Лекция 2
Теория представлений

1 Матричная форма квантовой механики

До настоящих пор мы строили расчетный аппарат квантовой механики, основываясь на линейных эрмитовых операторах. Однако возможен другой способ, основанный на представлении физических величин в виде матриц. Мы увидим, что помимо всего прочего такой подход позволит дать чисто геометрическую интерпретацию волновой функции как вектора в гильбертовом пространстве.

Начнем с того, что покажем, как произвольному линейному оператору $\hat{F}$ можно сопоставить матрицу $\mathcal{F}$. Рассмотрим для простоты случай, когда система имеет дискретный спектр стационарных состояний другого оператора $\hat{R}$, который описывает физически измеримую величину R. Далее покажем, что такой подход легко обобщается и на случай непрерывного спектра.

Пусть $\psi_n(\xi)$ представляет набор всех волновых функций соответствующих всем собственным состояниям R_n оператора $\hat{R}$. Индекс n называют *индексом состояния*. Под ξ подразумевается набор всех координат, которые описывают наше квантовое состояние. Задание оператора $\hat{F}$ означает, что сформулирован закон сопоставления произвольной функции $\psi(\xi)$ другой функции $\varphi(\xi)$

$$\varphi(\xi) = \hat{F}\psi(\xi). \tag{1}$$

Воспользуемся условием полноты набора функций $\psi_n(\xi)$ разложим по ним функции $\varphi(\xi)$ и $\psi(\xi)$

$$\psi(\xi) = \sum_n C_n\psi_n(\xi), \;\; \varphi(\xi) = \sum_m C'_m\psi_m(\xi). \tag{2}$$

При этом совокупность комплексных чисел C_n и C'_m можно представить в виде матриц–столбцев

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \\ \vdots \end{pmatrix}, \;\; \mathcal{C}' = \begin{pmatrix} C'_1 \\ C'_2 \\ \vdots \\ C'_m \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{3}$$

Очевидно, что задание наборов чисел $\{C_n\}$ и $\{C'_m\}$ полностью эквивалентно заданию функций $\varphi(\xi)$ и $\psi(\xi)$. Поэтому не теряя общности матрицы-столбцы $\mathcal{C}$ и $\mathcal{C}'$ из (3) можно рассматривать как специальную запись волновых функций $\psi(\xi)$ и $\varphi(\xi)$.

Подставим (2) в (1), затем умножим слева полученное выражение на $\psi_k^*(\xi)$ и проинтегрируем по всем координатам dV. В результате получим

$$C'_k = \sum_n F_{kn}C_n, \tag{4}$$

где

$$F_{kn} = \int dV\psi_k^*(\xi)\hat{F}\psi_n(\xi), \quad dV = d\xi_1\ldots d\xi_r \tag{5}$$

При выводе (4) мы использовали ортонормированность волновых функций $\psi_n(\xi)$:

$$\int dV \psi_m^*(\xi)\psi_n(\xi) = \delta_{mn}. \qquad (6)$$

Если представить величины F_{kn} в виде матрицы

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \dots & F_{1n} & \dots \\ F_{21} & F_{22} & \dots & F_{2n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \dots \\ F_{k1} & F_{k2} & \dots & F_{kn} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \qquad (7)$$

и воспользоваться матрицами–столбцами (3), то соотношения (4) могут быть записаны в компактной форме

$$\mathcal{C}' = \mathcal{F}\mathcal{C}. \qquad (8)$$

Конечно (8) полностью эквивалентно (1). Это означает, что одна и та же физическая величина может быть описана в квантовой механике в разных *представлениях*. Представление, которое используется в (1) называют *координатным*, а представление, которое используется в (8) называют R–представлением. Элемент матрицы (7) F_{kn} называют *матричным элементом перехода* из состояния n в состояние k.

Теперь вычислим среднее значение физической величины F в R–представлении (9)

$$< F > \equiv \int dV \psi^*(\xi)\hat{F}\psi(\xi) = \sum_{k,n} C_k^* C_n \int dV \psi_k^*(\xi)\hat{F}\psi_n(\xi) = \sum_{k,n} C_k^* F_{kn} C_n = \mathcal{C}^\dagger \mathcal{F}\mathcal{C}, \qquad (9)$$

где $\mathcal{C}^\dagger$ представляет матрицу–строку

$$\mathcal{C}^\dagger = (C_1^*, C_2^*, \dots, C_k^*, \dots). \qquad (10)$$

эрмитово сопряженную матрице–столбцу .

