Первый шаг в квантовую реальность

2012

Эта книга по математике, написанная без чрезмерных математических усложнений, в том стиле, как это принято среди физиков. Её целью является первоначальное знакомство читателя со специфической векторной алгеброй, специально разработанной выдающимся английским физиком-теоретиком Полем Дира́ком для квантовой механики.

Оказывается, если разделить физику и математику, то изучение квантовой механики значительно облегчается, поскольку снимаются неизбежные при традиционном изложении психологические затруднения. В первых главах книги рассматриваются самые простые и элементарные вещи, а затем постепенно, очень дозировано вводится более сложный материал с подробными пояснениями.

Книга предназначена для старшеклассников и студентов младших курсов высших учебных заведений.

Оглавление

Предисловие

Трудных наук нет, есть только трудные изложения.

Александр Иванович Герцен

Однажды мне довелось преподавать квантовую механику, и я старался излагать учебный материал по возможности проще, чтобы экономить силы учащихся. Так родился замысел написать нечто вроде введения в квантовую механику для домохозяек.

Теперь эта книга написана, её можно прочитать на «одном дыхании», т. е. осилить буквально за одну-две недели. Для домохозяек она сложновата, а для умных старшеклассников и студентов младших курсов — в самый раз.

Изложение начинается с самых простых и элементарных соображений по поводу матриц, простейших сведений из тригонометрии, а затем постепенно, очень дозированно вводится более сложный материал.

При этом основное внимание уделяется идеям, а многие важные, но частные вопросы остаются за кадром, поскольку с ними можно будет ознакомиться позже, при углублённом изучении предмета.

Ради наглядности рассматриваются лишь частные случаи. Читатель сам, если пожелает, выполнит очевидные обобщения. И вообще, несмотря на то, что эта книга по математике, она написана без чрезмерных математических усложнений, в том стиле, как это принято среди физиков.

Рассмотренный в книге математический аппарат находит многочисленные применения во многих областях естественных наук, например, в астрономии. Поэтому в приложении к четвёртой главе показана возможность решения задач сферической астрономии с помощью кватернионов, т. е. без привлечения понятия небесной сферы.

Нужно сказать, что книга получилась удивительная, похожая на улыбку Чеширского кота. Ставилась задача написать про квантовую механику, но квантовая механика куда-то делась, остался лишь её математический аппарат...

Тем не менее, прочитав эту книгу, читатель будет готов продолжать своё образование по более сложным руководствам, например, по книге Ф. Кемпфера (Кемпфер Ф. «Основные положения квантовой механики». — М.: «Мир», 1967), чтобы освоить самое главное: научиться мыслить квантово-механическими представлениями.

При традиционном изложении квантовой механики учащихся не оставляет острое ощущение, что квантовая механика является искусственным построением, поскольку к математическому аппарату трудно привыкнуть. Внутреннее предубеждение, протест против математического аппарата квантовой механики исчезает лишь по мере наработки навыков его применения, и, в конечном итоге, учащийся вынужден смириться.

Но испытывать психологический дискомфорт при изучении квантовой механики совсем необязательно, нужно лишь разделить математику и физику. Принцип «Разделяй и властвуй» действует не только в политике.

И тогда становится понятным, что **математический аппарат квантовой механики естественно возникает из привычной для нас классической реальности,** причём с привлечением минимума квантовых представлений, которые впервые появляются лишь под конец.

А именно, в главе 6 говорится о расщеплении пучка электронов в опыте Штерна-Герлаха на два пучка. И всё!

А далее **принцип суперпозиции, вероятностная интерпретация возникают вынужденно, чтобы любой ценой, но непротиворечиво, описать реальность.**

Квантово-механический формализм Дирака, популярно изложенный в этой книге, идеально подходит лишь для систем со спином 1/2. Обобщения на более сложные ситуации возможны, они возникают вполне естественно и описаны в главе 7, но чем дальше, тем больше встречается формальных трудностей: вырождение, проблемы существования, сходимости, полноты и многие, многие другие...

Но не математические трудности препятствуют дальнейшему продвижению вперёд. Без физики дальнейшее продвижение бессмысленно.

Имеется множество прекрасных учебников по квантовой механике, где акцент делается именно на физику. Выше я рекомендовал книгу Ф. Кемпфера. Однако будет правильно, если читатель поищет и сам найдёт тот учебник квантовой физики, который придётся ему по душе.

Если у вас возникли вопросы или замечания по поводу содержания книги, прошу написать мне через форму на сайте vestishki.ru или сразу на e-mail: alandmitr@gmail.com.

Я обязательно постараюсь ответить.

А. А. Дмитриевский

Часть I

Математическое введение

Глава 1

Просто и доступно о матрицах

Одна из формулировок квантовой механики — матричная квантовая механика В. Гейзенберга, поэтому приступаем к изучению матриц.

Матрицы при традиционном знакомстве вводятся как таблицы чисел.

При этом особых психологических затруднений не возникает:

— Ну, таблицы так таблицы. Ладно!

— Непонятно откуда взялись правила работы с матрицами?

— Пусть правила будут, какие есть, посмотрим, что получится...

Но оказывается, изучая алгебру матриц, полезно иметь в виду, что алгебра матриц естественным образом следует из связи матриц с линейными преобразованиями. Потому что, **если вдруг возникнут какие-либо затруднения или неуверенность при работе с матрицами, то от матриц всегда можно перейти к линейным преобразованиям, после чего все сомнения легко разрешатся с помощью элементарной алгебры.**

А теперь обо всём по порядку.

1.1 Линейная функция

Линейная функция названа так потому, что в декартовых координатах она изображается прямой линией. На Рис. 1.1. приведены графики линейной функции: $y = ax + b$ при некоторых значениях параметров a и b.

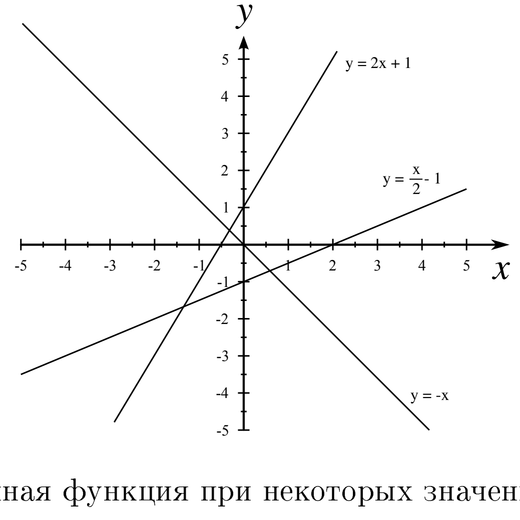

Рис. 1.1: Линейная функция при некоторых значениях параметров

Линейная функция — самая простая. Чтобы вычислить её значения, достаточно только складывать и умножать. Даже делить и возводить в квадрат не надо! А уж о тангенсах или логарифмах и речи нет.

Линейная функция играет важную роль в точных науках, потому что сложное нередко возникает в процессе естественного усложнения очень простого. А раз так, то будем усложнять!

1.2 Линейные преобразования

Линейная функция является простейшим линейным преобразованием; здесь только один аргумент x, только один свободный член b и только одна функция y.

В линейном преобразовании может быть один, два, три, ...и вообще сколько угодно аргументов и одна, две, три, ..., сколько угодно функций. А свободных членов должно быть столько же, сколько функций, но они все, или некоторые из них, могут быть нулями.

Вот пример линейного преобразования с двумя аргументами x_1, x_2, двумя функциями y_1, y_2 и двумя свободными членами b_1, b_2:

$$\begin{aligned} y_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + b_1, \\ y_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + b_2. \end{aligned}$$

Как понимать это выражение? Точно так же, как выражение $y = ax + b$, где для каждого x можно вычислить по формуле некоторое, вполне определённое значение y.

А именно, каждой паре чисел x_1 и x_2 соответствует некоторая другая пара чисел y_1 и y_2, которая вычисляется в соответствии с формулами линейного преобразования.

Линейное преобразование называется однородным, если все свободные члены равны нулю:

$$\begin{aligned} y_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2, \\ y_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2. \end{aligned}$$

1.3 Связь между линейными преобразованиями и матрицами

В дальнейшем изложение нередко будет вестись ради наглядности, для частного случая, а затем читатель сможет сам, если пожелает, выполнить очевидные обобщения, сводящиеся лишь переформулировке изложения.

Рассмотрим линейное преобразование:

$$\begin{aligned} y_1 &= x_1 - 2x_2, \\ y_2 &= 2x_1 + x_2. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Оно переводит пару чисел $(x_1,\ x_2)$ в другую пару чисел $(y_1,\ y_2)$. Будем писать коротко: $(x_1, x_2) \xrightarrow{(1.1)} (y_1, y_2)$, здесь цифра (1.1) в скобках указывает на порядковый номер формулы. В частности, $(1, 1) \xrightarrow{(1.1)} (-1, 3)$, $(-1, 2) \xrightarrow{(1.1)} (-5, 0)$ и т. п.

А теперь рассмотрим ещё одно преобразование:

$$\begin{aligned} u_1 &= v_1 - 2v_2, \\ u_2 &= 2v_1 + v_2. \end{aligned} \tag{1.2}$$

Это преобразование таково: $(v_1, v_2) \xrightarrow{(1.2)} (u_1, u_2)$. Поэтому $(1,1) \xrightarrow{(1.2)} (-1,3)$, $(-1,2) \xrightarrow{(1.2)} (-5,0)$ и т. д.

Отсюда понятно, что линейные преобразования (1.1) и (1.2) в точности одинаковы. И действительно, всё равно как обозначать одинаковые по сути переменные.

В связи с этим возникает естественное желание освободиться при оперировании линейными преобразованиями от всего случайного, несущественного и оставить только самое главное.

А главное здесь — коэффициенты при переменных: $1, -2, 2, 1$. Именно они определяют формулы, по которым одной паре чисел ставится в соответствие другая пара чисел.

Будем записывать эти цифры в виде таблицы так, чтобы можно было легко восстановить исходное линейное преобразование:

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Эта таблица и **есть квадратная матрица второго порядка, т. е. размерности 2x2**, определяющая одинаковые линейные преобразования (1.1) и (1.2).

Числа внутри матрицы называются **матричными элементами**.

Вообще-то матричные элементы могут быть не только цифрами, но и буквами, и любыми математическими выражениями.

Теперь рассмотрим пример.

Дано линейное преобразование:

$$\begin{aligned} u &= 2y - x + z, \\ v &= -x + z. \end{aligned}$$

Можно подумать, что соответствующая матрица такова:

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & \end{pmatrix}$$

Но нет, нет!

Прежде чем записывать матрицу, нужно перенумеровать или хотя бы упорядочить переменные. Пустых мест в матрице вообще не должно быть, вместо пустого места должен быть нуль.

А теперь пусть x, y, z будут первым, вторым и третьим аргументами соответственно, u и v будут первой и второй функцией, тогда линейное преобразование можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} u &= -x + 2 \cdot y + z, \\ v &= -x + 0 \cdot y + z. \end{aligned}$$

Соответствующая матрица принимает вид:

$$\begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

В этой матрице есть две одинаковые «-1» и «1». Эти одинаковые числа не одно и то же, это совершенно разные матричные элементы, потому что матричные элементы характеризуются не только своими значениями, но также номером строки и столбца.

Номер строки матричного элемента указывает на номер функции в записи однородного линейного преобразования, а номер столбца указывает на номер аргумента, при котором матричный элемент является коэффициентом.

В соответствии с этим правилом **каждой матрице соответствует одно и только одно вполне определённое однородное линейное преобразование, и, наоборот, каждому однородному линейному преобразованию соответствует одна и только одна вполне определённая матрица.**

Итак, пусть дано однородное линейное преобразование, содержащее n аргументов и m функций:

$$\begin{array}{l} y_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n, \\ y_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n, \\ \ldots \qquad\qquad \ldots \qquad\qquad \ldots \\ y_m = a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n. \end{array} \tag{1.3}$$

Тогда этому преобразованию можно поставить в соответствие прямоугольную матрицу размерности $m \times n$:

$$\mathsf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{m1} & a_{m2} & \ldots & a_{mn} \end{pmatrix} \tag{1.4}$$

И, наоборот, по матрице можно восстановить соответствующее ей однородное линейное преобразование.

Матрица называется квадратной матрицей n-го порядка, если число столбцов равно числу строк и равно числу n.

Наконец, иногда полезно считать, что число — это не просто число, а квадратная матрица первого порядка.

1.4 О том, откуда берутся математические правила

Как известно, математика возникает из реальности — за математическими абстракциями всегда что-то стоит.

Например, $1 + 1$ сколько?

— Глупый вопрос, конечно же 2!

— Однако посмотрим...

Возьмём две маленькие капли воды и начнём их сближать: $1+1$. В итоге они сольются в одну каплю. Ответ: 1.

Итак, $1 + 1 = 1$, это выражение справедливо, по крайней мере, для маленьких капель воды. Другое дело, что область применения этой арифметики мала, да и арифметика такая оказалась неспособной к продуктивному развитию. А вот если $1+1 = 2$ — то совсем другое дело.

Точно также и с матрицами.

Матрицы – это просто таблицы, состоящие из чисел. Им можно приписать любые правила, лишь бы были польза и смысл.

В частности, если матрица обслуживает решение систем линейных уравнений, например, по методу Гаусса, то её строки можно менять местами, любую строку можно умножать на любое, не равное нулю число и т. п.

Здесь мы не будем вводить таких правил действий с матрицами — нас интересует совсем другая область их применимости, поэтому и правила действий с матрицами будут другими.

В дальнейшем мы будем изучать правила действий с матрицами, которые обслуживают операции, совершаемые над линейными преобразованиями.

1.5 Простейшие действия с матрицами

1.5.1 Равенство двух матриц

Две матрицы равны, если они в точности одинаковы, т. е. содержат одинаковое число строк и столбцов, иначе говоря, их размерности одинаковы, и, кроме того, соответственные матричные элементы у них тоже одинаковы.

В противном случае матрицы будут определять различные однородные линейные преобразования, поэтому не могут считаться равными.

1.5.2 Сумма двух матриц

Пусть даны два однородных линейных преобразования:

$$\begin{aligned} y_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2, \\ y_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} z_1 &= b_{11}x_1 + b_{12}x_2, \\ z_2 &= b_{21}x_1 + b_{22}x_2 \end{aligned}$$

с соответствующими матрицами:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}.$$

Естественно определить сумму этих двух преобразований как третье преобразование:

$$\begin{aligned} s_1 &= y_1 + z_1 = (a_{11} + b_{11})x_1 + (a_{12} + b_{12})x_2, \\ s_2 &= y_2 + z_2 = (a_{21} + b_{21})x_1 + (a_{22} + b_{22})x_2. \end{aligned}$$

Отсюда получаем матрицу, соответствующую сумме линейных преобразований:

$$\begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}.$$

Итак, сумма матриц возможна, если матрицы имеют одинаковую размерность, т. е. одинаковое число столбцов и строк.

Матричные элементы суммы матриц равны сумме соответствующих матричных элементов матриц-слагаемых.

1.5.3 Умножение и деление матрицы на число

Складывая две одинаковые матрицы, получим:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2a_{11} & 2a_{12} \\ 2a_{21} & 2a_{22} \end{pmatrix}.$$

Продолжая аналогично, можно сформулировать правило умножения матрицы на любое натуральное число. Естественно обобщить это правило вообще на любые допустимые числа, действительные или комплексные.

$$\alpha \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \alpha = \begin{pmatrix} \alpha a_{11} & \alpha a_{12} \\ \alpha a_{21} & \alpha a_{22} \end{pmatrix}.$$

В результате умножения матрицы на число все её матричные элементы умножаются на это число.

Деление матрицы на число ($\alpha \neq 0$) сводится к умножению матрицы на обратное число ($1/\alpha$).

1.5.4 Вычитание матриц

Эта операция сводится к умножению вычитаемой матрицы на (–1), а затем к сложению получившихся матриц:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + (-1) \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -b_{11} & -b_{12} \\ -b_{21} & -b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} - b_{11} & a_{12} - b_{12} \\ a_{21} - b_{21} & a_{22} - b_{22} \end{pmatrix}.$$

1.5.5 Транспонирование матрицы

Операция транспонирования состоит в замене срок на столбцы и столбцов на строки, в результате чего получается новая матрица.

Это очень просто: прочитайте первую строку и запишите её в виде первого столбца, вторую строку — в виде второго столбца и т. д. Например:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 & 7 \\ 2 & 4 & 6 & 8 \end{pmatrix}.$$

Очевидно, если матрицу транспонировать дважды, то она не изменится.

1.6 Произведение матриц

1.6.1 Простое правило умножения матриц

Пусть даны последовательно выполняемые однородные линейные преобразования $(x_1, x_2) \to (y_1, y_2) \to (z_1, z_2)$, где

$$\begin{matrix} z_1 = b_{11}y_1 + b_{12}y_2 \\ z_2 = b_{21}y_1 + b_{22}y_2 \end{matrix},$$

$$\begin{matrix} y_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \\ y_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \end{matrix}.$$

Т. е. в конечном итоге пара (x_1, x_2) переходит в пару (z_1, z_2).

Такая операция называется произведением линейных преобразований, а соответствующее преобразование матриц называется произведением матриц.

Непосредственно убеждаемся, что

$$\begin{aligned} z_1 &= (b_{11}a_{11} + b_{12}a_{21})x_1 + (b_{11}a_{12} + b_{12}a_{22})x_2, \\ z_2 &= (b_{21}a_{11} + b_{22}a_{21})x_1 + (b_{21}a_{12} + b_{22}a_{22})x_2. \end{aligned}$$

Соответствующая матрица такова:

$$\begin{pmatrix} b_{11}a_{11} + b_{12}a_{21} & b_{11}a_{12} + b_{12}a_{22} \\ b_{21}a_{11} + b_{22}a_{21} & b_{21}a_{12} + b_{22}a_{22} \end{pmatrix}.$$

И, окончательно:

$$\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11}a_{11} + b_{12}a_{21} & b_{11}a_{12} + b_{12}a_{22} \\ b_{21}a_{11} + b_{22}a_{21} & b_{21}a_{12} + b_{22}a_{22} \end{pmatrix}.$$

Возникает вопрос, как сконструировать произведение матриц из исходных? Неужели нужно всегда переходить к линейным преобразованиям, выполнять необходимые алгебраические вычисления, и только потом получать искомое произведение? Нет, конечно!

Вот самый простой приём умножения матриц:

1. Левую матрицу транспонируем.
2. Тогда искомые матричные элементы получаются как всевозможные взаимные произведения столбцов левой матрицы на столбцы правой матрицы.
3. Место каждого полученного матричного элемента в искомой матрице определяется согласно правилу:
   - номер столбца левой матрицы приписывается матричному элементу в качестве номера строки;
   - номер столбца правой матрицы приписывается матричному элементу в качестве номера столбца.

Рассмотрим один пример очень подробно.

