\infty)} = \sum_{i=1}^{\infty} |\,\psi_i\rangle\langle\psi_i\,|$.

Можно выбрать для разложения (68) такой базис, в котором

$$a_{ij} = \langle\psi_i\,|\,\hat{A}\,|\,\psi_j\rangle = a_i\delta_{ij}. \tag{69}$$

Тогда (68) принимает вид: $\hat{A} = \sum_{i,j=1}^{\infty} a_i\delta_{ij}\,|\,\psi_i\rangle\langle\psi_j\,| = \sum_{i=1}^{\infty} a_i\,|\,\psi_i\rangle\langle\psi_i\,|$,

и $\hat{A}\,|\,\psi_k\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i\,|\,\psi_i\rangle\langle\psi_i\,|\,\psi_k\rangle \overset{\langle\psi_i|\psi_k\rangle=\delta_{ik}}{=} a_k\,|\,\psi_k\rangle$, где $|\,\psi_k\rangle, k = 1,2,...,\infty$ – собственные векторы оператора $\hat{A}$, a_k – соответствующие им собственные значения. Матрица оператора $\hat{A}$ может быть представлена в диагональном виде (69) в том случае, если $\hat{A}^{+} = \hat{A}$. При этом базисом являются собственные функции оператора $\hat{A}$.