Условие нормировки при этом имеет вид

$$\mathcal{C}^\dagger \mathcal{C} = 1. \qquad (11)$$

Рассмотрим случай, когда $\psi_n(\xi)$ являются собственными функциями оператора $\hat{F}$. В этом случае можно говорить об операторе $\hat{F}$ заданом в F–представлении. Легко видеть, что в этом случае матрица (7) превращается в диагональную

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & f_2 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & f_n & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \qquad (12)$$

где f_1, f_2,...,f_n,... — собственные значения оператора $\hat{F}$. Нормированными собственными функциями этого оператора, которые соответствуют собственным значениями f_1, f_2, ...,

f_n, ... , будут матрицы–столбцы

$$\mathcal{C}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \mathcal{C}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \ldots, \quad \mathcal{C}_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \ldots \tag{13}$$

Отметим также, что требование эрмитовости оператора $\hat{F}$ приводит к требованию эрмитовости матрицы $\mathcal{F}$:

$$F_{kn} = F^*_{nk}. \tag{14}$$

2 Вектор состояния как вектор в гильбертовом пространстве

С математической точки зрения, матрицы–столбцы (3), которые, как уже говорилось выше, целиком эквивалентны волновой функции $\psi(\xi)$, можно рассматривать как векторы в комплексном пространстве, число измерений которого $n \to \infty$. При этом скалярное произведение двух векторов $\mathcal{C}$ и $\mathcal{C}'$ определяется как

$$(\mathcal{C}', \mathcal{C}) = \sum_{n=1}^{\infty} C'^*_n C_n. \tag{15}$$

В свою очередь волновые функции $\psi(\xi)$ и $\varphi(\xi)$ (которые соответствуют векторам $\mathcal{C}$ и $\mathcal{C}'$), также можно рассматривать как векторы гильбертова пространства со скалярным произведением

$$(\varphi, \psi) = \int dV \varphi^*(\xi)\psi(\xi). \tag{16}$$

При этом интегрирование по непрерывным переменным $d\xi_1, \ldots, d\xi_r$ соответствует суммированию по дискретным переменным в (15).

Подставляя разложения (2) в (16) и используя ортонормированность функций (6) получим, что скалярное произведение не изависит от представления:

$$(\varphi, \psi) = (\mathcal{C}', \mathcal{C}). \tag{17}$$

Рассмотрим переход от F–представления ($\psi_n(\xi)$ являются собственными функциями оператора $\hat{F}$, т.е. $\mathcal{F}$ — диагональная матрица) к $\widetilde{F}$–представлению (в котором диагональной матрицей является матрица $\widetilde{\mathcal{F}}$). Покажем, что геометрически этот переход соответствует переходу от одной системы координат в гильбертовом пространстве к другой системе координат.

Пусть $\psi_n(\xi)$ и $\widetilde{\psi}_m(\xi)$ — два набора ортонормированных собственных функций операторов $\hat{F}$ и $\hat{\widetilde{F}}$, соответственно:

$$\hat{F}\psi_n(\xi) = f_n\psi_n(\xi), \;\; \hat{\widetilde{F}}\widetilde{\psi}_n(\xi) = \tilde{f}_m\widetilde{\psi}_m(\xi). \tag{18}$$

Разложим функции $\widetilde{\psi}_m(\xi)$ по $\psi_n(\xi)$:

$$\tilde{\psi}_m(\xi) = \sum_n U_{nm}\psi_n(\xi). \tag{19}$$

При этом матричные элементы U_{nm} можно рассматривать как скалярное произведение

$$U_{nm} = (\psi_n, \widetilde{\psi}_m) = \int dV\, \psi_n^*(\xi)\widetilde{\psi}_m(\xi). \tag{20}$$

Теперь посмотрим, какие ограничения необходимо наложить на матрицу U. С этой целью распишем условия ортонормированности функций $\widetilde{\psi}_{m'}(\xi)$ и $\widetilde{\psi}_m(\xi)$

$$\int dV\, \widetilde{\psi}_{m'}^*(\xi)\widetilde{\psi}_m(\xi) = \int dV \sum_{n'} U_{n'm'}^* \psi_{n'}^*(\xi) \sum_n U_{nm}\psi_n(\xi) = \sum_n \sum_{n'} \delta_{nn'} U_{n'm'}^* U_{nm} =$$
$$= \sum_n U_{nm'}^* U_{nm} = \sum_n \left(U^\dagger\right)_{m'n} U_{nm} = \delta_{mm'}. \tag{21}$$

В матричной форме условие (21) можно записать как

$$\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} = 1 \text{ или } \mathcal{U}^\dagger = \mathcal{U}^{-1}. \tag{22}$$

Иными словами матрица $\mathcal{U}$ обязана быть унитарной.