Ищем произведение:

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 & -4 \\ 4 & -3 & 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -2 & 3 \\ 0 & 4 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}.$$

Сначала транспонируем левую матрицу:

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 \\ -2 & -3 \\ 3 & 2 \\ -4 & -1 \end{pmatrix} \Bigg| \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -2 & 3 \\ 0 & 4 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}.$$

Все необходимые вычисления приведены в таблице:

№ столбца левой матрицы = № строки результата	№ столбца правой матрицы = № столбца результата	Вычисление матричных элементов
1	1	$1 \cdot 2 + (-2) \cdot (-2) + 3 \cdot 0 + (-4) \cdot (-1) = 10$
1	2	$1 \cdot (-1) + (-2) \cdot 3 + 3 \cdot 4 + (-4) \cdot 3 = -7$
2	1	$4 \cdot 2 + (-3) \cdot (-2) + 2 \cdot 0 + (-1) \cdot (-1) = 15$
2	2	$4 \cdot (-1) + (-3) \cdot 3 + 2 \cdot 4 + (-1) \cdot 3 = -8$

В итоге получаем:

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 & -4 \\ 4 & -3 & 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -2 & 3 \\ 0 & 4 \\ -1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 & -7 \\ 15 & -8 \end{pmatrix}.$$

Ещё примеры умножения матриц:

$$\begin{pmatrix} b_1 & b_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \Bigg| \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = b_1 a_1 + b_2 a_2,$$

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \end{pmatrix} \Bigg| \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 \end{pmatrix}.$$

1.6.2 Схема умножения матриц

В дальнейшем произведение матриц будет приводиться без каких-либо подробностей. Потому что это очень просто! Если убрать всё лишнее, то умножение матрицы сводится к применению простенькой схемы.

<table>
<tr><td>Левую матрицу
транспонируем</td><td>Правую матрицу
не транспонируем</td></tr>
<tr><td colspan="2" align="center">Столбцы перемножаем</td></tr>
<tr><td>Номер столбца левой матрицы равен номеру строки результата</td><td>Номер столбца правой матрицы равен номеру столбца результата</td></tr>
</table>

1.6.3 Общее правило умножения матриц

Пусть даны две матрицы A и B с матричными элементами a_{ik} и b_{kj} , здесь i, k, j — некоторые натуральные числа, тогда матричные элементы матрицы $\mathsf{C} = \mathsf{AB}$, вычисляются по формуле:

$$c_{ij} = a_{i1} b_{1j} + a_{i2} b_{2j} + \ldots + a_{in} b_{nj} = \sum_{k=1}^{k=n} a_{ik} \cdot b_{kj}. \tag{1.5}$$

Здесь знак $\sum$ означает, что выполняется суммирование по всем слагаемым, где индекс k пробегает значения от 1 до n. Но если $n = 1$, то есть умножается матрица–столбец на матрицу–строку, тогда суммирование пропадает, и остаётся только произведение.

Неудивительно, что формула (1.5) согласуется со схемой умножения матриц.

В самом деле,

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{k=n} a_{ik} \cdot b_{kj}$$

означает, что строка левой матрицы умножается на столбец правой матрицы. После транспонирования левой матрицы точно такие же результаты будут получаться после умножения столбца одной матрицы на столбец другой. Наконец, от левой матрицы получаем номер строки результата, а от правой — номер столбца.

1.6.4 Всегда ли возможно произведение матриц?

Обратимся к линейным преобразованиям.

Произведение линейных преобразований, т. е. подстановка одного преобразования в другое, возможно, если число функций в одном преобразовании в точности равно числу аргументов в другом преобразовании.

На языке матриц это означает следующее:

Произведение матриц возможно, если число строк в правой матрице равно числу столбцов в левой матрице.

Теперь обратимся к приведённому выше правилу умножения матриц. Понятно, что матрицы можно умножать, если окажется, что у левой (транспонированной) и правой матрицы число строк одинаково.

1.6.5 Произведение матриц неперестановочно

Результат произведения матриц зависит от их порядка, иначе говоря, произведение матриц в общем случае некоммутативно, т. е. неперестановочно.

Более того, может оказаться так, что до перестановки произведение матриц было возможным, а после перестановки произведение этих же матриц не существует.

Две матрицы можно перемножать в любом порядке лишь тогда, когда их размерности равны $m \times n$ и $n \times m$. — Именно при выполнении этого условия число столбцов в левой матрице всегда будет равно числу строк в правой матрице независимо от порядка их умножения. Результатом умножения будут квадратные матрицы размерностью $m \times m$ или $n \times n$. Очевидно, что если $m \neq n$, результатом будут совершенно разные матрицы, которые не могут быть равными.

Если же $m = n$, т. е. если перемножаются две квадратные матрицы с одинаковым числом строк и столбцов, то произведение таких матриц возможно в любом порядке, тем не менее, чаще всего результат тоже зависит от порядка сомножителей.

Пример:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 4 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 & 7 \\ 22 & 15 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 4 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 8 \\ 13 & 20 \end{pmatrix}.$$

И лишь в исключительных случаях произведение матриц коммутирует.

Пример:

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 5 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Пусть вас не удивляет то обстоятельство, что произведение двух матриц после перестановки может не существовать, а если и существует, то результат чаще всего зависит от порядка сомножителей.

В самом деле, матрицы определяют то или иное линейное преобразование, а линейное преобразование, в свою очередь, есть не что иное, как действие, состоящее в том, что одной группе чисел по определённым правилам ставится в соответствие другая группа чисел.

Так вот, **устройство нашего мира таково, что результат зависит от порядка действий.**

Например, можно сначала поймать рыбу, а потом сварить уху, а наоборот не получится.

И ещё пример. Можно сначала что-то выпить из стакана, а затем его помыть, или наоборот, можно сначала стакан помыть, и только потом что-то выпить из него. Результат очень разный!

1.6.6 Деление матрицы на матрицу не имеет смысла, поэтому не определено

Возможно лишь деление матрицы на число, не равное нулю, что эквивалентно умножению на обратное число.

1.7 Особые матрицы

Нулевая матрица. Это матрица, у которой все матричные элементы являются нулями.

Единичная матрица. Это квадратная матрица, у которой диагональные элементы, т. е. те у которых номер строки равен номеру столбца, равны единице, а остальные, недиагональные, равны нулю. Например:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

1.8 Матричные выражения

После того, как операции с матрицами определены, из матриц можно составлять различные выражения. Например: выражение

$$\mathsf{y} = \mathsf{A}\mathsf{x} + \mathsf{b}, \tag{1.6}$$

где

$$\mathsf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{pmatrix}, \qquad \mathsf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix}, \qquad \mathsf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_m \end{pmatrix},$$

$$\mathsf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \tag{1.7}$$

является очень краткой и экономной записью любого неоднородного линейного преобразования, содержащего n аргументов, m функций и m свободных членов:

$$\begin{array}{l} y_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n + b_1, \\ y_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n + b_2, \\ \dots \qquad\qquad \dots \qquad\qquad \dots \\ y_m = a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n + b_m. \end{array} \tag{1.8}$$

где a_{ij} — коэффициенты при аргументах x_j, а b_i — свободные члены, причём $i = 1, \ldots, m$, $j = 1, \ldots, n$.

1.9 Транспонирование матричных выражений

Нетрудно непосредственно убедиться, что операция умножения матрицы на число или операция вычисления суммы (разности) матриц перестановочны с операцией транспонирования.

Т. е. можно сначала умножить матрицу на число, а потом транспонировать результат, или можно сначала транспонировать матрицу, а затем умножить её на то же самое число. Результат будет одинаков.

Или можно сначала сложить две матрицы, а затем транспонировать результат, или можно сначала транспонировать матрицы, а потом их складывать. Результат тоже будет одинаков.

Что касается умножения матриц, то здесь ситуация иная; чтобы исследовать её, воспользуемся схемой умножения матриц.

Первый случай:

Произведение матриц $\mathsf{A} \cdot \mathsf{B}$:	
Левую матрицу A транспонируем: A^T	Правую матрицу B не транспонируем: B
Столбцы перемножаем	
Номер столбца левой матрицы равен номеру **строки результата**	Номер столбца правой матрицы равен номеру **столбца результата**

Второй случай:

Произведение матриц $\mathsf{B}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{A}^\mathsf{T}$:	
Левую матрицу B^T транспонируем: $(\mathsf{B}^\mathsf{T})^\mathsf{T} = \mathsf{B}$	Правую матрицу A^T не транспонируем: A^T
Столбцы перемножаем	
Номер столбца левой матрицы равен номеру **строки результата**	Номер столбца правой матрицы равен номеру **столбца результата**

В первом случае столбцы матрицы A^T умножаются на столбцы матрицы B. Во втором случае столбцы матрицы B умножаются на столбцы матрицы A^T. Результат умножения не зависит от порядка сомножителей, поэтому можно умножать $\mathsf{A} \cdot \mathsf{B}$ или $\mathsf{B}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{A}^\mathsf{T}$, значения матричных элементов получаются одинаковыми.

Теперь рассмотрим матричный элемент произведения $\mathsf{A} \cdot \mathsf{B}$, расположенный в p-ой строке и q-м столбце. Это значит, что этот элемент получился при перемножении p-ого столбца матрицы A^T и q-ого столбца матрицы B.

Второй случай отличается от первого тем, что матрицы A^T и B переставлены местами. Т. е. при обратном порядке матриц тот же самый матричный элемент будет расположен в p-м столбце результата и, соответственно, в его q-ой строке: строки и столбцы поменялись местами. Иначе говоря, произведения $\mathsf{A} \cdot \mathsf{B}$ и $\mathsf{B}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{A}^\mathsf{T}$ взаимно транспонированы:

$$(\mathsf{A} \cdot \mathsf{B})^\mathsf{T} = \mathsf{B}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{A}^\mathsf{T}. \tag{1.9}$$

Итак, **при транспонировании произведений матриц необходимо сначала транспонировать матрицы-сомножители, а затем перемножить их в обратном порядке.**

В качестве примера транспонируем матричное выражение (1.6):

$$\mathsf{y}^\mathsf{T} = \mathsf{x}^\mathsf{T}\mathsf{A}^\mathsf{T} + \mathsf{b}^\mathsf{T},$$

здесь y^T, x^T, b^T теперь не матрицы-столбцы, а матрицы-строки. Это матричное соотношение и соотношение (1.6) задают одно и то же линейное преобразование (1.8).

И вообще, **исходное и транспонированное матричное выражение всегда изображают одно и то же линейное преобразование.**

1.10 Основные действия с матрицами, итоги

Если бы вы изучали систематический курс матричного исчисления, то наверняка узнали бы много разных слов, вроде «ассоциативность сложения и умножения матриц», «дистрибутивность умножения матриц относительно сложения» и т. п., а также встретились бы с формулами, подробно расписывающими свойства операций с матрицами.

Например, с такими:

1. Операции сложения матриц и умножения матрицы на число обладают следующими свойствами (при условии, что такие операции возможны):

1.1. $\mathsf{A} + \mathsf{B} = \mathsf{B} + \mathsf{A}$;

1.2. $\mathsf{A} + (\mathsf{B} + \mathsf{C}) = (\mathsf{A} + \mathsf{B}) + \mathsf{C}$;

1.3. $\mathsf{A} + \mathsf{O} = \mathsf{O} + \mathsf{A} = \mathsf{A}$;

1.4. $\mathsf{A} - \mathsf{A} = \mathsf{O}$;

1.5. $\alpha(\mathsf{A} + \mathsf{B}) = \alpha\mathsf{A} + \alpha\mathsf{B}$;

1.6. $(\alpha + \beta)\mathsf{A} = \alpha\mathsf{A} + \beta\mathsf{A}$;

1.7. $\alpha(\beta\mathsf{A}) = (\alpha\beta)\mathsf{A}$.

2. Операции умножения матриц и транспонирования матричных выражений обладают следующими свойствами (при условии, что такие операции возможны):

2.1. $\mathsf{A}(\mathsf{BC}) = (\mathsf{AB})\mathsf{C}$;

2.2. $\mathsf{A}(\mathsf{B} + \mathsf{C}) = \mathsf{AB} + \mathsf{AC}$;

2.3. $(\mathsf{A} + \mathsf{B})\mathsf{C} = \mathsf{AC} + \mathsf{BC}$;

2.4. $\alpha(\mathsf{AB}) = (\alpha\mathsf{A})\mathsf{B} = \mathsf{A}(\alpha\mathsf{B})$;

2.5. $\mathsf{A} \cdot \mathsf{O} = \mathsf{O} \cdot \mathsf{A} = \mathsf{O}$;

2.6. $\mathsf{A} \cdot \mathsf{E} = \mathsf{E} \cdot \mathsf{A} = \mathsf{A}$;

2.7. $(\mathsf{A} + \mathsf{B})^\mathsf{T} = \mathsf{A}^\mathsf{T} + \mathsf{B}^\mathsf{T}$;

2.8. $(\alpha\mathsf{A})^\mathsf{T} = \alpha\mathsf{A}^\mathsf{T} = \mathsf{A}^\mathsf{T}\alpha$;

2.9. $(\mathsf{A} \cdot \mathsf{B})^\mathsf{T} = \mathsf{B}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{A}^\mathsf{T}$;

2.10. $(\mathsf{A} \cdot \mathsf{B} \cdot \mathsf{C})^\mathsf{T} = \mathsf{C}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{B}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{A}^\mathsf{T}$.

Здесь A, B и C — любые произвольные матрицы, E и O — единичная и нулевая матрица соответственно, α и β — произвольные числа.

Все перечисленные формулы легко доказываются. Но при начальном знакомстве с матрицами не морочьте себе всем этим голову. Потому что с матрицами можно обращаться так же как с привычными для нас числами, за исключением нескольких существенных различий, о которых необходимо помнить:

- сумма, разность и произведение матриц существуют не всегда,
- деление матриц не определено,
- произведение квадратных матриц чаще всего не коммутативно,
- единичная матрица при умножении играет в матричном исчислении такую же роль, как число 1 при аналогичных действиях с числами,
- нулевая матрица играет в матричном исчислении такую же роль, как число 0 при аналогичных действиях с числами,
- при транспонировании произведения матриц нужно не только транспонировать каждую матрицу, но, кроме того, необходимо обратить порядок следования матриц–сомножителей.

Наконец, обратите особое внимание на первую формулу из второй группы:

$$\mathsf{A}(\mathsf{BC}) = (\mathsf{AB})\mathsf{C}. \tag{1.10}$$

Она выражает ассоциативность матриц относительно умножения. Это значит, что можно сначала вычислить произведение BC, а затем слева умножить на A, или сначала вычислить AB, а потом справа умножить на C, — результат будет одинаков.

И вообще, **матрицы в любом их произведении можно группировать как угодно.**

1.11 Обращение матриц

1.11.1 Обращение линейного преобразования в простейшем случае

Чтобы обратить линейное преобразование, нужно, чтобы число аргументов было равно числу функций.

Вот простейший пример, когда это требование нарушается:

$y = 2x_1 + x_2$.

Зная аргументы, можно однозначно вычислить функцию, но однозначно восстановить аргументы по значениям функции невозможно.

На языке матриц это означает, что **обращение допускают лишь квадратные матрицы.**

Рассмотрим вопрос об обращении матриц подробнее.

Пусть дано линейное преобразование

$$y_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2,$$
$$y_2 = a_{21}x_2 + a_{22}x_2,$$

преобразующее пару чисел x_1 и x_2 в пару чисел y_1 и y_2.

Соответствующая матрица имеет вид:

$$\mathsf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}.$$

Возникает вопрос, возможно ли обратное преобразование?

Чтобы ответить на этот вопрос, умножим первое уравнение на a_{21}:

$$a_{21}y_1 = a_{21}a_{11}x_1 + a_{21}a_{12}x_2.$$

Второе уравнение умножим на a_{11}:

$$a_{11}y_2 = a_{11}a_{21}x_1 + a_{11}a_{22}x_2.$$

Наконец, исключим из них x_1, вычитая второе уравнение из первого. И получим:

$$a_{21}y_1 - a_{11}y_2 = a_{21}a_{12}x_2 - a_{11}a_{22}x_2 = -(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})x_2.$$

Аналогично, умножая первое уравнение на a_{22}, а второе уравнение на a_{12} и исключая x_2 из формул, получим:

$$a_{22}y_1 - a_{12}y_2 = (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})x_1.$$

Итак, обратное преобразование имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} x_1 &= \tfrac{a_{22}}{a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}} y_1 + \tfrac{-a_{12}}{a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}} y_2, \\ x_2 &= \tfrac{-a_{21}}{a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}} y_1 + \tfrac{a_{11}}{a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}} y_2. \end{aligned} \tag{1.11}$$

Отсюда понятно, что обратное преобразование возможно при условии, что некоторое число, а именно: $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \neq 0$.

Это число называется определителем или, иначе, детерминантом матрицы, и, в отличие от матрицы, которая изображается с круглыми скобками, определитель ограничен двойными прямыми линиями, но чаще всего одиночными прямыми линиями:

$$\Delta = \mathrm{Det}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}.$$

Итак, обратное преобразование $(y_1, y_2) \longrightarrow (x_1, x_2)$ принимает вид:

$$\begin{aligned} x_1 &= \tfrac{a_{22}}{\Delta} y_1 + \tfrac{-a_{12}}{\Delta} y_2, \\ x_2 &= \tfrac{-a_{21}}{\Delta} y_1 + \tfrac{a_{11}}{\Delta} y_2, \qquad \Delta \neq 0. \end{aligned} \tag{1.12}$$

Отсюда получаем обратную матрицу:

$$\mathsf{A}^{-1} = \frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix}. \tag{1.13}$$

1.11.2 Правила вычисления определителей

А теперь сформулируем правила вычисления определителей, которые понадобятся в дальнейшем.

Правило вычисления определителя второго порядка, сконструированного из квадратной матрицы 2×2, очень простое: произведение на главной диагонали берётся со знаком «$+$», на второстепенной со знаком «$-$», затем всё суммируется:

$$\Delta = \mathrm{Det}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}. \tag{1.14}$$

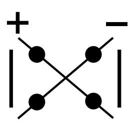

Рис. 1.2: Правило вычисления определителя второго порядка

К понятию определителя третьего порядка можно прийти, рассматривая линейное преобразование с тремя аргументами и тремя функциями, подобно тому, как только что было обращено линейное преобразование с двумя аргументами и двумя функциями. Вычисления довольно громоздкие, поэтому они опущены. Оказывается, что определитель третьего порядка представляет собой выражение:

$$\Delta = \mathrm{Det}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} =$$

$$= a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{21}a_{32}a_{13} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{11}a_{32}a_{23}. \qquad (1.15)$$

Столь громоздкую формулу для вычисления определителя 3-го порядка можно восстановить с помощью правила Саррюса, согласно которому есть три слагаемых со знаком плюс:

- произведение элементов, расположенных на главной диагонали, т. е. диагонали, направленной от левого верхнего угла к правому нижнему углу,
- два произведения элементов, расположенных по ходу треугольников, одна из сторон которых параллельна главной диагонали.

Ещё три слагаемых берутся со знаком минус; они получаются аналогично, исходя из второстепенной диагонали.

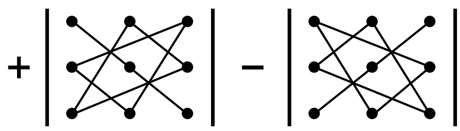

Рис. 1.3: Правило Саррюса для вычисления определителя третьего порядка

Определители более высоких порядков вычисляются приведением по определённым правилам, которые мы здесь не изучаем, к определителям более низкого порядка. В конечном итоге все определители сводятся к определителям второго и третьего порядка.

1.11.3 Свойства обратных матриц

Квадратная матрица называется невырожденной, если её определитель не равен нулю ($\Delta \neq 0$), и вырожденной, если он равен нулю ($\Delta = 0$).

Выше был получен следующий результат: **только невырожденные квадратные матрицы 2×2 допускают обращение.**

Оказывается, что это свойство обратных матриц дословно обобщается на случай любых квадратных матриц.

Теперь возникает вопрос: коммутирует обратная матрица с исходной или нет?

Допустим, что не коммутирует, это значит, что для некоторой невырожденной квадратной матрицы существуют две обратные матрицы, $\mathsf{A}_{\text{Л}}^{-1}$ и $\mathsf{A}_{\text{Пр}}^{-1}$, такие, что

$$\mathsf{A}_{\text{Л}}^{-1} \cdot \mathsf{A} = \mathsf{E}, \qquad \mathsf{A} \cdot \mathsf{A}_{\text{Пр}}^{-1} = \mathsf{E}.$$

Умножим первое из этих выражений на $\mathsf{A}_{\text{Пр}}^{-1}$: а затем воспользуемся ассоциативностью произведения матриц (1.10):

$$\mathsf{A}_{\text{Л}}^{-1} \cdot (\mathsf{A} \cdot \mathsf{A}_{\text{Пр}}^{-1}) = \mathsf{E} \cdot \mathsf{A}_{\text{Пр}}^{-1},$$
$$\mathsf{A}_{\text{Л}}^{-1} \cdot \mathsf{E} = \mathsf{A}_{\text{Л}}^{-1} = \mathsf{A}_{\text{Пр}}^{-1}.$$

Пришли к противоречию с исходной посылкой о неравенстве левой и правой обратных матриц. Противоречие означает ложность исходной посылки.

Из того, что левая и правая обратные матрицы совпадают, т. е. $\mathsf{A}_{\text{Л}}^{-1} = \mathsf{A}_{\text{Пр}}^{-1} = \mathsf{A}^{-1}$, следует, что **обратная матрица коммутирует, иначе говоря, перестановочна, с исходной**:

$$\mathsf{A}^{-1} \cdot \mathsf{A} = \mathsf{A} \cdot \mathsf{A}^{-1} = \mathsf{E}.$$

Более подробно обращение матриц, правила вычисления определителей высоких порядков мы изучать не будем. Потому что нам придётся обращать особые матрицы: ортогональные, унитарные. Их обращение сводится к применению довольно простых операций. А определители высоких порядков нам встречаться не будут.

1.12 Две полезные теоремы

1.12.1 Об определителе транспонированной матрицы

$$\mathrm{Det}\mathsf{A} = \mathrm{Det}\mathsf{A}^{\mathsf{T}}. \tag{1.16}$$

Определитель матрицы в результате её транспонирования не меняется.

1.12.2 Теорема умножения определителей

$$\mathrm{Det}(\mathsf{AB}) = \mathrm{Det}\mathsf{A} \cdot \mathrm{Det}\mathsf{B}. \tag{1.17}$$

Определитель произведения двух матриц равен произведению определителей этих матриц. Данное утверждение очевидным образом обобщатся на случай любого числа матриц.

Эти теоремы нам понадобятся в дальнейшем. К сожалению, очень простые доказательства невозможны, поэтому теоремы придётся принять на веру.

Впрочем, истинность этих теорем в случае квадратных матриц второго порядка легко устанавливается непосредственно.

1.13 Похвальное слово линейной алгебре

В линейной алгебре изучается множество полезных вещей: матрицы, определители, системы линейных уравнений, всевозможные линейные пространства и т. п. Поэтому основательного знакомства с линейной алгеброй, в конечном итоге, не избежать.

И вообще, **линейная алгебра, наряду с математическим анализом, является базовым математическим курсом, которым должен хорошо владеть любой математик, физик и инженер.**

Глава 2

Коротко о тригонометрических функциях

Чтобы читать эту книгу, нужно знать хотя бы немного тригонометрию. Далее рассматриваются основные свойства тригонометрических функций, причём лишь самые главные — только те, что понадобятся в дальнейшем.

Слово тригонометрический, тригонометрия произошло от греч. trigonos треугольник и metreo — мерю, и дословно означает измерение треугольников. Поэтому начнём с рассмотрения самого простого треугольника — прямоугольного.

2.1 Тригонометрия прямоугольного треугольника

2.1.1 Теорема Пифагора

Теорема Пифагора справедлива лишь для прямоугольных треугольников, т. е. для треугольников, у которых один угол прямой, а остальные два — острые:

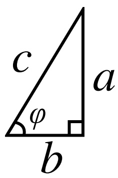

Рис. 2.1: Прямоугольный треугольник

Катеты a и b лежат напротив острых углов, гипотенуза c лежит напротив прямого угла.

Формулировка теоремы Пифагора. **Площадь квадрата, построенного на гипотенузе, равна сумме площадей квадратов, построенных на катетах:**

$$a^2 + b^2 = c^2.$$

Простейшее доказательство теоремы Пифагора показано на Рис. 2.2.

Из двух равновеликих квадратов площадью $(a + b)^2$ вырезаются четыре одинаковых прямоугольных треугольника (они серые). Следовательно, оставшиеся площади (они помечены белым) тоже равновелики. Что и требовалось доказать.

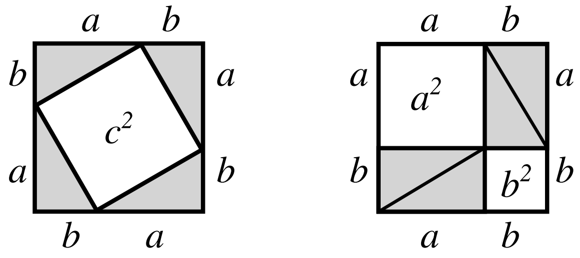

Рис. 2.2: К доказательству теоремы Пифагора

2.1.2 Формула вычисления расстояний между двумя точками на плоскости

Эта формула является важным следствием из теоремы Пифагора.

Пусть даны две точки на плоскости: $\mathsf{A}(x_1, y_1)$ и $\mathsf{B}(x_2, y_2)$.

В треугольнике ABC сторона $\mathsf{AB} = d$ является гипотенузой, а катеты AC и BC соответственно равны $(x_2 - x_1)$ и $(y_2 - y_1)$.

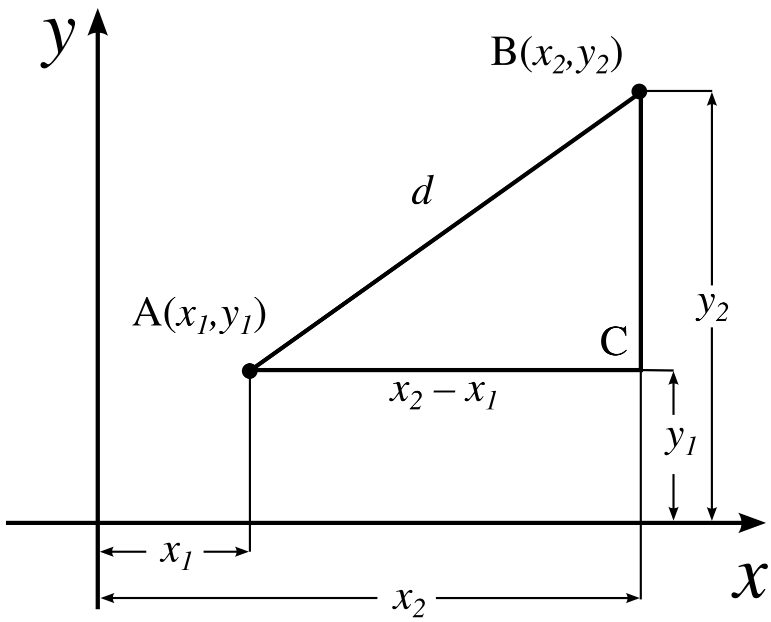

Рис. 2.3: Расстояние между двумя точками на плоскости

Поэтому согласно теореме Пифагора квадрат длины гипотенузы вычисляется по формуле:

$$d^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 \ ,$$

и, окончательно:

$$d = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}. \tag{2.1}$$

2.1.3 Определение тригонометрических функций

Тригонометрические функции определяются через отношение катетов друг к другу или к гипотенузе.

Синусом φ называется отношение противолежащего катета к гипотенузе (см. Рис. 2.1):

$$\sin\varphi = \frac{a}{c}. \tag{2.2}$$

Косинусом φ называется отношение прилежащего катета к гипотенузе:

$$\cos\varphi = \frac{b}{c}. \tag{2.3}$$

Тангенсом φ называется отношение противолежащего катета к прилежащему:

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{a}{b} = \frac{\sin\varphi}{\cos\varphi}. \tag{2.4}$$

Котангенсом φ называется отношение прилежащего катета к противолежащему:

$$\operatorname{ctg}\varphi = \frac{b}{a} = \frac{\cos\varphi}{\sin\varphi}. \tag{2.5}$$

Наконец, иногда применяются секанс и косеканс:

$$\sec\varphi = \frac{1}{\cos\varphi}, \tag{2.6}$$

$$\operatorname{cosec}\varphi = \frac{1}{\sin\varphi}, \tag{2.7}$$

2.1.4 Тригонометрические функции 30°, 45° и 60°

Рассмотрим равнобедренный прямоугольный треугольник, у которого острые углы равны 45° (т. е. $\pi/4$), а гипотенуза равна 1. Обозначим катеты через x, тогда по теореме Пифагора $x^2 + x^2 = 1$ и $x = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Разделив на длину гипотенузы, т. е. на единицу, получим:

$$\sin\ 45^\circ = \cos 45^\circ = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Отсюда тангенс 45° равен котангенсу 45° и равен единице.

Теперь вычислим основные тригонометрические функции для углов 30° (т. е. $\pi/6$) и 60°(т. е. $\pi/3$).

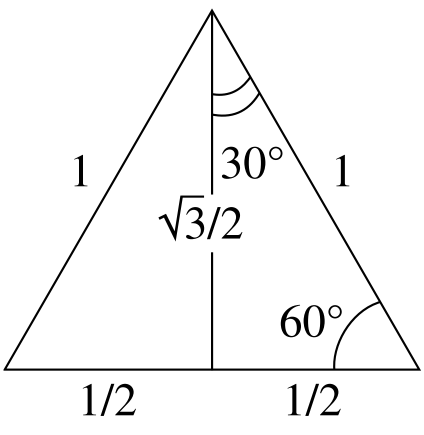

Рис. 2.4: Равносторонний треугольник

Пусть дан равносторонний треугольник со сторонами, равными 1 (см. Рис. 2.4). Разделим его высотой, которая является также медианой и биссектрисой, на два прямоугольных треугольника. Их гипотенузы равны 1, один из катетов равен 1/2, тогда высота, т. е. другой катет, вычисляется согласно теореме Пифагора: $\sqrt{1-\left(\frac{1}{2}\right)^2}=\frac{\sqrt{3}}{2}$.

Отсюда легко вычисляются значения всех тригонометрических функций:

$$\sin 30^\circ = \cos 60^\circ = \frac{1}{2},$$

$$\cos 30^\circ = \sin\ 60^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2},$$

$$\operatorname{tg}\ 30^\circ = \operatorname{ctg}\ 60^\circ = \frac{1}{\sqrt{3}},$$

$$\operatorname{ctg}\ 30^\circ = \operatorname{tg}\ 60^\circ = \sqrt{3}.$$

Как мы здесь убедились, заново вычислять тригонометрические функции 30°, 45° и 60° значительно проще, чем навсегда запомнить их значения.

2.1.5 Ещё одно важное следствие из теоремы Пифагора

Вычислим выражение:

$$\sin^2\varphi + \cos^2\varphi = \left(\frac{a}{c}\right)^2 + \left(\frac{b}{c}\right)^2 = \frac{a^2+b^2}{c^2} = 1.$$

Итак, из теоремы Пифагора получаем очень важное равенство:

$$\sin^2\varphi + \cos^2\varphi = 1.$$

И это равенство, и приведённые выше определения тригонометрических функций имеют смысл пока лишь для острых углов, потому что в прямоугольном треугольнике все углы, за исключением прямого угла, острые. Оказывается, **возможны обобщения на случай любых углов**.

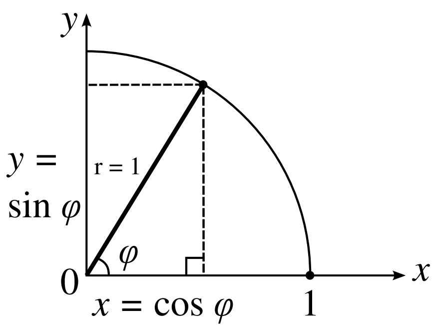

Рис. 2.5: Тригонометрические функции, как координаты

2.2 Основные свойства тригонометрических функций

2.2.1 Обобщение тригонометрических функций на случай любых углов

Из рисунка 2.5, где изображён прямоугольный треугольник с гипотенузой, равной единице, понятно, что косинус является проекцией гипотенузы на ось абсцисс (Ox), а синус является проекцией гипотенузы на ось ординат (Oy), причём гипотенуза является также радиусом единичной окружности, $r = 1$.

Всё это правильно, но пока только для острых углов, когда гипотенуза, т. е. радиус, расположены в первой четверти. Обобщение ситуации на случай любых углов очевидным образом следует из рисунка 2.6.

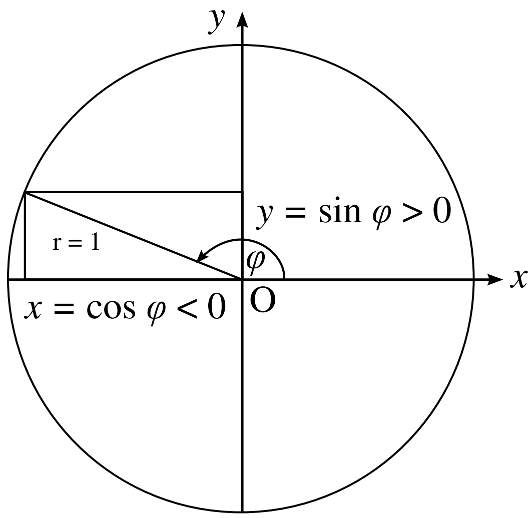

Рис. 2.6: Обобщение на случай любых углов

А именно, для любых углов косинус — проекция единичного радиуса на ось абсцисс (Ox), синус — проекция единичного радиуса на ось ординат (Oy), причём в тех случаях, когда проекция попадает в отрицательную область координатных осей, функциям приписывается знак минус.

Иными словами косинус — абсцисса (x), а синус — ордината (y) той точки единичного радиуса, которая наиболее удалена от начала координат, следовательно, $x^2 + y^2 = 1$. Отсюда понятно, что равенство

$$\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi = 1$$

справедливо для любых углов.

Все прочие тригонометрические функции выражаются через синус и косинус согласно ранее введённым формулам: (2.4), (2.5), (2.6), (2.7).

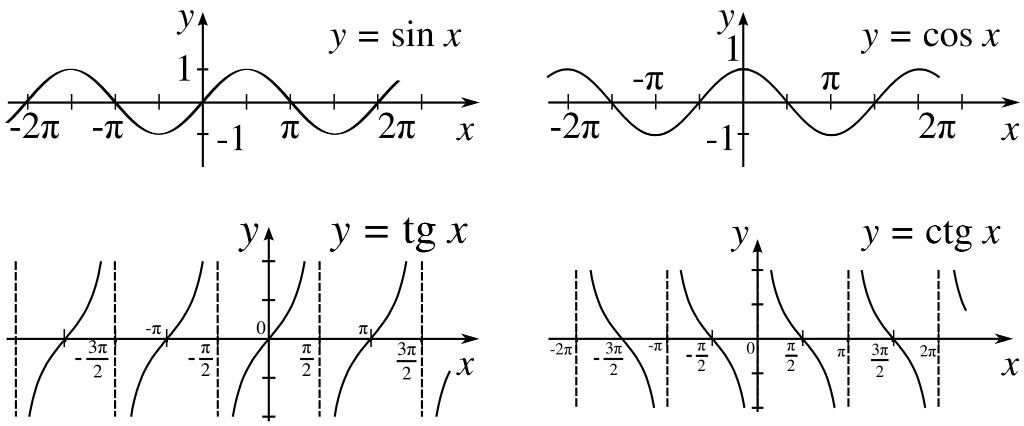

Рис. 2.7: Графики синуса, косинуса, тангенса и котангенса

2.2.2 Графики и наиболее важные свойства основных тригонометрических функций

Функция	Область определения	Область значений	Период, T	Чётность
$y = \sin x$	$(-\infty, +\infty)$	$[-1, +1]$	$T = 2\pi$	Нечётная
$y = \cos x$	$(-\infty, +\infty)$	$[-1, +1]$	$T = 2\pi$	Чётная
$y = \operatorname{tg} x$	$(-\infty, +\infty)$, за исключением точек $n\pi + \pi/2$, здесь n любое целое число.	$(-\infty, +\infty)$	$T = \pi$	Нечётная
$y = \operatorname{ctg} x$	$(-\infty, +\infty)$, за исключением точек $n\pi$, здесь n любое целое число.	$(-\infty, +\infty)$	$T = \pi$	Нечётная

Аргументом тригонометрических функций является величина угла, измеряемая, чаще всего, в радианной или градусной мере. Полная окружность составляет $360^\circ = 2\pi$, половина окружности — $180^\circ = \pi$, четверть — $90^\circ = \pi/2$, т. е. зависимость прямо пропорциональная.

Определение:

Периодом функции называется такое наименьшее число T, что $f(x \pm T) = f(x)$, для любых x из области определения функции.

Определение:

Функция $f(x)$ называется **чётной**, если $f(-x) = f(x)$, и **нечётной**, если $f(-x) = -f(x)$ для любых x из области определения функции.

График чётной функции симметричен относительно оси ординат, а график нечётной функции симметричен относительно начала координат.

Большинство функций не являются ни чётными, ни нечётными, они являются суммой двух слагаемых:

$$f(x) = [f(x) + f(-x)]/2 + [f(x) - f(-x)]/2.$$

Здесь первое слагаемое — чётная часть, второе слагаемое — нечётная часть.

Основные тригонометрические функции имеют вполне определённую чётность. Чётность косинуса и нечётность синуса легко усматривается из их определений. Нечётность тангенса и котангенса следует из того, что любое отношение, составленное из двух функций, чётной и нечётной, есть функция нечётная.