Найдем связь между векторами состояния в F и $\tilde{F}$ представлениях. Пусть произвольная волновая функция имеет следующие разложения по собственным функциям двух операторов

$$\psi(\xi) = \sum_n C_n \psi_n(\xi) = \sum_m \widetilde{C}_m \widetilde{\psi}_m(\xi) \tag{23}$$

Используя (19), получим

$$\sum_n C_n \psi_n(\xi) = \sum_m \widetilde{C}_m U_{nm} \psi_n(\xi). \tag{24}$$

Откуда

$$C_n = \sum_m U_{nm} \widetilde{C}_m \tag{25}$$

или в матричном виде

$$\mathcal{C} = \mathcal{U}\widetilde{\mathcal{C}}. \tag{26}$$

С другой стороны, умножая (26) слева на $\mathcal{U}^{-1}$ и пользуясь унитарностью матрицы $\mathcal{U}$, получим

$$\widetilde{\mathcal{C}} = \mathcal{U}^{-1}\mathcal{C}. \tag{27}$$

Соотношения (26) и (27) показывают, что матрицу $\mathcal{U}$ можно рассматривать как матрицу вращений в бесконечномерном пространстве, а переход от одного вектора состояния $\mathcal{C}$ к другому вектору состояния $\mathcal{C}'$ соответствует переходу от одной системы координат к другой.

Найдем также закон преобразования произвольной матрицы $\mathcal{R}$ при переходе от одного представления к другому. Допустим, что эта матрица переводит вектор $\mathcal{C}$ в вектор $\mathcal{B}$

$$\mathcal{B} = \mathcal{R}\mathcal{C}. \tag{28}$$

В свою очередь пусть эти вектора связаны с другими векторами $\widetilde{\mathcal{B}}$ и $\widetilde{\mathcal{C}}$

$$\mathcal{B} = \mathcal{U}\widetilde{\mathcal{B}} \text{ и } \mathcal{C} = \mathcal{U}\widetilde{\mathcal{C}} \tag{29}$$

где $\mathcal{U}$ — унитарная матрица.

Обратный переход есть

$$\widetilde{\mathcal{B}} = \mathcal{U}^\dagger\mathcal{B} \text{ и } \widetilde{\mathcal{C}} = \mathcal{U}^\dagger\mathcal{C}. \tag{30}$$

Подставляя (29) в (28) и умножая левую и правую части полученного равенства слева на $\mathcal{U}^{-1}$ получим

$$\widetilde{\mathcal{B}} = \mathcal{U}^{-1}\mathcal{R}\mathcal{U}\widetilde{\mathcal{C}} = \mathcal{U}^{\dagger}\mathcal{R}\mathcal{U}\widetilde{\mathcal{C}} = \widetilde{\mathcal{R}}\widetilde{\mathcal{C}}, \tag{31}$$

т.е. требуемый закон есть

$$\widetilde{\mathcal{R}} = \mathcal{U}^{\dagger}\mathcal{R}\mathcal{U}. \tag{32}$$

Легко убедиться, что унитарное преобразование (32) имеет следующие свойства:

1. Оно эрмитову матрицу $\mathcal{A}$ переводит в эрмитову матрицу $\widetilde{\mathcal{A}}$. Действительно если $\widetilde{\mathcal{A}} = \mathcal{U}\mathcal{A}\mathcal{U}^{-1}$, то

$$\widetilde{\mathcal{A}}^{\dagger} = \left(\mathcal{U}\mathcal{A}\mathcal{U}^{-1}\right)^{\dagger} = \left(\mathcal{U}^{-1}\right)^{\dagger}\mathcal{A}^{\dagger}\mathcal{U}^{\dagger} = \mathcal{U}\mathcal{A}\mathcal{U}^{-1} = \widetilde{\mathcal{A}} \tag{33}$$