2.2.3 Мнемонические правила для формул приведения

Формулы приведения позволяют выразить значения тригонометрических функций любых углов через значения тригонометрических функций углов первой четверти.

Например, пусть требуется найти $\cos(\pi + \alpha)$:

$$\cos(\pi + \alpha) = \cos\pi \cdot \cos\alpha - \sin\pi \cdot \sin\alpha = (-1) \cdot \cos\alpha - 0 \cdot \sin\alpha = -\cos\alpha.$$

Здесь мы применили формулу (3.11) для косинуса суммы двух углов, выведенную в следующей главе; равенства $\cos\pi = -1$, а $\sin\pi = 0$, следуют непосредственно из определений косинуса и синуса.

Чтобы избежать необходимости пользоваться подобными расчётами, применяют формулы приведения, причём лучше применять не сами формулы, а мнемонические правила, которые дают требуемый результат:

1. Тригонометрические функции периодические, поэтому добавляя или вычитая $2\pi n$, здесь n — любое целое число, приводим аргумент функции в пределы от 0 до 2π.

2. Если вычисляется тригонометрические функции углов $\pi/2 \pm \alpha$ или $3\pi/2 \pm \alpha$, то синус меняется на косинус, косинус на синус, тангенс на котангенс, котангенс на тангенс. В случае углов $\pi \pm \alpha$ или $2\pi - \alpha$ функции остаются неизменными, т. е. синус остаётся синусом и т. п.

3. Знак результата такой же, как у исходной функции в той четверти, в какую попадает исходный угол.

Например: $\cos(\pi + \alpha) = -\cos\alpha$. Косинус остаётся косинусом, потому что π, а не $\pi/2$ или $3\pi/2$. Исходный угол $(\pi + \alpha)$ в третьей четверти, где косинус – исходная функция – отрицательна, поэтому знак минус.

2.3 Что обязательно нужно помнить о тригонометрических функциях

Прежде всего — обобщённое определение синуса и косинуса, а также определение тангенса и котангенса.

Отсюда сразу же следует, что, например, косинус в четвёртой четверти положителен, а синус отрицателен, или синус 180° равен нулю, а косинус равен минус единице, и т. п.

Полезно также уметь рисовать графики синуса, косинуса, тангенса и котангенса с обязательным указанием значений на осях абсцисс и ординат, так, как это показано на приведённых выше рисунках.

Очень важная формула:

$$\sin^2\varphi + \cos^2\varphi = 1. \tag{2.8}$$

И ещё формулы (3.11), (3.12), выведенные в следующей главе:

$$\cos(\varphi + \psi) = \cos\varphi\cos\psi - \sin\varphi\sin\psi,$$
$$\sin(\varphi + \psi) = \sin\varphi\cos\psi + \cos\varphi\sin\psi.$$

Эти две формулы можно легко восстановить из равенства (3.10):

$$\cos(\varphi + \psi) + i\sin(\varphi + \psi) = (\cos\varphi + i\sin\varphi)(\cos\psi + i\sin\psi).$$

Кроме того, полезно помнить о чётности-нечётности тригонометрических функций и знать их периоды.

Наконец, полезны также мнемонические правила для формул приведения, которые позволяют выразить значения тригонометрических функций любых углов через значения тригонометрических функций углов первой четверти.

Вот, пожалуй, и всё!

Посмотрите, сколько всяких тригонометрических формул в справочнике! Но почти все основные формулы легко получаются за одно-два действия из тех соотношений, которые мы рассмотрели. Поэтому проще всего тригонометрические формулы не заучивать, а выводить их по мере необходимости.

Конечно, не мешало бы знать тригонометрию получше, но здесь приведён необходимый минимум. Если при дальнейшем чтении что-либо понадобится дополнительно, то будут даны необходимые разъяснения.

Глава 3

Комплексные числа и повороты на плоскости

3.1 Традиционное введение комплексных чисел

Вспомним, как решается квадратное уравнение выделением полного квадрата:

$$z^2 + pz + q = 0,$$

$$\left(z + \frac{p}{2}\right)^2 = \frac{p^2}{4} - q,$$

$$z + \frac{p}{2} = \pm\sqrt{\frac{p^2}{4} - q}.$$

Выражение $\mathcal{D} = \frac{p^2}{4} - q$ называется дискриминантом квадратного уравнения. Тогда

$$z = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\mathcal{D}}.$$

Если дискриминант $\mathcal{D} > 0$, то есть два решения.

Если $\mathcal{D} = 0$, то есть только одно решение.

А когда $\mathcal{D} < 0$, нет ни одного решения.

Так было до тех пор, пока не начиналось изучение комплексных чисел.

И тогда нас начинали уговаривать, дескать, существует особое число, такое, что $i^2 = -1$. Поэтому вдруг оказывается, что если $\mathcal{D} < 0$, тоже есть два решения:

$$z = -\frac{p}{2} \pm i\sqrt{|D\,|}.$$

Приходится смириться с тем, что существуют какие-то особые числа с квадратным корнем из минус единицы.

Такие числа называются комплексными, их алгебраическая форма записи такова:

$$z = x + yi. \tag{3.1}$$

здесь x и y некоторые действительные числа.

В прошлом математики вынуждены были оперировать комплексными числами, но относились к ним очень настороженно.

В 1702 году Лейбниц писал: "Мнимые числа — это прекрасное и чудесное убежище божественного духа, почти что амфибия бытия с небытием".

Несмотря на то, что квадратный корень из минус единицы при традиционном подходе нечто совершенно непонятное, особых психологических проблем с комплексными числами не возникает, потому что любая операция с ними оказывается в точности такой, как если бы они были обычными двучленами, где мнимая единица, i, играет роль аргумента.

Единственное существенное отличие комплексных чисел от двучленов состоит в том, что квадрат мнимой единицы везде, где только он появляется, заменяется на обычную минус единицу: $i^2 = -1$.

Далее вводится операция комплексного сопряжения комплексного числа, она заключается в том, что знак при i меняется на противоположный.

Например: числа $z = x+iy$ и $z^* = x-iy$ взаимно комплексно сопряжены. Произведение таких чисел равно действительному неотрицательному числу: $z \cdot z^* = x^2-(iy)^2 = x^2+y^2 \geq 0$.

Модулем комплексного числа $z = x + iy$ называется:

$$r = \sqrt{z \cdot z^*} = \sqrt{x^2 + y^2}. \tag{3.2}$$

Модуль равен нулю тогда и только тогда, когда комплексное число равно нулю, т. е. при $x = y = 0$.

Действительные числа оказываются частным случаем комплексных, когда $y = 0$.

Мнимые числа тоже частный случай комплексных, когда $x = 0$.

При делении одного комплексного числа $a + ib$ на другое $c + id$ применяется специальный приём. Его суть в том, что делимое и делитель умножаются на число, комплексно сопряжённое делителю, т. е. $c - id$, чтобы деление, в конечном итоге, выполнялось не на комплексное, а на обычное действительное число, после чего совершаются все действия согласно ситуации:

$$\frac{a+ib}{c+id} = \frac{(c-id)(a+ib)}{(c-id)(c+id)} = \frac{ac+bci-adi-bdi^2}{c^2+d^2} = \frac{ac+bd+(bc-ad)i}{c^2+d^2}.$$

И окончательно получаем:

$$\frac{a+ib}{c+id} = \frac{ac+bd}{c^2+d^2} + \left(\frac{bc-ad}{c^2+d^2}\right)i.$$

Оказывается, что теория комплексных чисел чрезвычайно мощная, она богата возможностями, поэтому изучение теории комплексного переменного доставляет немалое удовольствие.

Комплексные числа вовсе не курьёз, они занимают своё достойное место в современной математике, физике и инженерии.

И, наконец, оказывается, что комплексные числа являются особыми матрицами.

Но об этом ниже.

3.2 О возможности особых решений квадратного матричного уравнения

Решим квадратное матричное уравнение

$$z^2 + \mathsf{P}z + \mathsf{Q} = \mathsf{O}, \tag{3.3}$$

здесь z — квадратная матрица второго порядка, $\mathsf{P} = p\mathsf{E}$, $\mathsf{Q} = q\mathsf{E}$ — произведение действительных чисел p и q на единичную квадратную матрицу:

$$\mathsf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

Наконец, O — нулевая матрица, которая отличается от E тем, что у неё все матричные элементы нули.

Нетрудно непосредственно убедиться, что единичная матрица при умножении матриц играет роль единицы:

- её можно умножать справа и слева на число или на квадратную матрицу второго порядка,
- любая степень единичной матрицы равна единичной матрице, в частности, $\mathsf{E}^2 = \mathsf{E}$,
- единичная матрица, а также произведение единичной матрицы на число коммутирует с любой квадратной матрицей второго порядка.

Поэтому выделяем, как обычно, полный квадрат:

$$\left(z + \frac{\mathsf{P}}{2}\right)^2 = \frac{\mathsf{P}^2}{4} - \mathsf{Q} = \frac{p^2}{4}\mathsf{E}^2 - q\mathsf{E} = \frac{p^2}{4}\mathsf{E} - q\mathsf{E},$$

$$z = -\frac{p}{2}\mathsf{E} \pm \sqrt{\left(\frac{p^2}{4} - q\right)\mathsf{E}} = -\frac{p}{2}\mathsf{E} \pm \sqrt{\mathcal{D}\mathsf{E}}. \tag{3.4}$$

Поскольку $\mathsf{E} = \mathsf{E}^2$, то квадратный корень из единичной матрицы равен единичной матрице. И тогда получаются решения в точности такие, как для уравнения с действительными числами.

Однако оказывается, что возможны особые решения, возникающие в связи с тем, что квадратные корни из матриц можно извлекать по-разному. И тогда получим двойные, дуальные и комплексные числа.

3.2.1 Двойные числа

Оказывается, существуют неединичные матрицы, квадрат которых равен единичной матрице, например:

$$\mathsf{I} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Непосредственным возведением в квадрат убеждаемся, что $\mathsf{I}^2 = \mathsf{E}$, следовательно $\sqrt{\mathsf{I}} = \mathsf{E}$.

Тогда если дискриминант $\mathcal{D} = \frac{p^2}{4} - q$ матричного уравнения (3.3) положителен $\mathcal{D} > 0$, то решение принимает следующий вид:

$$z = -\frac{p}{2}\mathsf{E} \pm \sqrt{\mathcal{D}} \cdot \sqrt{\mathsf{E}} = -\frac{p}{2}\mathsf{E} \pm \sqrt{\mathcal{D}} \cdot \mathsf{I}.$$

В результате приходим к двойным числам:

$$\mathsf{d} = x\mathsf{E} + y\mathsf{I} = x\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + y\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & y \\ y & x \end{pmatrix}.$$

Здесь x и y некоторые действительные числа.

Вспомним, что единичная матрица при умножении играет роль единицы, поэтому выполняя алгебраические преобразования, её можно вообще опускать, точно так же, как мы опускаем обычную единицу при вычислениях с действительными числами.

В результате получаем алгебраическую запись т. н. двойных чисел:

$$\mathsf{d} = x + y\mathsf{I}.$$

Они двойные потому, что здесь есть две единицы: обычная единица, 1, и особая единица, такая, что $\mathsf{I}^2 = 1$.

Конечно же, выражения вида $\mathsf{d} = x + y\mathsf{I}$ являются матрицами, но их можно считать числами в том смысле, что их можно умножать на число, складывать друг с другом, вычитать одно из другого, и даже перемножать. Умножение двойных чисел выполняется так, как если бы они были обычными двучленами, аргументом которых является особая единица, причём квадрат особой единицы всегда заменятся на обычную единицу: $\mathsf{I}^2 = 1$.

Во многом двойные числа аналогичны комплексным числам.

Точно так же, как в случае комплексных чисел, задаётся сопряжение двойных чисел, а именно, $\mathsf{d} = x + y\mathsf{I}$ и $\mathsf{d}^* = x - y\mathsf{I}$ являются взаимно сопряжёнными. Тогда модуль двойного числа имеет следующий вид:

$$r = \sqrt{\mathsf{d}\mathsf{d}^*} = \sqrt{x^2 - y^2}.$$

Наконец, при делении двойных чисел применяется такой же приём, как при делении комплексных чисел: делимое и делитель умножаются на двойное число, сопряжённое с делителем, а затем выполняются все действия согласно ситуации.

Но в отличие от комплексных чисел, среди которых есть лишь одно число с нулевым модулем, модуль двойных чисел равен нулю при условии, что $x = y$, следовательно, деление на двойные числа, удовлетворяющие этому условию невозможно. Поэтому область применимости двойных чисел значительно уже, чем область применимости комплексных чисел.

3.2.2 Дуальные числа

Снова вернёмся к матричному уравнению (3.3), но теперь рассмотрим случай, когда дискриминант $\mathcal{D} = \frac{p^2}{4} - q = 0$.

Из уравнения (3.4) получаем:

$$z = -\frac{p}{2}\mathsf{E} \pm \sqrt{\mathsf{O}}.$$

Оказывается, существуют ненулевые матрицы, квадрат которых равен нулевой матрице, например, такие:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad y\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & y \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Т. е. $(y\varepsilon)^2 = \mathsf{O}$ и, следовательно, $\sqrt{\mathsf{O}} = y\varepsilon$.

В конечном итоге приходим к дуальным числам такого вида:

$$\delta = x\mathsf{E} + y\varepsilon = x\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + y\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & y \\ 0 & x \end{pmatrix}.$$

Здесь x и y некоторые действительные числа.

При алгебраической записи дуальных чисел E опускают:

$$\delta = x + y\varepsilon.$$

Кроме того, везде, где встретится ε^2, полагают $\varepsilon^2 = 0$.

Модуль дуального числа равен:

$$\sqrt{\delta \cdot \delta^*} = \sqrt{(x + y\varepsilon)(x - y\varepsilon)} = \sqrt{x^2 - y^2\varepsilon^2} = \sqrt{x^2 - y^2 \cdot 0} =\mid x \mid .$$

Он вводится аналогично тому, как вводились модули двойных и комплексных чисел.

Алгебраические операции с дуальными числами в точности подобны действиям с комплексными или с двойными числами. Единственное отличие: везде, где встретится ε^2, полагаем $\varepsilon^2 = 0$.

Деление на дуальные числа вида $y\varepsilon$, т. е. на те, у которых $x = 0$, невозможно, что ограничивает область применимости дуальных чисел по сравнению с комплексными.

Тем не менее, двойные и дуальные числа всё же нашли своё применение в математике (см. И. М. Яглом. Комплексные числа и их применение в геометрии. М.: Физматлит, 1963.).

3.2.3 Комплексные числа — это особые матрицы

Если дискриминант матричного уравнения (3.3) отрицателен $\mathcal{D} = \frac{p^2}{4} - q < 0$, то решение (равенство 3.4) принимает вид:

$$z = -\frac{p}{2}\mathsf{E} \pm \sqrt{\mid \mathcal{D} \mid} \cdot \sqrt{-\mathsf{E}}.$$

Из числа, равного минус единице, квадратный корень не извлекается, а из единичной матрицы, умноженной на минус единицу, извлечение корня вполне возможно. Например, $i^2 = -\mathsf{E}$, где

$$i = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Поэтому решением квадратного матричного уравнения (3.3) являются матрицы вида

$$z = x\mathsf{E} + yi = x\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + y\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & -y \\ y & x \end{pmatrix}. \tag{3.5}$$

Единичная матрица при умножении играет роль единицы, поэтому выполняя алгебраические преобразования, можно её вообще опускать: $z = x + yi$. Из равенства $i^2 = -\mathsf{E}$ следует, что там, где встретится i^2 , можно писать просто минус единицу.

В результате приходим к общепринятой записи вычислений с комплексными числами — всё точно так, как если бы мы вводили комплексные числа традиционным способом.

Что касается комплексных чисел, то они применяются настолько широко, что, наверное, будет проще сказать, где они не применяются.

В дальнейшем изложении будут встречаться только комплексные числа.

3.3 Тригонометрическая форма комплексных чисел

Пусть дано некоторое комплексное число $z = x + yi$.

Примем, что x — абсцисса, а y — ордината. Тогда каждому комплексному числу можно поставить в соответствие точку плоскости, и наоборот, каждой точке плоскости можно поставить в соответствие комплексное число.

Теперь введём на плоскости полярные координаты:

$$x = r\cos\varphi,\ \ y = r\sin\varphi.$$

Из этих формул, а также из равенства (2.8) следует, что $r = \sqrt{x^2+y^2}$. Эта формула для r совпадает с выражением для модуля комплексного числа (3.2).

Подставив выражения для x и y в алгебраическую форму записи комплексного числа $z = x + yi$, приходим к тригонометрической форме записи:

$$z = r(\cos\varphi + i\sin\varphi).$$

Угол φ называется аргументом комплексного числа, а r, как нам уже известно, модуль.

Аналогично, подставив значения x и y в (3.5), получим матричную тригонометрическую форму записи комплексного числа $z = r(\sin\varphi + i\cos\varphi)$:

$$z = r\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi\\ \sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix}. \tag{3.6}$$

Какое линейное преобразование задаёт эта матрица? Об этом далее...

3.4 Линейное преобразование, изображаемое комплексным числом

3.4.1 Поворотная гомотетия

Матрицу (3.6), соответствующую комплексному числу в тригонометрической форме $z = r(\cos\varphi + i\sin\varphi)$, можно представить в виде произведения двух матриц, зависящих лишь от модуля r или от аргумента φ:

$$z = \Gamma(r)\cdot \mathsf{R}(\varphi) = \mathsf{R}(\varphi)\cdot\Gamma(r).$$

Ниже будет показано, что

- матрице

$$\Gamma(r) = \begin{pmatrix} r & 0\\ 0 & r\end{pmatrix} \tag{3.7}$$

  соответствует линейное преобразование, описывающее гомотетию с центром в начале координат и коэффициентом подобия $r > 0$,

- матрице

$$\mathsf{R}(\varphi) = \begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi\\ \sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix} \tag{3.8}$$

  соответствует линейное преобразование, описывающее поворот плоскости вокруг начала координат на угол φ против часовой стрелки.

$\Gamma(r)$ и $\mathsf{R}(\varphi)$ коммутируют. Это означает, что гомотетию и поворот можно выполнять в произвольном порядке, а результат, т. н. поворотная гомотетия, будет одинаковым.

Итак, **любое комплексное число задаёт некоторую поворотную гомотетию относительно начала координат, характеризуемую углом поворота φ и коэффициентом подобия r.**

А теперь обо всём этом подробнее.

3.4.2 Линейное преобразование, задающее гомотетию

Гомотетией с центром в начале координат и коэффициентом r называют преобразование плоскости, переводящее любую точку плоскости, расположенную на расстоянии d от начала координат, в точку плоскости, расположенную на том же радиусе и удалённую от начала координат на расстояние rd.

При этом углы с вершинами, расположенными в начале координат, остаются неизменными. Отсюда понятно, что гомотетия преобразует любой треугольник в ему подобный и, следовательно, является преобразованием подобия.

Матрице (3.7) соответствует линейное преобразование

$$x' = r \cdot x,$$
$$y' = r \cdot y,$$

переводящее точку $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ в точку $\begin{pmatrix} rx \\ ry \end{pmatrix}$, расположенную на том же радиусе.

Расстояние исходной точки до начала координат $\sqrt{x^2 + y^2}$, а после выполнения линейного преобразования расстояние становится равным $r\sqrt{x^2 + y^2}$, т. е. изменяется в r раз.

Следовательно, **линейное преобразование, порождаемое матрицей $\mathbf{\Gamma}(r)$, является гомотетией с центром в начале координат и коэффициентом подобия r.**

3.4.3 Линейное преобразование, задающее поворот на плоскости

Приступим к изучению преобразования, задаваемого матрицей (3.8), или, что то же самое, комплексным числом $z = \cos\varphi + i\sin\varphi$:

$$\begin{aligned} x' &= x\cos\varphi - y\sin\varphi, \\ y' &= x\sin\varphi + y\cos\varphi. \end{aligned} \tag{3.9}$$

Оно переводит две точки с координатами x_1, y_1 и x_2, y_2 в некоторые другие две точки x'_1, y'_1 и x'_2, y'_2 соответственно.

Вычислим расстояние между двумя точками после преобразования:

$$d' = \sqrt{(x'_2 - x'_1)^2 + (y'_2 - y'_1)^2}.$$

Скобки в подкоренном выражении равны:

$$[(x_2\cos\varphi - y_2\sin\varphi) - (x_1\cos\varphi - y_1\sin\varphi)]^2 +$$

$$[(x_2\sin\varphi + y_2\cos\varphi) - (x_1\sin\varphi + y_1\cos\varphi)]^2 =$$

$$[(x_2 - x_1)\cos\varphi - (y_2 - y_1)\sin\varphi]^2 + [(x_2 - x_1)\sin\varphi + (y_2 - y_1)\cos\varphi]^2.$$

Учитывая то, что удвоенные произведения здесь взаимно уничтожаются, приводим подобные и продолжаем равенство:

$$(x_2 - x_1)^2(\cos\varphi^2 + \sin\varphi^2) + (y_2 - y_1)^2(\cos\varphi^2 + \sin\varphi^2) = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2.$$

Это значит, что исследуемое линейное преобразование таково, что все расстояния сохраняются:

$$d' = \sqrt{(x_2' - x_1')^2 + (y_2' - y_1')^2} = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} = d.$$

Как известно, для равенства треугольников необходимо и достаточно, чтобы были равны их стороны.

Поэтому линейное преобразование преобразует любой треугольник в некоторый другой треугольник, равный исходному. Следовательно, в результате линейного преобразования сохраняются не только расстояния, но и углы.

Кроме того, непосредственно убеждаемся, что начало координат остаётся неизменным, иначе говоря, точка $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ переходит в точку $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Преобразование плоскости называется поворотом плоскости вокруг центра, если оно сохраняет расстояния и углы и, кроме того, оставляет низменной некоторую точку, называемую центром поворота.

Далее, точка A с координатами $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ преобразуется в точку B с координатами $\begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix}$, как это показано на рисунке 3.1.

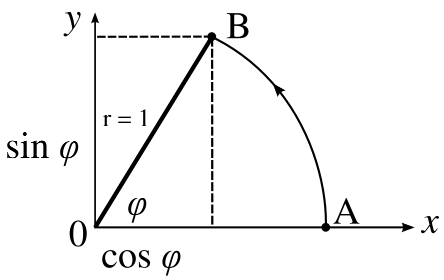

Рис. 3.1: Поворот на угол φ

Отсюда следует, что линейное преобразование (3.9), порождаемое матрицей (3.8), или, что то же самое, комплексным числом $z = \cos\varphi + i\sin\varphi$, описывает поворот плоскости вокруг начала координат на угол φ, который происходит в положительном направлении, т. е. против часовой стрелки.

3.5 Ещё немного тригонометрии

Теперь получим формулы для синуса и косинуса суммы двух углов, а также формулы перехода к половинным углам.

Повернём плоскость на угол φ, а затем относительно того же центра на угол ψ. Тогда суммарный поворот будет на угол $\varphi + \psi$.

Каждый поворот характеризуется своей матрицей поворота, а то, что повороты выполнены последовательно, изображается на языке матриц их произведением:

$$\mathsf{R}(\varphi + \psi) = \mathsf{R}(\psi) \cdot \mathsf{R}(\varphi).$$

Матрице $\mathsf{R}(\varphi+\psi)$ соответствует комплексное число $\cos(\varphi+\psi)+i\sin(\varphi+\psi)$, а матрицам $\mathsf{R}(\psi)$ и $\mathsf{R}(\varphi)$ — числа $\cos\psi + i\sin\psi$ и $\cos\varphi + i\sin\varphi$.

Поэтому

$$\cos(\varphi+\psi) + i\sin(\varphi+\psi) = (\cos\psi + i\sin\psi)(\cos\varphi + i\sin\varphi). \tag{3.10}$$

Т. е. **при перемножении комплексных чисел их аргументы складываются.**

Кстати, если бы мы перемножали комплексные числа не с единичными, а с произвольными модулями, то в результате очевидного обобщения получили бы, что **при перемножении комплексных чисел их модули перемножаются.**

Выполнив в равенстве (3.10) необходимые действия, убедимся, что действительная часть произведения даст формулу косинуса суммы двух углов, а мнимая часть — формулу синуса суммы:

$$\cos(\varphi+\psi) = \cos\varphi\cos\psi - \sin\varphi\sin\psi, \tag{3.11}$$

$$\sin(\varphi+\psi) = \sin\varphi\cos\psi + \cos\varphi\sin\psi. \tag{3.12}$$

Отсюда при $\varphi = \psi = \alpha/2$ следуют полезные выражения для половинных углов:

$$\cos\alpha = \cos^2\alpha/2 - \sin^2\alpha/2, \tag{3.13}$$

$$\sin\alpha = 2\sin(\alpha/2)\cdot\cos(\alpha/2). \tag{3.14}$$

3.6 Показательная форма комплексных чисел

Равенство (3.10) означает, что при перемножении комплексных чисел их аргументы складываются. Точно таким же свойством обладает показательная функция, а именно, при перемножении показательных функций их аргументы складываются:

$$a^{x+y} = a^x \cdot a^y,$$

здесь $a \neq 1$ называется основанием показательной функции.

Поэтому комплексное число является некоторой показательной функцией, причём показательной функцией комплексного аргумента.

Оказывается, имеет место формула Эйлера:

$$e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi, \tag{3.15}$$

здесь $e \approx 2,7182818284...$ особое трансцендентное число, т. е. число, состоящее из бесконечного числа цифр после запятой, называемое основанием натуральных логарифмов.

Это число, а также формула Эйлера, изучаются в курсе математического анализа.

Итак, любое комплексное число может быть представлено в показательной форме:

$$z = re^{i\varphi},$$

или

$$z = e^{\rho+i\varphi},$$

здесь ρ — действительное число такое, что $r = e^{\rho}$.

3.7 Интерпретация математических формул

Математические формулы, объекты и соотношения между ними являются абстракциями. Т. е. они являются результатом абстрагирования, отвлечения от конкретного содержания. Но, применяя математику к конкретным ситуациям, приходится спускаться «с небес на землю» — наполнять математические соотношения конкретным содержанием, как-то интерпретировать математические объекты и соотношения между ними.

Возможны самые различные интерпретации одних и тех же абстракций. Отсюда проистекает поразительная сила математики — вроде бы делается какая-то одна работа, а её результат вдруг оказывается, применим в очень разных ситуациях.

3.7.1 Две интерпретации комплексных чисел

Комплексное число $x + iy$ изображает точку плоскости с абсциссой x и ординатой y.

То же самое комплексное число $x + iy$, но представленное в тригонометрической форме, $r(\sin\varphi + i\cos\varphi)$, изображает поворотную гомотетию относительно начала координат, характеризуемую углом поворота φ и коэффициентом подобия r.

Есть и другие интерпретации комплексных чисел, которые здесь не рассматриваются.

3.7.2 Активная и пассивная интерпретация формул поворота

Вот формулы, описывающие поворот точек плоскости на угол $+\varphi$, т. е. против часовой стрелки, относительно начала координат:

$$x' = x\cos\varphi - y\sin\varphi,$$
$$y' = x\sin\varphi + y\cos\varphi.$$

Такая интерпретация формул называется **активной**.

Возможна **пассивная интерпретация** этих же формул, когда принимается, что любая точка плоскости остаётся неподвижной, зато система координат поворачивается на угол $-\varphi$, т. е. по часовой стрелке, вследствие чего координаты точки меняются. (См. Рис. 3.2.)

Очевидное обобщение: **активная и пассивная интерпретация применима вообще к любым преобразованиям — и к линейным, и к нелинейным.**

3.8 Угол между двумя направлениями

Произведём в формуле (3.11) замены $\varphi = \varphi_1, \psi = -\varphi_2$, принимая во внимание чётность косинуса и нечётность синуса:

$$\cos(\varphi_1 - \varphi_2) = \cos\varphi_1\cos\varphi_2 + \sin\varphi_1\sin\varphi_2.$$

А теперь зададимся расстоянием до начала координат $r_1 > 0$, тогда косинус и синус угла φ_1 будут задавать направление из начала координат на некоторую точку с декартовыми координатами

$$x_1 = r_1\cos\varphi_1, \qquad y_1 = r_1\sin\varphi_1.$$

Аналогично для второй точки:

$$x_2 = r_2\cos\varphi_2, \qquad y_2 = r_2\sin\varphi_2.$$

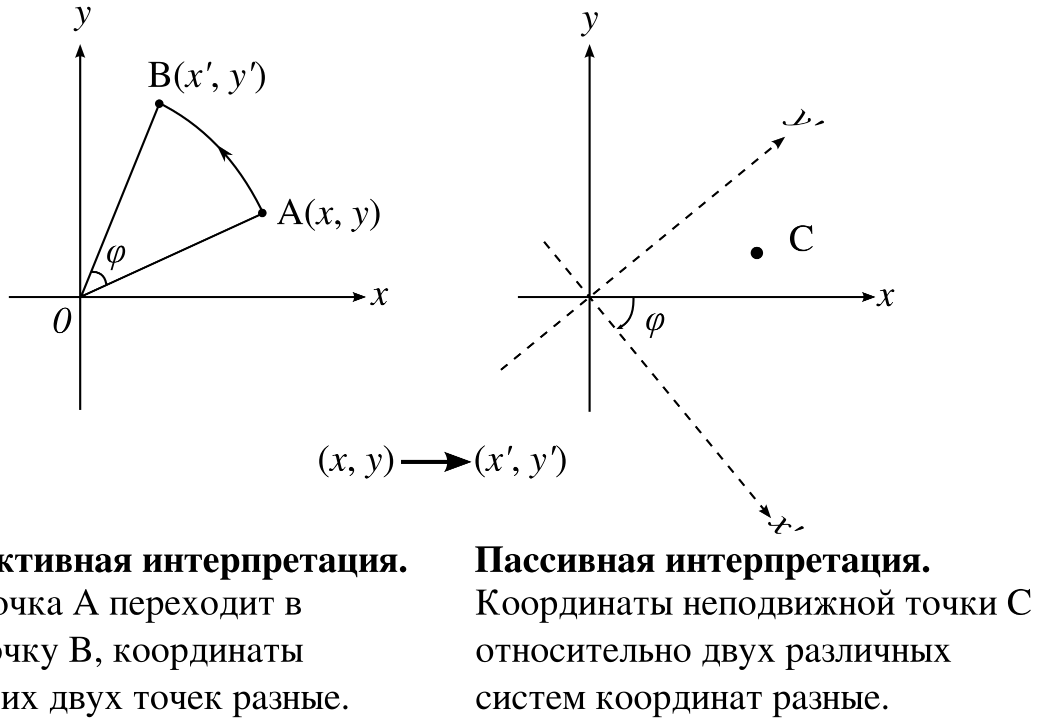

Рис. 3.2: Две интерпретации

Тогда угол $\alpha = \varphi_1 - \varphi_2$ между этими двумя направлениями будет выражаться через декартовы координаты соответствующих точек следующим образом:

$$\cos\alpha = \frac{x_1x_2 + y_1y_2}{r_1r_2}.$$

Эта формула допускает обобщение на случай трёхмерного пространства:

$$\cos\alpha = \frac{x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2}{r_1r_2}. \tag{3.16}$$

3.9 Ортогональные матрицы

Квадратная матрица R с действительными матричными элементами, удовлетворяющая равенству

$$\mathsf{R}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{R} = \mathsf{R} \cdot \mathsf{R}^\mathsf{T} = \mathsf{E}.$$

называется ортогональной.

Точно такому же равенству удовлетворяет обратная матрица:

$$\mathsf{R}^{-1} \cdot \mathsf{R} = \mathsf{R} \cdot \mathsf{R}^{-1} = \mathsf{E}.$$

Отсюда следует важное свойство ортогональной матрицы, которое можно было бы принять в качестве определения ортогональности:

$$\mathsf{R}^\mathsf{T} = \mathsf{R}^{-1}. \tag{3.17}$$

Т. е. **матрица является ортогональной, если её транспонированная матрица совпадает с обратной.**

Принимая во внимание теорему умножения определителей (1.17), равенство (1.16), а также соотношения $\mathsf{R}^\mathsf{T}\mathsf{R} = \mathsf{E}$ и $\mathrm{Det}\mathsf{E} = 1$, получим:

$$\mathrm{Det}[\mathsf{R}^\mathsf{T}\mathsf{R}] = \mathrm{Det}\mathsf{R}^\mathsf{T} \cdot \mathrm{Det}\mathsf{R} = [\mathrm{Det}\mathsf{R}]^2 = 1.$$

Отсюда следует утверждение: **определитель любой ортогональной матрицы равен или $+1$, или -1.**

Пример.

Матрица (3.8), задающая поворот плоскости на угол φ, является ортогональной.

В самом деле, непосредственно убеждаемся, что определитель Δ матрицы $\mathsf{R}(\varphi)$ равен единице, после чего для обращения матрицы можно применить соотношение (1.13):

$$\mathsf{R}^{-1}(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} = \mathsf{R}^\mathsf{T}(\varphi).$$

3.10 Эрмитово сопряжение матриц и комплексных чисел

Комплексное сопряжение матрицы сводится к комплексному сопряжению всех без исключения её матричных элементов.

Теперь выполним комплексное сопряжение произведения матриц $\mathsf{C} = \mathsf{AB}$, представленного формулой (1.5):

$$c_{ij}^* = a_{i1}^* b_{1j}^* + a_{i2}^* b_{2j}^* + \ldots = \sum_{k=1}^{k=n} a_{ik}^* \cdot b_{kj}^*.$$

Отсюда получаем: $\mathsf{C}^* = \mathsf{A}^*\mathsf{B}^*$, и, следовательно, $(\mathsf{AB})^* = \mathsf{A}^*\mathsf{B}^*$, т. е. комплексное сопряжение произведения матриц выполняется заменой матриц-сомножителей на соответствующие комплексно сопряжённые матрицы, при этом **порядок матриц-сомножителей сохраняется**.

Эрмитово сопряжение матрицы сводится к двум, выполняемым в каком угодно порядке, операциям транспонирования и комплексного сопряжения.

$$\mathsf{A}^\dagger = (\mathsf{A}^*)^\mathsf{T} = (\mathsf{A}^\mathsf{T})^*. \tag{3.18}$$

Здесь знаки «†», «∗» и «T» означают эрмитово сопряжение, комплексное сопряжение матрицы и транспонирование матрицы соответственно.

Пример:

$$\begin{pmatrix} 1-i & 2-i \\ 3+i & 4 \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} 1+i & 3-i \\ 2+i & 4 \end{pmatrix}.$$

С точки зрения формально-алгебраической, операция эрмитового сопряжения матрицы похожа на операцию транспонирования. В частности:

— дважды эрмитово сопряжённая матрица равна исходной матрице,

— эрмитово сопряжённое произведение матриц равно произведению эрмитово сопряжённых матриц, взятых в обратном порядке. В самом деле,

$$(\mathsf{AB})^\dagger = \left((\mathsf{AB})^\mathsf{T}\right)^* = \left(\mathsf{B}^\mathsf{T}\mathsf{A}^\mathsf{T}\right)^* = (\mathsf{B}^\mathsf{T})^*(\mathsf{A}^\mathsf{T})^* = \mathsf{B}^\dagger\mathsf{A}^\dagger,$$

и т. п.

Теперь вернёмся к выражению (3.5), согласно которому комплексное число является, по сути, матрицей вида $z = (x\mathsf{E} + yi)$, здесь x и y — действительные числа, E — единичная матрица, а $i = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Тогда

$$\begin{gathered} z^\dagger = (x\mathsf{E} + yi)^\dagger = \begin{pmatrix} x & -y \\ y & x \end{pmatrix}^\dagger = \left(\begin{pmatrix} x & -y \\ y & x \end{pmatrix}^*\right)^\mathsf{T} = \begin{pmatrix} x & -y \\ y & x \end{pmatrix}^\mathsf{T} = \\ \begin{pmatrix} x & y \\ -y & x \end{pmatrix} = (x\mathsf{E} - yi) = (x\mathsf{E} + yi)^* = z^*. \end{gathered} \tag{3.19}$$

Итак, $z^\dagger = z^*$, т. е. **операция эрмитового сопряжения в применении к комплексному числу эквивалентна операции комплексного сопряжения.**

3.11 Эрмитовы и унитарные матрицы

Квадратная матрица Q называется эрмитовой, или самосопряжённой, если она совпадает со своей эрмитово сопряжённой матрицей:

$$\mathsf{Q}^\dagger = \mathsf{Q}. \tag{3.20}$$

Квадратная матрица U с комплексными элементами, удовлетворяющая равенству

$$\mathsf{U}^\dagger \cdot \mathsf{U} = \mathsf{U} \cdot \mathsf{U}^\dagger = \mathsf{E}.$$

называется унитарной.

Точно такому же равенству удовлетворяет обратная матрица:

$$\mathsf{U}^{-1} \cdot \mathsf{U} = \mathsf{U} \cdot \mathsf{U}^{-1} = \mathsf{E}.$$

Отсюда следует важное свойство унитарной матрицы, которое можно было бы принять в качестве определения унитарности:

$$\mathsf{U}^\dagger = \mathsf{U}^{-1}. \tag{3.21}$$

Итак, **если некоторая матрица является унитарной, то соответствующие ей эрмитово сопряжённая матрица и обратная матрица совпадают**.

Эрмитовы и унитарные матрицы играют важнейшую роль в математическом аппарате квантовой механики. В частности, физические величины в квантовой механике изображаются эрмитовыми операторами, которые можно представить в виде эрмитовых матриц.

Глава 4

Направления и повороты в физическом пространстве

4.1 Возможные способы описания направлений и поворотов

Здесь рассмотрены различные способы описания направлений и поворотов в трёхмерном евклидовом пространстве, которое в дальнейшем называется **физическим пространством**.