2. Оно сохраняет матричные уравнения, например:

$$\mathcal{A} + \mathcal{B} = \mathcal{D} \text{ переводит в } \widetilde{\mathcal{A}} + \widetilde{\mathcal{B}} = \widetilde{\mathcal{D}} \tag{34}$$

$$\mathcal{A}\mathcal{B} = \mathcal{D} \text{ переводит в } \widetilde{\mathcal{A}}\widetilde{\mathcal{B}} = \widetilde{\mathcal{D}} \text{ и т.д.} \tag{35}$$

   Пусть $\widetilde{\mathcal{A}} = \mathcal{U}\mathcal{A}\mathcal{U}^{-1}$ и $\widetilde{\mathcal{B}} = \mathcal{U}\mathcal{B}\mathcal{U}^{-1}$. Тогда

$$\widetilde{\mathcal{A}} + \widetilde{\mathcal{B}} = \mathcal{U}\mathcal{A}\mathcal{U}^{-1} + \mathcal{U}\mathcal{B}\mathcal{U}^{-1} = \mathcal{U}(\mathcal{A} + \mathcal{B})\mathcal{U}^{-1} = \mathcal{U}\mathcal{D}\mathcal{U}^{-1} = \widetilde{\mathcal{D}}. \tag{36}$$

   Аналогично можно показать справедливость (35)

$$\widetilde{\mathcal{A}}\widetilde{\mathcal{B}} = \mathcal{U}\mathcal{A}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{U}\mathcal{B}\mathcal{U}^{-1} = \mathcal{U}\mathcal{A}\mathcal{B}\mathcal{U}^{-1} = \mathcal{U}\mathcal{D}\mathcal{U}^{-1} = \widetilde{\mathcal{D}}. \tag{37}$$

3. Оно не меняет след матрицы

$$\mathrm{Tr}\mathcal{A} = \mathrm{Tr}\widetilde{\mathcal{A}} \tag{38}$$

4. Оно не меняет детерминант матрицы

$$\det \mathcal{A} = \det \widetilde{\mathcal{A}} \tag{39}$$

Из 2–го свойства в частности следует, что коммутационные соотношения между матрицами, которые описывают соответствующие физические величины, не зависят от конкретного представления.

Кроме того спектр собственных значений матриц остается неизменным при унитарных преобразованиях. Действительно, пусть f — собственное значение матрицы $\mathcal{F}$, которое соответствует собственной функции $\mathcal{C}$

$$\mathcal{F}\mathcal{C} = f\mathcal{C}. \tag{40}$$

Умножая слева это равенство на унитарную матрицу $\mathcal{U}$ получим

$$\mathcal{U}\mathcal{F}\mathcal{C} = \mathcal{U}\mathcal{F}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{U}\mathcal{C} = \widetilde{\mathcal{F}}\widetilde{\mathcal{C}} = f\mathcal{U}\mathcal{C} = f\widetilde{\mathcal{C}}. \tag{41}$$

Аналогичное свойство имеет место и для матричных элементов переходов

$$\mathcal{C}_n^{\dagger}\mathcal{F}\mathcal{C}_m = \mathcal{C}_n^{\dagger}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{U}\mathcal{F}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{U}\mathcal{C}_m = \widetilde{\mathcal{C}}_n^{\dagger}\widetilde{\mathcal{F}}\widetilde{\mathcal{C}}_m. \tag{42}$$

Таким образом заключаем, что физической величине может быть сопоставлено бесконечное множество матриц, которые отличаются друг от друга унитарным преобразованием. При этом все физические ответы не зависят от конкретного представления. Вопрос выбора представления является вопросом удобства и решается в зависимости от особенностей конкретной физической задачи.

3 Непрерывные матрицы

Пока развиваемая теория представлений оказывается неполной, т.к. она еще неприменима к задачам, когда имеется непрерывный спектр. Примером может быть спектр собственных значений импульса свободной частицы. Сейчас мы обобщим наш формализм на операторы с непрерывным спектром.

В этом случае будем рассматривать компоненты матриц–столбцов (3) C_n и C'_m, как функции от непрерывной переменной η: $C(\eta)$ и $C'(\eta)$. При этом суммирование в скалярном произведении двух векторов (15) необходимо заменить на интегрирование

$$(C', C) = \mathcal{C}'^{*}\mathcal{C} = \sum_n C'^{*}_n C_n \implies (C', C) = \int d\eta C'^{*}(\eta)C(\eta). \tag{43}$$

Здесь и далее интегрирование производится по всем значениям спектра η.