Эти способы таковы:

— на основе декартовых координат,

— с половинными угловыми координатами сферической системы координат,

— с применением матрицы плотности,

— с применением кватернионов,

— и, наконец, на основе спиноров.

А теперь обо всём подробно...

4.2 Описание на основе декартовых координат

4.2.1 Описание направлений

Направление в физическом пространстве можно задать с помощью декартовых координат x, y, z какой-нибудь точки, не совпадающей с началом координат. Луч, исходящий из начала координат и проходящий через эту точку, определит направление.

Но такое описание направлений нельзя считать вполне удовлетворительным, потому что декартовы координаты x, y, z кроме направления задают ещё и расстояние точки до начала координат:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \tag{4.1}$$

Чтобы избежать избыточности, направления задают вектором единичной длины с компонентами

$$n = \frac{x}{r},\ m = \frac{y}{r},\ l = \frac{z}{r}. \tag{4.2}$$

Величины $n,\ m$ и l называются **направляющими косинусами**.

4.2.2 Описание поворотов

Сразу определимся, что будем применять правую систему декартовых координат, т. е. такую, что положительное направление оси Ox совпадёт с положительным направлением оси Oy, если ось Ox повернуть на $90°$ против часовой стрелки, причём наблюдать такой поворот следует со стороны положительного направления оси Oz.

Тогда линейное преобразование

$$\begin{aligned} x' &= x \cdot \cos\alpha - y \cdot \sin\alpha, \\ y' &= x \cdot \sin\alpha + y \cdot \cos\alpha, \\ z' &= z. \end{aligned}$$

описывает, согласно равенству (3.9), поворот на угол α в любой плоскости, перпендикулярной оси Oz, вокруг этой оси в положительном направлении, т. е. против часовой стрелки. Аналогичный поворот, но на угол φ, изображён на рисунке 3.1.

Соответствующая матрица, описывающая поворот, имеет вид:

$$\mathsf{R}_z(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{4.3}$$

Точно также запишем поворот вокруг оси Oy, оставляющий неизменной координату y:

$$\begin{aligned} x' &= x \cdot \cos\alpha - z \cdot \sin\alpha, \\ y' &= y, \\ z' &= x \cdot \sin\alpha + z \cdot \cos\alpha. \end{aligned}$$

Это преобразование описывает поворот в направлении от оси Ox к оси Oz, который происходит по часовой стрелке, если смотреть с положительного направления оси Oy.

Как известно, в качестве положительного направления поворота принимается поворот, происходящий не по часовой стрелке, а против часовой стрелки. Поэтому заменим α на $-\alpha$ и, приняв во внимание чётность косинуса и нечётность синуса, получим:

$$\begin{aligned} x' &= x \cdot \cos\alpha + z \cdot \sin\alpha, \\ y' &= y, \\ z' &= -x \cdot \sin\alpha + z \cdot \cos\alpha. \end{aligned}$$

Тогда соответствующая матрица принимает вид:

$$\mathsf{R}_y(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & 0 & \sin\alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\alpha & 0 & \cos\alpha \end{pmatrix}. \tag{4.4}$$

Наконец, вращение вокруг оси Ox в положительном направлении описывается линейным преобразованием:

$$\begin{aligned} x' &= x, \\ y' &= y \cdot \cos\alpha - z \cdot \sin\alpha, \\ z' &= y \cdot \sin\alpha + z \cdot \cos\alpha. \end{aligned} \tag{4.5}$$

Соответствующая матрица имеет вид:

$$\mathsf{R}_x(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}. \tag{4.6}$$

Непосредственно проверяется, что матрицы $\mathsf{R}_x(\alpha)$, $\mathsf{R}_y(\alpha)$ и $\mathsf{R}_z(\alpha)$ ортогональны, поскольку они удовлетворяют равенствам такого вида:

$\mathsf{R}^\mathsf{T}(\alpha) \cdot \mathsf{R}(\alpha) = \mathsf{R}(\alpha) \cdot \mathsf{R}^\mathsf{T}(\alpha) = \mathsf{E}$.

Кроме того, определители матриц $\mathsf{R}_x(\alpha)$, $\mathsf{R}_y(\alpha)$ и $\mathsf{R}_z(\alpha)$ равны единице.

4.2.3 Ортогональные матрицы, изображающие повороты

Докажем, что **любое ортогональное преобразование, т. е. линейное преобразование, изображаемое ортогональной матрицей, задаёт поворот физического пространства**.

Но прежде отметим, что формула (2.1), определяющая расстояние между двумя точками плоскости, допускает обобщение на случай трёхмерного физического пространства:

$$d = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2},$$

здесь x_1, y_1, z_1 и x_2, y_2, z_2 — декартовы координаты точек.

Расстояние d между этими точками можно представить в матричной форме:

$$d = \sqrt{\mathbf{r}^\mathrm{T} \cdot \mathbf{r}}, \qquad \text{здесь}$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r_2} - \mathbf{r_1}, \quad \mathbf{r}_1 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}.$$

После ортогонального преобразования, где R — ортогональная матрица, новые декартовы координаты станут такими:

$$\mathbf{r}'_1 = \mathsf{R}\mathbf{r}_1, \quad \mathbf{r}'_2 = \mathsf{R}\mathbf{r}_2 \quad \text{и, следовательно,} \quad \mathbf{r}' = \mathbf{r'_2} - \mathbf{r'_1} = \mathsf{R}\mathbf{r}.$$

Отсюда $(\mathbf{r}')^\mathsf{T} = \mathbf{r}^\mathsf{T}\mathsf{R}^\mathsf{T}$, и, принимая во внимание условие ортогональности $\mathsf{R}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{R} = \mathsf{E}$, получаем:

$$d' = \sqrt{(\mathbf{r}')^\mathsf{T} \cdot \mathbf{r}'} = \sqrt{\mathbf{r}^\mathsf{T}\mathsf{R}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{R}\mathbf{r}} = \sqrt{\mathbf{r}^\mathsf{T}\mathsf{E}\mathbf{r}} = \sqrt{\mathbf{r}^\mathsf{T} \cdot \mathbf{r}} = d.$$

Это значит, что при ортогональных преобразованиях все расстояния, а значит и углы, сохраняются, поскольку треугольники переходят в равные им треугольники. Далее, ортогональное преобразование является не только линейным, но и однородным, вследствие чего начало координат остаётся неизменным.

Отсюда следует, что **любое ортогональное преобразование изображает некоторый поворот физического пространства**.

Теперь представим, что выполнены два последовательных поворота физического пространства. В результате стороны, углы, а также начало координат всё равно останутся неизменными, т. е. итоговое преобразование тоже будет поворотом.

На языке матриц это означает, что **произведение двух ортогональных матриц является ортогональной матрицей**.

Докажем это утверждение.

Пусть матрица R является произведением двух ортогональных матриц: $\mathsf{R} = \mathsf{R}_1 \cdot \mathsf{R}_2$. Тогда, принимая во внимание то, что при транспонировании произведения порядок следования матриц меняется на противоположный, получим: $\mathsf{R}^\mathsf{T} = \mathsf{R}_2^\mathsf{T} \cdot \mathsf{R}_1^\mathsf{T}$. В результате получим равенство, которому удовлетворяют лишь ортогональные матрицы:

$$\mathsf{R} \cdot \mathsf{R}^\mathsf{T} = (\mathsf{R}_1 \cdot \mathsf{R}_2) \cdot (\mathsf{R}_2^\mathsf{T} \cdot \mathsf{R}_1^\mathsf{T}) = \mathsf{R}_1 \cdot (\mathsf{R}_2 \cdot \mathsf{R}_2^\mathsf{T}) \cdot \mathsf{R}_1^\mathsf{T} = \mathsf{R}_1 \cdot \mathsf{E} \cdot \mathsf{R}_1^\mathsf{T} = \mathsf{E}.$$

Аналогично доказывается, что $\mathsf{R}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{R} = \mathsf{R}$.

Очевидно, этот результат обобщается на случай произведения любого конечного числа ортогональных матриц.

В частности, любое произведение, составленное из матриц $\mathsf{R}_x(\alpha)$, $\mathsf{R}_y(\alpha)$ и $\mathsf{R}_z(\alpha)$ (соотношения (4.6), (4.4) и (4.3) соответственно), представляет собой ортогональную матрицу и, следовательно, описывает некоторый поворот физического пространства.

4.3 Описание с половинными углами

4.3.1 Сферические координаты

Сферические координаты произвольной точки M связаны с декартовыми координатами соотношениями:

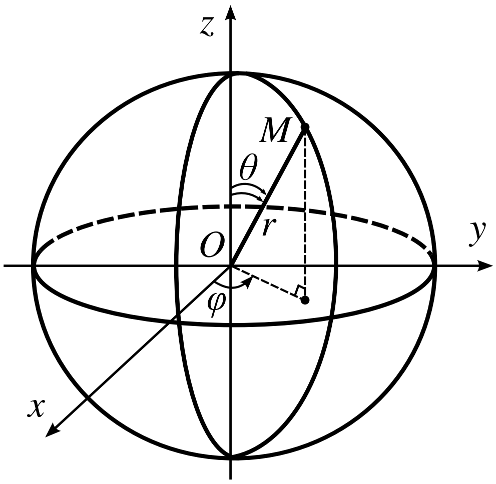

Рис. 4.1: Сферические координаты

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi, \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi, \\ z &= r\cos\theta. \end{aligned} \tag{4.7}$$

Здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ — расстояние от точки с декартовыми координатами x, y, z до начала координат, θ — полярный угол, который изменяется в пределах от 0 до π, φ — азимутальный угол, который изменяется в пределах от 0 до 2π.

Аналогия с географическими координатами: φ — аналог долготы, а θ — угловое полярное расстояние, которое в отличие от географической широты отсчитывается не от экватора, а от Северного полюса Земли.

Наконец, **любые направления, исходящие из начала координат, определяются в сферической системе координат двумя углами — θ и φ.**

4.3.2 KS-преобразование

Переход к половинным углам выполняется в соответствии с равенствами (3.13), (3.14) и (2.8). Применим эти формулы в подходящих обозначениях к выражениям для сферических координат (4.7):

$$\begin{aligned}
&x = r\sin\theta\cos\varphi = r\cdot 2\cdot\sin\theta/2\cdot\cos\theta/2\cdot(\cos^2\varphi/2-\sin^2\varphi/2) = \\
&\quad 2r(\sin\theta/2\cdot\cos\theta/2\cdot\cos^2\varphi/2-\sin\theta/2\cdot\cos\theta/2\cdot\sin^2\varphi/2),\\
&y = r\sin\theta\sin\varphi = 4r\sin\theta/2\cdot\cos\theta/2\cdot\sin\varphi/2\cdot\cos\varphi/2,\\
&z = r\cos\theta = r(\cos^2\theta/2-\sin^2\theta/2)(\cos^2\varphi/2+\sin^2\varphi/2) = \\
&\quad r(\cos^2\theta/2\cdot\cos^2\varphi/2-\sin^2\theta/2\cdot\cos^2\varphi/2+\\
&\quad \cos^2\theta/2\cdot\sin^2\varphi/2-\sin^2\theta/2\cdot\sin^2\varphi/2).
\end{aligned}$$

Пусть

$$\begin{aligned}
u_1 &= \sqrt{r}\cos\theta/2\cdot\cos\varphi/2,\\
u_2 &= \sqrt{r}\sin\theta/2\cdot\cos\varphi/2,\\
u_3 &= \sqrt{r}\sin\theta/2\cdot\sin\varphi/2,\\
u_4 &= \sqrt{r}\cos\theta/2\cdot\sin\varphi/2,
\end{aligned}\tag{4.8}$$

тогда

$$\begin{aligned}
x &= 2(u_1u_2-u_3u_4),\\
y &= 2(u_1u_3+u_2u_4),\\
z &= u_1^2-u_2^2-u_3^2+u_4^2,\\
r &= u_1^2+u_2^2+u_3^2+u_4^2.
\end{aligned}\tag{4.9}$$

Это преобразование, называемое в небесной механике KS–преобразованием (преобразованием Кустаанхеймо-Штифеля), по-видимому, впервые было получено Хопфом в 1931 г. (См. Штифель Е., Шейфеле. Г. Линейная и регулярная небесная механика. — М.: Наука, 1975, 304 с.). Оно осуществляет переход от физического пространства с координатами точек x, y, z к четырёхмерному пространству, называемому в дальнейшем **параметрическим**, с координатами точек u_1, u_2, u_3, u_4.

4.3.3 Описание поворотов через половинные углы

Оказывается, повороты в физическом пространстве могут быть представлены сначала некоторыми поворотами в четырёхмерном параметрическом пространстве, а затем унитарными преобразованиями комплексного двухмерного евклидового пространства, которое физики называют **пространством состояний**.

Рассмотрим для начала следующий поворот в параметрическом пространстве:

$$\begin{aligned}
u_1' &= u_1\cos\alpha/2+u_3\sin\alpha/2,\\
u_2' &= u_2\cos\alpha/2-u_4\sin\alpha/2,\\
u_3' &= -u_1\sin\alpha/2+u_3\cos\alpha/2,\\
u_4' &= u_2\sin\alpha/2+u_4\cos\alpha/2.
\end{aligned}\tag{4.10}$$

Соответствующая матрица такова:

$$\mathsf{P}_x(\alpha/2) = \begin{pmatrix}
\cos\alpha/2 & 0 & \sin\alpha/2 & 0\\
0 & \cos\alpha/2 & 0 & -\sin\alpha/2\\
-\sin\alpha/2 & 0 & \cos\alpha/2 & 0\\
0 & \sin\alpha/2 & 0 & \cos\alpha/2
\end{pmatrix}.\tag{4.11}$$

Покажем, выполнив соответствующие подстановки в формулы KS-преобразования, что преобразование (4.10) изображает поворот физического пространства вокруг оси Ox.

1. Подстановка в первую формулу (4.9):

$$x' = 2(u_1'u_2' - u_3'u_4') = 2(u_1\cos\alpha/2 + u_3\sin\alpha/2)(u_2\cos\alpha/2 - u_4\sin\alpha/2)-$$
$$-2(-u_1\sin\alpha/2 + u_3\cos\alpha/2)(u_2\sin\alpha/2 + u_4\cos\alpha/2) = 2(u_1u_2\cos^2\alpha/2-$$
$$-u_1u_4\cos\alpha/2\sin\alpha/2 + u_2u_3\cos\alpha/2\sin\alpha/2 - u_3u_4\sin^2\alpha/2)-$$
$$-2(-u_1u_2\sin^2\alpha/2 - u_1u_4\cos\alpha/2\sin\alpha/2 + u_2u_3\cos\alpha/2\sin\alpha/2 + u_3u_4\cos^2\alpha/2) =$$
$$2u_1u_2(\cos^2\alpha/2 + \sin^2\alpha/2) - 2u_3u_4(\sin^2\alpha/2 + \cos^2\alpha/2) = 2(u_1u_2 - u_3u_4) = x.$$

2. Подстановка во вторую формулу (4.9):

$$y' = 2(u_1'u_3' + u_2'u_4') = 2(u_1\cos\alpha/2 + u_3\sin\alpha/2)(-u_1\sin\alpha/2 + u_3\cos\alpha/2)+$$
$$+2(u_2\cos\alpha/2 - u_4\sin\alpha/2)(u_2\sin\alpha/2 + u_4\cos\alpha/2) = 2(-u_1^2\cos\alpha/2\sin\alpha/2+$$
$$+u_1u_3\cos^2\alpha/2 + u_3^2\cos\alpha/2\sin\alpha/2 - u_1u_3\sin^2\alpha/2) + 2(u_2^2\sin\alpha/2\cos\alpha/2+$$
$$+u_2u_4\cos^2\alpha/2 - u_2u_4\sin^2\alpha/2 - u_4^2\sin\alpha/2\cos\alpha/2) =$$
$$2(-u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 - u_4^2)\sin\alpha/2\cos\alpha/2 + 2u_1u_3(\cos^2\alpha/2 - \sin^2\alpha/2)+$$
$$+2u_2u_4(\cos^2\alpha/2 - \sin^2\alpha/2) = -(u_1^2 - u_2^2 - u_3^2 + u_4^2)\sin\alpha+$$
$$+2(u_1u_3 + u_2u_4)\cos\alpha = y\cos\alpha - z\sin\alpha.$$

3. Подстановка в третью формулу (4.9):

$$z' = (u_1')^2 - (u_2')^2 - (u_3')^2 + (u_4')^2 = (u_1\cos\alpha/2 + u_3\sin\alpha/2)^2-$$
$$-(u_2\cos\alpha/2 - u_4\sin\alpha/2)^2 - (-u_1\sin\alpha/2 + u_3\cos\alpha/2)^2 + (u_2\sin\alpha/2 + u_4\cos\alpha/2)^2 =$$
$$u_1^2\cos^2\alpha/2 + 2u_1u_3\cos\alpha/2\sin\alpha/2 + u_3^2\sin^2\alpha/2-$$
$$-u_2^2\cos^2\alpha/2 + 2u_2u_4\cos\alpha/2\sin\alpha/2 - u_4^2\sin^2\alpha/2-$$
$$-u_3^2\cos^2\alpha/2 + 2u_1u_3\cos\alpha/2\sin\alpha/2 - u_1^2\sin^2\alpha/2+$$
$$u_4^2\cos^2\alpha/2 + 2u_2u_4\cos\alpha/2\sin\alpha/2 + u_2^2\sin^2\alpha/2 =$$
$$(u_1^2 - u_2^2 - u_3^2 + u_4^2)(\cos^2\alpha/2 - \sin^2\alpha/2) + 2\cos\alpha/2\sin\alpha/2\cdot 2(u_1u_3 + u_2u_4) =$$
$$y\sin\alpha + z\cos\alpha.$$

4. Аналогично подстановка в последнюю формулу (4.9) даёт равенство $r' = r$.
Итак, получилось преобразование:

$$\begin{aligned} x' &= x, \\ y' &= \quad y\cos\alpha - z\sin\alpha, \\ z' &= \quad y\sin\alpha + z\cos\alpha. \end{aligned}$$

Соответствующая матрица $\mathsf{R}_x(\alpha)$ представлена соотношением (4.6).

Таким образом, поворот в параметрическом пространстве, изображаемый матрицей $\mathsf{P}_x(\alpha/2)$, порождает поворот в физическом пространстве вокруг оси $\mathrm{O}x$ против часовой стрелки (в положительном направлении), изображаемый матрицей $\mathsf{R}_x(\alpha)$.