Роль матрицы $\mathcal{F}$ теперь будет играть функция от двух переменных $F(\eta, \kappa)$, причем произведение двух "матриц" $A(\eta, \eta')$ и $B(\kappa, \kappa')$ превратится в интегрирование следующего выражения

$$(\mathcal{F})_{nm} = (\mathcal{AB})_{nm} = \sum_k A_{nk}B_{km} \implies F(\eta, \kappa) = \int d\lambda A(\eta, \lambda)B(\lambda, \kappa). \tag{44}$$

Роль единичной матрицы будет играть δ–функция.

Легко видеть, что все другие результаты предыдущего раздела легко обобщаются на случай непрерывных матриц. Далее покажем это на примерах операторов координаты и импульса, но сначала следует познакомимся с полезными обозначениями Дирака для векторов состояния, которые часто используются в квантовой механике. Их удобство выяснится в дальнейшем[1].

3.1 Векторы "кэт" и "бра"

Волновую функцию ψ обозначают через символ $|\psi\rangle$, который называют "кэт"–вектор. Этот символ как-бы изображает половинку скалярного произведения двух векторов состояния, котороые мы обсуждали выше. Разница только в том, что здесь круглая скобка заменена на "треугольную". Если волновая функция соответствует определенным значениям каких-то квантовых чисел (например, в задаче о движении частицы в центральном поле такими квантовыми числами могут быть n, l и m, главное, орбитальное и магнитное квантовые числа), то тогда просто пишут $|$*квантовые числа*$\rangle$, например $|n, l, m\rangle$. Вторая "половинка" скалярного произведения сохранена за символом $\langle\psi|$ и обозначает комплексно–сопряженный вектор ψ^*. Он называется "бра"–вектором. Сами слова бра и кэт происходят от "разрезания" английского слова bracket (скобка):

$$\langle \text{bra}|\text{ket}\rangle \equiv \langle \text{bra}\cancel{c}\text{ket}\rangle\ , \tag{45}$$

в котором вертикальная черта вычеркивает букву c.

[1]Известно, что работая над созданием квантовой механики Дирак большое внимание уделял вводимым им обозначениям, т.к. осознавал, что в дальнейшем они войдут неотъемлемым образом в аппарат этой науки. "Мне приходилось придумывать символы, в которых должна содержаться информация о том, что именно важно в явной форме, чтобы при этом оставались понятными все те величины, которые без ущерба для понимания достаточно просто удержать в памяти," — писал по этому поводу П.А.М. Дирак ("Воспоминания о необычной эпохе", УФН, т.153, $\mathcal{N}$о 1, с.105 (1987)).

В матричном представлении кэт–вектор представляет столбец, а бра–вектор — строку. Скалярное произведение (16) двух векторов состояния $\psi(\xi)$ и $\psi_n(\xi)$ (где $\psi_n(\xi)$ — собственные функции оператора $\hat{F}$) запишется через кэт– и бра–векторы как

$$\langle\psi_n|\psi\rangle \equiv \langle n|\psi\rangle = \int dV \psi_n^*(\xi)\psi(\xi) \tag{46}$$

и представляет собой ни что иное, как элемент из набора коэффициентов $\{C_n\}$ разложения (2). В матричном представлении мы их записывали как матрицу–столбец $\mathcal{C}$ в формуле (3). Как уже говорилось, ее можно интерпретировать как функцию $\psi(\xi)$ в F–представлении. Геометрически скалярное произведение (46) можно интерпретировать как проекцию вектора состояния $|\psi\rangle$ на "ось" $|n\rangle$.

В том случае, если спектр оператора $\hat{F}$ непрерывен η, скалярное произведение

$$\langle\psi_\eta|\psi\rangle \equiv \langle\eta|\psi\rangle \tag{47}$$

представляет функцию $C(\eta)$ (непрерывную матрицу–столбец) и вместо суммы в разложении (2) нужно написать интеграл

$$\psi(\xi) = \int d\eta C(\eta)\psi_\eta(\xi). \tag{48}$$

Таким образом такие обозначения оказываются универсальными и могут использоваться как для дискретных, так и для непрерывных матриц.