Теперь самостоятельно выполните вычисления и убедитесь, что линейные преобразования, задаваемые приведёнными ниже матричными соотношениями, тождественны:

$$\begin{pmatrix} u_1' - iu_4' \\ u_2' + iu_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} + ib_{11} & a_{12} + ib_{12} \\ a_{21} + ib_{21} & a_{22} + ib_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 - iu_4 \\ u_2 + iu_3 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \\ u_3' \\ u_4' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & -b_{12} & b_{11} \\ a_{21} & a_{22} & -b_{22} & b_{21} \\ b_{21} & b_{22} & a_{22} & -a_{21} \\ -b_{11} & -b_{12} & -a_{12} & a_{11} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}. \tag{4.12}$$

Сравнивая матрицу четвёртого порядка из второго уравнения и матрицу $\mathsf{P}_x(\alpha/2)$ из соотношения (4.11), убедимся, что $a_{11} = a_{22} = \cos\alpha/2$, $b_{12} = b_{21} = -\sin\alpha/2$, $a_{12} = a_{21} = b_{11} = b_{22} = 0$. Но тогда квадратную матрицу второго порядка из первого уравнения можно записать в следующем виде:

$$\mathsf{U}_x(\alpha/2) = \begin{pmatrix} \cos\alpha/2 & -i\sin\alpha/2 \\ -i\sin\alpha/2 & \cos\alpha/2 \end{pmatrix}.$$

В результате получился ряд матриц:

$$\mathsf{R}_x(\alpha) \sim \mathsf{P}_x(\alpha/2) \sim \mathsf{U}_x(\alpha/2).$$

Матрицы эквивалентны в том смысле, что задают одно и то же линейное преобразование в исходном физическом пространстве.

Теперь подведём итоги.

1. Матрица

$$\mathsf{U}_x(\alpha/2) = \begin{pmatrix} \cos\alpha/2 & -i\sin\alpha/2 \\ -i\sin\alpha/2 & \cos\alpha/2 \end{pmatrix} \tag{4.13}$$

описывает поворот в физическом пространстве вокруг оси Ox против часовой стрелки (в положительном направлении), изображаемый соотношением (4.6), т. е. матрицей $\mathsf{R}_x(\alpha)$.

Аналогично доказываются следующие утверждения:

2. Матрица

$$\mathsf{U}_y(\alpha/2) = \begin{pmatrix} \cos\alpha/2 & -\sin\alpha/2 \\ \sin\alpha/2 & \cos\alpha/2 \end{pmatrix} \tag{4.14}$$

описывает поворот в физическом пространстве вокруг оси Oy против часовой стрелки (в положительном направлении), изображаемый соотношением (4.4), т. е. матрицей $\mathsf{R}_y(\alpha)$.

3. Матрица

$$\mathsf{U}_z(\alpha/2) = \begin{pmatrix} \cos\alpha/2 - i\sin\alpha/2 & 0 \\ 0 & \cos\alpha/2 + i\sin\alpha/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \tag{4.15}$$

описывает поворот в физическом пространстве вокруг оси Oz против часовой стрелки (в положительном направлении), изображаемый соотношением (4.3), т. е. матрицей $\mathsf{R}_z(\alpha)$.

4. Матрица

$$\mathsf{U}_0(\alpha/2) = \begin{pmatrix} \cos\alpha/2 - i\sin\alpha/2 & 0 \\ 0 & \cos\alpha/2 - i\sin\alpha/2 \end{pmatrix} = \mathsf{E}\cdot e^{-i\alpha/2}, \tag{4.16}$$

не описывает при любом угле α каких-либо поворотов в физическом пространстве, поскольку преобразование, соответствующее матрице $\mathsf{U}_0(\alpha/2)$, является тождественным: $x' = x,\ y' = y,\ z' = z$.

Утверждения 2, 3 и 4 доказываются точно так же, как выше доказано утверждение 1. Выполните соответствующие вычисления самостоятельно, предварительно восстановив, исходя из соотношений (4.12) и матриц $\mathsf{U}_y(\alpha/2), \mathsf{U}_z(\alpha/2)$ и $\mathsf{U}_0(\alpha/2)$, соответствующие матрицы, действующие в четырёхмерном параметрическом пространстве.

4.3.4 Матрицы, характеризующие положение точки физического пространства

Точке физического пространства, заданной через её сферические координаты r, θ, φ, можно поставить в соответствие:

— матрицу-столбец, составленную из декартовых координат x, y, z, согласно формулам (4.7),

— матрицу-столбец, составленную из координат u_1, u_2, u_3, u_4 параметрического пространства, согласно формулам (4.8),

— и ещё одну матрицу-столбец с комплексными элементами, поскольку два соотношения (4.12) изображают одно и то же линейное преобразование. А затем величины u_1, u_2, u_3, u_4 можно заменить в согласии с формулами (4.8).

Наконец, собрав всё воедино, можно записать:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \sim [r, \theta, \varphi] \sim \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} u_1 - iu_4 \\ u_2 + iu_3 \end{pmatrix} = \sqrt{r} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}. \tag{4.17}$$

Все эти матрицы эквивалентны в том смысле, что характеризуют одну и ту же точку физического пространства.

Если матрицу-столбец $\begin{pmatrix} u_1 - iu_4 \\ u_2 + iu_3 \end{pmatrix}$ умножить на $\mathsf{U}_0(\alpha/2)$ (см. равенство (4.16)) или, что то же самое, на комплексное число $e^{-i\alpha/2}$, то получим новую матрицу $\begin{pmatrix} u'_1 - iu'_4 \\ u'_2 + iu'_3 \end{pmatrix}$, которая определяет те же самые координаты x, y, z, что и исходная матрица.

В этом смысле можно считать, что **матрица**

$$\mathsf{w} = \begin{pmatrix} u_1 - iu_4 \\ u_2 + iu_3 \end{pmatrix} = \sqrt{r} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \tag{4.18}$$

определена с точностью до произвольного комплексного множителя с единичным модулем.

Распорядимся этим произволом, домножив матрицу $\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}$ на $e^{i\varphi/2}$, и получим:

$$\mathsf{d}_r = \sqrt{r} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \tag{4.19}$$

Именно в таком виде, как правило, изображают матрицу-столбец d_r в книгах по квантовой механике и называют её (квантово-механическим) **вектором состояния**.

Множество всех векторов состояний образует **пространство состояний**.

4.3.5 Норма вектора состояния

В качестве нормы вектора состояния принимают квадратный корень из произведения эрмитово сопряжённого вектора на исходный вектор состояния.

В частности, норма вектора d_r равна:

$$\|\mathsf{d}_r\| = \sqrt{\mathsf{d}_r^\dagger \mathsf{d}_r} = \sqrt{\sqrt{r} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \cdot \sqrt{r} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}} =$$
$$\sqrt{r}(\cos^2\tfrac{\theta}{2} + \sin^2\tfrac{\theta}{2}) = \sqrt{r}.$$

Норма вектора состояния — это своеобразный аналог длины вектора.

4.3.6 Описание направлений через половинные углы

Любой ненулевой вектор состояния d_r можно **нормировать на единицу**, разделив на его норму. Получившийся вектор, обозначим его буквой d, имеет норму, равную единице:

$$\mathsf{d} = \frac{\mathsf{d}_r}{\|\mathsf{d}_r\|} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \tag{4.20}$$

Вектор состояния d зависит лишь от двух углов сферической системы координат θ и φ и, следовательно, задаёт некоторое направление в физическом пространстве.

4.3.7 Унитарные матрицы, изображающие повороты

Существует далеко идущая аналогия между свойствами ортогональных матриц, описывающих повороты физического пространства, и свойствами соответствующих им унитарных матриц. Проследим эту аналогию.

1. Определения для ортогональных R и унитарных U матриц по форме совпадают:

$$\mathsf{R}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{R} = \mathsf{R} \cdot \mathsf{R}^\mathsf{T} = \mathsf{E},$$
$$\mathsf{U}^\dagger \cdot \mathsf{U} = \mathsf{U} \cdot \mathsf{U}^\dagger = \mathsf{E}.$$

Единственное отличие: ортогональные матрицы содержат действительные матричные элементы и действуют на векторы физического пространства, а унитарные матрицы, действующие на векторы состояний, — комплексные, в связи с чем в формулах к транспонированию добавляется ещё и комплексное сопряжение, $\mathsf{U}^\dagger = (\mathsf{U}^\mathsf{T})^* = (\mathsf{U}^*)^\mathsf{T}$.

Наконец, здесь и далее через E обозначена единичная матрица третьего порядка, если она входит в уравнения для ортогональных матриц, и единичная матрица второго порядка, если она входит в уравнение для унитарных матриц. Такое пересечение обозначений, как можно убедиться, не приводит к недоразумениям.

2. Важное свойство матриц (см. п. 3.9 и п. 3.11), которое можно принять в качестве их определений:

$$\mathsf{R}^\mathsf{T} = \mathsf{R}^{-1} \quad \text{и} \quad \mathsf{U}^\dagger = \mathsf{U}^{-1}.$$

3. Выше (см. п. п. 4.2.3) доказано, что ортогональные преобразования сохраняют длину вектора физического пространства.

Докажем аналогичное утверждение для унитарных матриц.

Подействуем на вектор состояния d некоторой унитарной матрицей U, а затем вычислим норму вектора $\mathsf{d}' = \mathsf{U}\mathsf{d}$:

$$\|\mathsf{d}'\| = \sqrt{(\mathsf{d}')^\dagger \mathsf{d}'} = \sqrt{(\mathsf{U}\mathsf{d})^\dagger \mathsf{U}\mathsf{d}} = \sqrt{(\mathsf{d}^\dagger \mathsf{U}^\dagger)\mathsf{U}\mathsf{d}} =$$
$$\sqrt{\mathsf{d}^\dagger(\mathsf{U}^\dagger\mathsf{U})\mathsf{d}} = \sqrt{\mathsf{d}^\dagger\mathsf{E}\mathsf{d}} = \sqrt{\mathsf{d}^\dagger\mathsf{d}} = \|\mathsf{d}\|.$$

Т. е. **унитарные преобразования сохраняют норму вектора состояния**.

4. Выше (см. п. п. 4.2.3) доказано, что произведение ортогональных матриц является матрицей ортогональной.

Подобное свойство справедливо и для унитарных матриц.

В самом деле, пусть матрица B является произведением двух унитарных матриц: $\mathsf{B} = \mathsf{U}_1 \cdot \mathsf{U}_2$. Тогда, принимая во внимание то, что при эрмитовом сопряжении порядок матриц меняется на противоположный, запишем: $\mathsf{B}^\dagger = \mathsf{U}_2^\dagger \cdot \mathsf{U}_1^\dagger$. И тогда легко проверяется, что $\mathsf{B} \cdot \mathsf{B}^\dagger = \mathsf{B}^\dagger \cdot \mathsf{B} = \mathsf{E}$, следовательно, матрица B тоже является унитарной.

Итак, **результат произведения унитарных матриц является унитарной матрицей.**

5. Выше, в п. п. 4.3.3, была установлена эквивалентность ортогональных и унитарных матриц в том отношении, что $\mathsf{R}_x(\alpha)$ и $\mathsf{U}_x(\alpha/2)$, $\mathsf{R}_y(\alpha)$ и $\mathsf{U}_y(\alpha/2)$, $\mathsf{R}_z(\alpha)$ и $\mathsf{U}_z(\alpha/2)$ изображают, пусть по-разному, но одинаковые повороты физического пространства.

6. Выше, в п. п. 4.2.3, доказано, что любое произведение, составленное из ортогональных матриц $\mathsf{R}_x(\alpha)$, $\mathsf{R}_y(\alpha)$ и $\mathsf{R}_z(\alpha)$ (соотношения (4.6), (4.4) и (4.3)), представляет собой ортогональную матрицу и, следовательно, описывает некоторый поворот физического пространства.

Соответственно любое произведение, составленное из унитарных матриц $\mathsf{U}_x(\alpha/2)$, $\mathsf{U}_y(\alpha/2)$ и $\mathsf{U}_z(\alpha/2)$ (соотношения (4.13), (4.14) и (4.15)), представляет собой унитарную матрицу, изображающую некоторый поворот физического пространства.

7. В п. 3.9 доказано, что определитель ортогональной матрицы равен или $+\mathbf{1}$, или $-\mathbf{1}$.

Аналогично рассуждаем для унитарных матриц. Принимая во внимание теорему умножения определителей (1.17), равенство (1.16), а также соотношения $\mathsf{U}^\dagger \cdot \mathsf{U} = \mathsf{E}$ и $\mathrm{Det}\mathsf{E} = 1$, получим:

$$\mathrm{Det}[\mathsf{U}^\dagger \cdot \mathsf{U}] = \mathrm{Det}(\mathsf{U}^\mathsf{T})^* \cdot \mathrm{Det}\mathsf{U} = (\mathrm{Det}\mathsf{U})^* \cdot \mathrm{Det}\mathsf{U} = |\mathrm{Det}\mathsf{U}|^2 = 1.$$

Т. е. из того, что матрица U унитарная, следует лишь то, что её определитель является комплексным числом с единичным модулем.

Тем не менее, непосредственно вычисляя определители, убеждаемся, что у всех матриц $\mathsf{R}_x(\alpha)$, $\mathsf{R}_y(\alpha)$, $\mathsf{R}_z(\alpha)$ и $\mathsf{U}_x(\alpha/2)$, $\mathsf{U}_y(\alpha/2)$, $\mathsf{U}_z(\alpha/2)$ и, следовательно, у любых их произведений, определители равны единице.

4.4 Некоторые свойства матриц Паули

4.4.1 Определения

Матрицы $\mathsf{U}_x(\alpha/2)$, $\mathsf{U}_y(\alpha/2)$, $\mathsf{U}_z(\alpha/2)$ (соотношения (4.13), (4.14) и (4.15)) имеют одинаковую структуру:

$$\mathsf{U}_x(\alpha/2) = \begin{pmatrix} \cos\alpha/2 & -i\sin\alpha/2 \\ -i\sin\alpha/2 & \cos\alpha/2 \end{pmatrix} = \mathsf{E}\cos\alpha/2 - i\sigma_x \sin\alpha/2,$$

$$\mathsf{U}_y(\alpha/2) = \begin{pmatrix} \cos\alpha/2 & -\sin\alpha/2 \\ \sin\alpha/2 & \cos\alpha/2 \end{pmatrix} = \mathsf{E}\cos\alpha/2 - i\sigma_y \sin\alpha/2,$$

$$\mathsf{U}_z(\alpha/2) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} = \mathsf{E}\cos\alpha/2 - i\sigma_z \sin\alpha/2,$$

где

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4.21}$$

Матрицы σ_x, σ_y, σ_z называются σ **матрицами Паули.**

4.4.2 Алгебраические соотношения для матриц Паули

Все нижеперечисленные свойства матриц Паули легко проверяются непосредственно.

1. Квадрат любой матрицы Паули равен единичной матрице:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathsf{E}. \tag{4.22}$$

2. Определитель любой матрицы Паули равен -1.
3. Ещё одно важное свойство матриц Паули — их эрмитовость:

$$\sigma_x^\dagger = \sigma_x, \quad \sigma_y^\dagger = \sigma_y, \quad \sigma_z^\dagger = \sigma_z. \tag{4.23}$$

4. Правила умножения матриц Паули:

$$\begin{aligned} \sigma_x \cdot \sigma_y &= i\sigma_z, \\ \sigma_y \cdot \sigma_z &= i\sigma_x, \\ \sigma_z \cdot \sigma_x &= i\sigma_y. \end{aligned} \tag{4.24}$$

5. Матрицы Паули антикоммутируют:

$$\begin{aligned} \sigma_x \cdot \sigma_y &= -\sigma_y \cdot \sigma_x, \\ \sigma_y \cdot \sigma_z &= -\sigma_z \cdot \sigma_y, \\ \sigma_z \cdot \sigma_x &= -\sigma_x \cdot \sigma_z. \end{aligned} \tag{4.25}$$

6. Коммутационные соотношения:

$$\begin{aligned} \sigma_x \cdot \sigma_y - \sigma_y \cdot \sigma_x &= 2i\sigma_z, \\ \sigma_y \cdot \sigma_z - \sigma_z \cdot \sigma_y &= 2i\sigma_x, \\ \sigma_z \cdot \sigma_x - \sigma_x \cdot \sigma_z &= 2i\sigma_y. \end{aligned} \tag{4.26}$$

4.4.3 Связь матриц Паули с KS-преобразованием

Принимая во внимание равенство (4.18), получим:

$$x = \mathsf{w}^\dagger \sigma_x \mathsf{w} = \begin{pmatrix} u_1 + iu_4 & u_2 - iu_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 - iu_4 \\ u_2 + iu_3 \end{pmatrix} = 2(u_1u_2 - u_3u_4).$$

Аналогично:

$$\begin{aligned} y &= \mathsf{w}^\dagger \sigma_y \mathsf{w} = 2(u_1u_3 + u_2u_4), \\ z &= \mathsf{w}^\dagger \sigma_z \mathsf{w} = (u_1^2 - u_2^2 - u_3^2 + u_4^2), \\ r &= \mathsf{w}^\dagger \mathsf{E} \mathsf{w} = \mathsf{w}^\dagger \mathsf{w} = (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 + u_4^2). \end{aligned} \tag{4.27}$$

Эти формулы в точности совпадают с KS–преобразованием, т. е. соотношениями (4.9).

4.5 Описание направлений и поворотов с помощью матрицы плотности

Из матрицы-столбца d (формула (4.20)) можно сконструировать квадратную матрицу $\mathsf{M} = \mathsf{d}\mathsf{d}^\dagger$, которая, очевидно, задаёт такое же направление в физическом пространстве, что и матрица d.

Матрица $\mathsf{M} = \mathsf{d}\mathsf{d}^\dagger$ в руководствах по квантовой механике называется матрицей плотности.

Явное выражение для M имеет следующий вид:

$$\begin{gathered}
\mathsf{M} = \mathsf{d}\mathsf{d}^\dagger = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \end{pmatrix} = \\
\begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \\
\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\cos\theta & \sin\theta\cos\varphi - i\sin\theta\sin\varphi \\ \sin\theta\cos\varphi + i\sin\theta\sin\varphi & 1-\cos\theta \end{pmatrix} = \\
\frac{1}{2}[\mathsf{E} + (\sin\theta\cos\varphi)\sigma_x + (\sin\theta\sin\varphi)\sigma_y + (\cos\theta)\sigma_z].
\end{gathered} \tag{4.28}$$

А теперь слегка изменим обозначения: вместо d будем записывать d_+, а M заменим на M_+. Кроме того, из уравнений (4.2) и (4.7) следует, что

$\sin\theta\cos\varphi = \frac{x}{r} = n,\ \sin\theta\sin\varphi = \frac{y}{r} = m,\ \cos\theta = \frac{z}{r} = l,$ — направляющие косинусы. Тогда равенство (4.28) принимает вид:

$$\mathsf{M}_+ = \mathsf{d}_+\mathsf{d}_+^\dagger = \frac{1}{2}(\mathsf{E} + n\sigma_x + m\sigma_y + l\sigma_z).$$

Вектор d_-, характеризующий противоположное направление в физическом пространстве, получается, если выполнить в выражении для вектора $\mathsf{d} = \mathsf{d}_+$ следующие замены: $\theta \longrightarrow 180^\circ - \theta$ и $\varphi \longrightarrow 180^\circ + \varphi$:

$$\mathsf{d}_- = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}.$$

Противоположное направление характеризуется тем, что все, без исключения, декартовы координаты и, следовательно, направляющие косинусы имеют противоположные знаки. Поэтому заменив $n,\ m,\ l$ на $-n,\ -m,\ -l$ сразу получим соответствующую матрицу плотности M_-:

$$\mathsf{M}_- = \mathsf{d}_-\mathsf{d}_-^\dagger = \frac{1}{2}(\mathsf{E} - n\sigma_x - m\sigma_y - l\sigma_z).$$

Назовём разность $\sigma_d = \mathsf{M}_+ - \mathsf{M}_-$ спиновой матрицей.

$$\sigma_d = \mathsf{M}_+ - \mathsf{M}_- = \mathsf{d}_+\mathsf{d}_+^\dagger - \mathsf{d}_-\mathsf{d}_-^\dagger = n\sigma_x + m\sigma_y + l\sigma_z. \tag{4.29}$$

Согласно равенству (4.19) вектор d получается из d_r при $r = 1$. Это значит, что вектору d_+ и, следовательно, вектору d_- соответствуют в физическом пространстве единичные векторы. Но в таком случае, принимая во внимание соотношения (4.2), получим: $n = x,\ m = y,\ l = z$. Отсюда

$$\sigma_d = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z = \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix}.$$

Наконец, выясним, как преобразуется матрица плотности при поворотах физического пространства.