Кэт– и бра–векторы позволяют "не задумываясь" переходить от одного представления к другому. Например, переход от F-представления к новому A–представлению (собственные значения оператора $\hat{A}$ обозначим a) запишется

$$\langle a|\psi\rangle = \begin{cases} \sum_n \langle a|n\rangle\langle n|\psi\rangle, & \text{для дискретного спектра } f_n \\ \\ \int d\eta \langle a|\eta\rangle\langle\eta|\psi\rangle, & \text{для непрерывного спектра } f_\eta \end{cases} \tag{49}$$

Можно также ввести универсальное обозначение

$$\langle a|\psi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int \langle a|f\rangle\langle f|\psi\rangle, \tag{50}$$

где суммирование/интегрирование ведется по совпадающему квантовому числу f, собственному значению оператора $\hat{F}$. Бывают также случаи, когда часть спектра дискретна, а часть непрерывна. Пример такого спектра встречался, когда рассмативалась частица, находящейся во внешнем притягивающем поле. Универсальное обозначение (50) может использоваться и в этом случае.

Рассматривая выражение

$$\sum\!\!\!\!\!\!\int |f\rangle\langle f| = 1 \tag{51}$$

как единичную матрицу можно просто переходить от одного представления к другому. Для этого достаточно вписать в соответствуюее скалярное произведение единицу и разлагая ее с помощью (51) по необходимым векторам получим требуемый ответ

$$\langle \mathrm{c}|b\rangle = \langle c|1|b\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int \langle c|f\rangle\langle f|b\rangle. \tag{52}$$

В частности скалярное произведение вектора состояния самого на себя

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int d^3x \langle\psi|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle = \int d^3x\, |\psi(\vec{x})|^2 \tag{53}$$

представляет собой ни что иное как вероятность обнаружить данное состояние во всем пространстве.

Далее посмотрим на примерах как можно продолжить такую “игру” для ряда важных операторов.

3.2 Операторы координаты и импульса

Координатное представление, это такое представление, в котором оператор координаты диагонален[2]

$$\langle\vec{x}|\hat{\vec{x}}|\vec{x}'\rangle = \vec{x}\delta(\vec{x}-\vec{x}'). \tag{54}$$

Волновая функция в этом представлении $\psi(\vec{x})$ запишется в терминах бра и кэт векторов согласно

$$\psi(\vec{x}) \equiv \langle\vec{x}|\psi\rangle. \tag{55}$$

Действие на нее оператора (54) определяется согласно (44). В результате получаем

$$\hat{\vec{x}}\psi(\vec{x}) = \int d^3x' \langle\vec{x}|\hat{\vec{x}}|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\psi\rangle = \vec{x}\int d^3x'\delta(\vec{x}-\vec{x}')\psi(\vec{x}') = \vec{x}\psi(\vec{x}), \tag{56}$$

т.е. действие оператора координаты является просто умножением на $\vec{x}$.

Теперь найдем оператор импульса в x-представлении. Будем исходить из того, что должно выполняться коммутационное соотношение между операторами координаты $\hat{x}_i$ и импульса $\hat{p}_j$:

$$\hat{p}_j\hat{x}_i - \hat{x}_i\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i}\delta_{ij} \tag{57}$$

или в матричном виде

$$\begin{aligned}
&\int d^3x'' \left\{\langle\vec{x}|\hat{p}_j|\vec{x}''\rangle\langle\vec{x}''|\hat{x}_i|\vec{x}'\rangle - \langle\vec{x}|\hat{x}_i|\vec{x}''\rangle\langle\vec{x}''|\hat{p}_j|\vec{x}'\rangle\right\} = \\
&= \int d^3x'' \left\{x_i''\delta(\vec{x}''-\vec{x}')\langle\vec{x}|\hat{p}_j|\vec{x}''\rangle - x_i\delta(\vec{x}-\vec{x}'')\langle\vec{x}''|\hat{p}_j|\vec{x}'\rangle\right\} = \\
&= -(x_i - x_i')\langle\vec{x}|\hat{p}_j|\vec{x}'\rangle = \frac{\hbar}{i}\delta(\vec{x}-\vec{x}')\delta_{ij}
\end{aligned} \tag{58}$$

Покажем, что матрица импульса, которая удовлетворяет этому соотношению, имеет вид:

$$\langle\vec{x}|\hat{p}_j|\vec{x}'\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}\delta(\vec{x}-\vec{x}'). \tag{59}$$

Действительно, подставляя это выражение в левую часть (58) получим

$$-\frac{\hbar}{i}(x_i - x_i')\frac{\partial}{\partial x_j}\delta(\vec{x}-\vec{x}') = \frac{\hbar}{i}\delta(\vec{x}-\vec{x}')\delta_{ij}, \tag{60}$$

[2]Изложение дано по книге В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин и В.А. Мямлин, Курс теоретической физики, т. II. М.: Наука, 1971.

что и требовалось доказать. При выводе (60) было использовано известное равенство

$$x\frac{d}{dx}\delta(x) = -\delta(x). \tag{61}$$

Из (59) видно, что действие матрицы импульса на функцию $\psi(\vec{x})$ сводится к оператору дифференцирования

$$\int d^3x'\langle\vec{x}|\hat{\vec{p}}|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{x}}\int d^3x'\delta(\vec{x}-\vec{x}')\langle\vec{x}'|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{x}}\psi(\vec{x}). \tag{62}$$

Рассмотрим теперь набор функций, которые являются собственными функциями матрицы (59) с собственными значениями $\vec{p}$. С этой целью введем унитарную матрицу

$$\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle = U(\vec{p},\vec{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}. \tag{63}$$

Обратное преобразование есть

$$\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = [U(\vec{p},\vec{x})]^{-1} = U^*(\vec{x},\vec{p}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}. \tag{64}$$

Преобразование (63) преобразует вектор состояния согласно

$$\begin{aligned}\psi(\vec{x}) = \langle\vec{x}|\psi\rangle \to \widetilde{\psi}(\vec{p}) &= \langle\vec{p}|\psi\rangle = \int d^3x\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle = \\ &= \int d^3xU(\vec{p},\vec{x})\psi(\vec{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\int d^3xe^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}\psi(\vec{x}),\end{aligned} \tag{65}$$

т.е. переводит волновую функцию $\psi(\vec{x})$ в ее фурье–образ.

Теперь в соответствии с общими “правилами игры” с векторами кэт и бра преобразуем матрицу (59) оператора импульса

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}|\hat{\vec{p}}|\vec{p}'\rangle &= \int d^3xd^3x'\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\hat{\vec{p}}|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\vec{p}'\rangle = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int d^3xd^3x'e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial}{\partial\vec{x}}\left[\delta(\vec{x}-\vec{x}')\right]e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\vec{x}'}.\end{aligned} \tag{66}$$

Используем правило интегрирования с производной от δ–функции

$$\int dxf(x)\delta'(x) = -f'(0) \tag{67}$$

и получим окончательно

$$\langle\vec{p}|\hat{\vec{p}}|\vec{p}'\rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\vec{p}\int d^3x'e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}\,')\vec{x}'} = \vec{p}\delta(\vec{p}-\vec{p}\,'). \tag{68}$$

Следовательно матрица оператора импульса преобразуется в диагональную матрицу, а ее действие на вектор состояния сведется к умножению на $\vec{p}$.

Теперь посмотрим как преобразуется матрица оператора координаты:

$$\begin{aligned}\langle\vec{x}|\hat{\vec{x}}|\vec{x}'\rangle \to \langle\vec{p}|\hat{\vec{x}}|\vec{p}\,'\rangle &= \int d^3xd^3x'\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\hat{\vec{x}}|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\vec{p}\,'\rangle = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int d^3xd^3x'e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}\vec{x}\delta(\vec{x}-\vec{x}')e^{+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\,'\vec{x}'} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\delta(\vec{p}-\vec{p}\,').\end{aligned} \tag{69}$$

Легко обнаружить, что его действие на вектор состояния $\widetilde{\psi}(\vec{p})$ сводится к операции дифференцирорания:

$$\int d^3p'\langle\vec{p}|\hat{\vec{x}}|\vec{p}\,'\rangle\langle\vec{p}\,'|\psi\rangle = -\frac{\hbar}{i}\int d^3p'\left[\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\delta(\vec{p}-\vec{p}\,')\right]\widetilde{\psi}(\vec{p}\,') =$$
$$= -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\int d^3p'\delta(\vec{p}-\vec{p}\,')\widetilde{\psi}(\vec{p}\,') = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\widetilde{\psi}(\vec{p}). \qquad (70)$$