Вектор состояния d преобразуется согласно формуле $\mathsf{d}' = \mathsf{U}\mathsf{d}$, здесь U одна из матриц U_x, U_y и U_z (соотношения (4.13), (4.14) и (4.15)) или их любое произведение.

Отсюда следует, $(\mathsf{d}')^\dagger = \mathsf{d}^\dagger\mathsf{U}^\dagger$, и окончательно:

$$\mathsf{M}' = \mathsf{d}'(\mathsf{d}')^\dagger = \mathsf{U}\mathsf{d}\mathsf{d}^\dagger\mathsf{U}^\dagger = \mathsf{U}\mathsf{M}\mathsf{U}^\dagger. \tag{4.30}$$

Очевидно, что спиновая матрица преобразуется точно по такому же закону: $\sigma'_d = \mathsf{U}\sigma_{\mathsf{d}}\mathsf{U}^{\dagger}$.

4.6 Кватернионы

4.6.1 Матричная форма записи кватернионов

Выражение, состоящее из четырёх слагаемых

$$\mathsf{q} = a\mathsf{E} + ib\sigma_x + ic\sigma_y + id\sigma_z, \tag{4.31}$$

где a, b, c, d — некоторые действительные числа, является матричной формой записи т. н. кватернионов.

Термин кватернион произошёл от лат. quaterni, что означает по четыре.

Очевидно, что выражения (4.13), (4.14) и (4.15) для матриц $\mathsf{U}_x(\alpha/2)$, $\mathsf{U}_y(\alpha/2)$ и $\mathsf{U}_z(\alpha/2)$, задающие повороты физического пространства через половинные углы, являются кватернионами.

Произведение, составленное из двух, трёх и, вообще, конечного числа таких матриц тоже является кватернионом, потому что произведение двух разных $\sigma-$матриц Паули даёт третью матрицу с тем или иным знаком, и, кроме того, квадрат любой матрицы Паули равен единичной матрице.

Наконец, оказывается, что **кватернионы являются естественным обобщением комплексных чисел; но в отличие от комплексных чисел, они содержат не одну, а три мнимые единицы**.

А теперь обо всём, что касается кватернионов, подробнее.

4.6.2 Алгебраическая форма записи кватернионов

В главе 3 осуществлялся переход от матричной записи двойных, дуальных и комплексных чисел к алгебраической форме их записи. Теперь выполним аналогичный переход для кватернионов.

Для этого сделаем в уравнении (4.31) замены: $\mathsf{E} \to 1$, $i\sigma_x \to \mathbf{i}$, $i\sigma_y \to -\mathbf{j}$, $c \to -c$, $i\sigma_z \to \mathbf{k}$, причём единицу можно совсем не писать.

Обратите внимание на то, что $i\sigma_y$ заменяется именно на $-\mathbf{j}$, а не на $+\mathbf{j}$ с той целью, чтобы формулы для парных произведений $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ имели одинаковый вид.

Тогда получим алгебраическую форму записи кватернионов:

$$\mathsf{q} = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k},$$

При перемножении кватернионов встречаются квадраты σ-матриц, а также произведения двух различных σ-матриц. Из равенства $\sigma_x^2 = \mathsf{E}$ получаем следующую замену: $(i\sigma_x)^2 \to \mathbf{i}^2 = -1$. Из равенства $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$ следует: $i\sigma_x(-i\sigma_y) = i\sigma_z \to \mathbf{ij} = \mathbf{k}$. Наконец из равенства $\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x$ следует: $i\sigma_x(-i\sigma_y) = -(-i\sigma_y)i\sigma_x \to \mathbf{ij} = -\mathbf{ji}$. Поэтому $\mathbf{ji} = -\mathbf{k}$.

Аналогично из равенств (4.22), (4.24) и (4.25) получаются все прочие соотношения для мнимых единиц.

Итак, мнимые единицы удовлетворяют равенствам:

$$\begin{aligned}
&\mathbf{i}^2 = -1, \quad \mathbf{j}^2 = -1, \quad \mathbf{k}^2 = -1,\\
&\mathbf{ij} = \mathbf{k}, \quad \mathbf{jk} = \mathbf{i}, \quad \mathbf{ki} = \mathbf{j},\\
&\mathbf{ji} = -\mathbf{k}, \quad \mathbf{ik} = -\mathbf{j}, \quad \mathbf{kj} = -\mathbf{i}.
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Две последние формулы в строках легко восстанавливаются с помощью циклических перестановок согласно мнемоническому правилу:

$$\begin{array}{c} \longrightarrow \text{слева направо знак: } + \\ \ldots \quad \mathbf{i} \quad \mathbf{j} \quad \mathbf{k} \quad \mathbf{i} \quad \mathbf{j} \quad \mathbf{k} \quad \mathbf{i} \quad \mathbf{j} \quad \mathbf{k} \quad \mathbf{i} \quad \mathbf{j} \quad \ldots \\ \longleftarrow \text{справа налево знак: } - \end{array}$$

4.6.3 Чем похожи и чем различаются комплексные числа и кватернионы

Прежде всего, очевидно, что кватернионы являются обобщением комплексных чисел. В самом деле, обычное комплексное число получается из кватерниона, если приравнять коэффициенты при каких-либо двух мнимых единицах нулю. Тогда останется лишь одна мнимая единица, как это и есть у комплексных чисел.

Операции умножения кватерниона на число, сложения и вычитания кватернионов выполняются точно так же, как соответствующие операции с комплексными числами. Единственное различие — вместо одной комплексной единицы есть три.

Перемножение кватернионов выполняется в соответствии с равенствами (4.32).

Так же, как комплексные числа, кватернионы можно сопрягать, заменив знаки при всех мнимых единицах на противоположные. В частности, кватернионы

$$\mathsf{q} = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k} \quad \text{и} \quad \mathsf{q}^* = a - b\mathbf{i} - c\mathbf{j} - d\mathbf{k}$$

взаимно сопряжены. Отсюда

$$r^2 = \mathsf{q}^*\mathsf{q} = \mathsf{q}\mathsf{q}^* = a^2 + b^2 + c^2 + d^2.$$

Здесь r называется **модулем кватерниона**.

Деление возможно на любой кватернион, модуль которого не равен нулю.

А далее аналогия заканчивается: **произведение кватернионов зависит, в общем случае, от их порядка**:

$$\mathsf{q}_1\mathsf{q}_2 \neq \mathsf{q}_2\mathsf{q}_1.$$

Поэтому следует различать левое и правое частное:

$$\left(\frac{\mathsf{q}_1}{\mathsf{q}_2}\right)_{\text{л}} = \left(\frac{\mathsf{q}_2^*\mathsf{q}_1}{\mathsf{q}_2^*\mathsf{q}_2}\right) = \left(\frac{\mathsf{q}_2^*\mathsf{q}_1}{r_2^2}\right),$$
$$\left(\frac{\mathsf{q}_1}{\mathsf{q}_2}\right)_{\text{пр}} = \left(\frac{\mathsf{q}_1\mathsf{q}_2^*}{\mathsf{q}_2\mathsf{q}_2^*}\right) = \left(\frac{\mathsf{q}_1\mathsf{q}_2^*}{r_2^2}\right),$$

здесь r_2^2 — квадрат модуля кватерниона-делителя.

Наконец, при сопряжении произведения кватернионов необходимо следить за порядком произведения сомножителей:

$$(\mathsf{q}_1\mathsf{q}_2)^* = \mathsf{q}_2^*\mathsf{q}_1^* \neq \mathsf{q}_1^*\mathsf{q}_2^*.$$

Т. е. **в результате сопряжения сомножители-кватернионы оказываются не только сопряжёнными, но так же как и матрицы, они меняют порядок следования на обратный**. Это не удивляет, потому что кватернионы, по сути, те же матрицы, а сопряжение кватернионов подобно эрмитовому сопряжению матриц.

Наконец, любой кватернион q можно записать в следующем виде:

$$\mathsf{q} = a + \mathsf{p},$$

где a — действительная (скалярная) часть кватерниона, а p — чисто мнимый (векторный) кватернион, квадрат которого меньше или равен нулю:

$$\mathsf{p}^2 = (b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k})^2 = -(b^2 + c^2 + d^2) = -r^2 \leq 0.$$

4.6.4 Описание направлений с помощью кватернионов

Направления в физическом пространстве задают чисто мнимые (векторные) кватернионы с единичным модулем:

$$\mathsf{p} = n\mathbf{i} + m\mathbf{j} + l\mathbf{k}, \tag{4.33}$$
$$n = \frac{x}{r}, \quad m = \frac{y}{r}, \quad l = \frac{z}{r}, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2},$$

здесь через x, y, z обозначены, как обычно, декартовы координаты, а величины n, m, l являются направляющими косинусами.

Следует, однако, помнить, что здесь $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ не орты декартовой системы координат, а мнимые единицы, поэтому операции с ними удовлетворяют равенствам (4.32).

4.6.5 Описание поворотов с помощью кватернионов

Рассмотрим выражения:

$$\begin{array}{ll} \mathsf{r}'_\mathsf{x} = \mathsf{u}_\mathsf{x}\mathsf{r}\mathsf{u}^*_\mathsf{x}, & \mathsf{u}_x(\alpha/2) = \cos\alpha/2 + \mathbf{i}\sin\alpha/2, \\ \mathsf{r}'_\mathsf{y} = \mathsf{u}_\mathsf{y}\mathsf{r}\mathsf{u}^*_\mathsf{y}, & \mathsf{u}_y(\alpha/2) = \cos\alpha/2 + \mathbf{j}\sin\alpha/2, \\ \mathsf{r}'_\mathsf{z} = \mathsf{u}_\mathsf{z}\mathsf{r}\mathsf{u}^*_\mathsf{z}, & \mathsf{u}_z(\alpha/2) = \cos\alpha/2 + \mathbf{k}\sin\alpha/2, \end{array} \tag{4.34}$$

здесь $\mathsf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$ — любой векторный кватернион.

Обратите внимание: кватернионы $\mathsf{u}_x(\alpha/2), \mathsf{u}_y(\alpha/2), \mathsf{u}_z(\alpha/2)$, если их представить в матричной форме, совпадут, по крайней мере, с точностью до знаков при σ-матрицах Паули, с унитарными матрицами $\mathsf{U}_x(\alpha/2)$, $\mathsf{U}_y(\alpha/2)$, $\mathsf{U}_z(\alpha/2)$ из соотношений (4.13), (4.14), (4.15) соответственно.

Кроме того, выражения (4.34) для кватернионов по форме напоминают преобразования матрицы плотности (4.30) при поворотах. Поэтому неудивительно, что они изображают повороты физического пространства на угол α в положительном направлении соответственно вокруг осей Ox, Oy, Oz.

Убедимся в этом на примере первого выражения:

$$\begin{aligned}
&\mathsf{r}'_x = x'\mathbf{i} + y'\mathbf{j} + z'\mathbf{k} = (\cos\alpha/2 + \mathbf{i}\sin\alpha/2)(x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k})(\cos\alpha/2 - \mathbf{i}\sin\alpha/2) = \\
&x\mathbf{i}(\cos\alpha/2 + \mathbf{i}\sin\alpha/2)(\cos\alpha/2 - \mathbf{i}\sin\alpha/2) + \\
&y(\cos\alpha/2 + \mathbf{i}\sin\alpha/2)\mathbf{j}(\cos\alpha/2 - \mathbf{i}\sin\alpha/2) + \\
&z(\cos\alpha/2 + \mathbf{i}\sin\alpha/2)\mathbf{k}(\cos\alpha/2 - \mathbf{i}\sin\alpha/2) = \\
&x\mathbf{i}(\cos^2\alpha/2 + \sin^2\alpha/2) + y(\mathbf{j}\cos\alpha/2 + \mathbf{k}\sin\alpha/2)(\cos\alpha/2 - \mathbf{i}\sin\alpha/2) + \\
&z(\mathbf{k}\cos\alpha/2 - \mathbf{j}\sin\alpha/2)(\cos\alpha/2 - \mathbf{i}\sin\alpha/2) = \\
&x\mathbf{i} + y(\mathbf{j}\cos^2\alpha/2 + \mathbf{k}\sin\alpha/2\cos\alpha/2 + \mathbf{k}\sin\alpha/2\cos\alpha/2 - \mathbf{j}\sin^2\alpha/2) + \\
&z(\mathbf{k}\cos^2\alpha/2 - \mathbf{j}\sin\alpha/2\cos\alpha/2 - \mathbf{j}\sin\alpha/2\cos\alpha/2 - \mathbf{k}\sin^2\alpha/2) = \\
&x\mathbf{i} + y\mathbf{j}(\cos^2\alpha/2 - \sin^2\alpha/2) + 2y\mathbf{k}\sin\alpha/2\cos\alpha/2 + \\
&z\mathbf{k}(\cos^2\alpha/2 - \sin^2\alpha/2) - 2z\mathbf{j}\sin\alpha/2\cos\alpha/2 = \\
&x\mathbf{i} + y\mathbf{j}\cos\alpha + y\mathbf{k}\sin\alpha + z\mathbf{k}\cos\alpha - z\mathbf{j}\sin\alpha = \\
&x\mathbf{i} + (y\cos\alpha - z\sin\alpha)\mathbf{j} + (y\sin\alpha + z\cos\alpha)\mathbf{k}.
\end{aligned}$$

Отсюда, приравняв коэффициенты при мнимых единицах, получим:

$$
\begin{aligned}
x' &= x, \\
y' &= y \cdot \cos\alpha - z \cdot \sin\alpha, \\
z' &= y \cdot \sin\alpha + z \cdot \cos\alpha,
\end{aligned}
$$

что в точности совпадает с линейным преобразованием (4.5), описывающим поворот вокруг оси Ox в положительном направлении.

Аналогично проверяются две другие формулы.

4.7 Угол между двумя направлениями

Пусть два направления заданы через декартовы координаты: x_1, y_1, z_1 и x_2, y_2, z_2. Косинус угла между ними вычисляется по формуле (3.16):

$$\cos\alpha = \frac{x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2}{r_1r_2}.$$

Вводя сферические координаты

$$
\begin{aligned}
x_1 &= r_1\sin\theta_1\cos\varphi_1, \quad y_1 = r_1\sin\theta_1\sin\varphi_1, \quad z_1 = r_1\cos\theta_1, \\
x_2 &= r_2\sin\theta_2\cos\varphi_2, \quad y_2 = r_2\sin\theta_2\sin\varphi_2, \quad z_2 = r_2\cos\theta_2,
\end{aligned}
$$

можно записать:

$$\cos\beta = \cos\theta_1\cos\theta_2 + \sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\varphi_1 - \varphi_2). \tag{4.35}$$

Выразим этот угол через половинные углы. Исходим из того, что два направления заданы векторами состояний (4.20). Индексом 1 и 2 будем указывать номер направления.

Вычислим сначала самое простое выражение, которое только можно составить из таких матриц:

$$\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1 = \cos\theta_1/2 \cdot \cos\theta_2/2 + \sin\theta_1/2 \cdot \sin\theta_2/2 \cdot e^{i(\varphi_1-\varphi_2)}.$$

Угол между двумя направлениями является действительным числом, а $\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1$ — число комплексное. Тогда запишем самое простое действительное число, которое можно составить из выражения $\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1$, а затем применим формулу Эйлера (3.15) и равенство (4.35):

$$
\begin{aligned}
&\left|\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1\right|^2 = (\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1)(\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1)^* = (\cos\theta_1/2 \cdot \cos\theta_2/2 + \\
&\sin\theta_1/2 \cdot \sin\theta_2/2 \cdot e^{i(\varphi_1-\varphi_2)})(\cos\theta_1/2 \cdot \cos\theta_2/2 + \\
&\sin\theta_1/2 \cdot \sin\theta_2/2 \cdot e^{-i(\varphi_1-\varphi_2)}) = \cos^2\theta_1/2 \cdot \cos^2\theta_2/2 + \\
&\cos\theta_1/2 \cdot \cos\theta_2/2 \cdot \sin\theta_1/2 \cdot \sin\theta_2/2 \cdot (e^{i(\varphi_1-\varphi_2)} + e^{-i(\varphi_1-\varphi_2)}) + \\
&\sin^2\theta_1/2 \cdot \sin^2\theta_2/2 = \\
&\tfrac{1}{4}(1+\cos\theta_1)(1+\cos\theta_2) + \tfrac{1}{4} \cdot \sin\theta_1 \cdot \sin\theta_2 \cdot [\cos(\varphi_1-\varphi_2) + i\sin(\varphi_1-\varphi_2) + \\
&\cos(\varphi_1-\varphi_2) - i\sin(\varphi_1-\varphi_2)] + \tfrac{1}{4}(1-\cos\theta_1)(1-\cos\theta_2) = \\
&\tfrac{1}{2}[1 + \cos\theta_1\cos\theta_2 + \sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)] = \tfrac{1}{2}[1+\cos\beta] = \cos^2\beta/2.
\end{aligned}
$$

Понятно, что угол β не зависит от того, какое направление принимается нами первым, а какое вторым. И поскольку комплексное сопряжение комплексного числа означает его эрмитово сопряжение, окончательно получаем:

$$\begin{aligned}
&\cos^2\beta/2 = \left|\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1\right|^2 = (\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1)(\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1)^* = (\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1)(\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1)^\dagger = \\
&(\mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{d}_1)(\mathsf{d}_1^\dagger\mathsf{d}_2) = \mathsf{d}_2^\dagger(\mathsf{d}_1\mathsf{d}_1^\dagger)\mathsf{d}_2 = \mathsf{d}_2^\dagger\mathsf{M}_1\mathsf{d}_2, \\
&\text{или, аналогично,} \\
&\cos^2\beta/2 = \mathsf{d}_1^\dagger\mathsf{M}_2\mathsf{d}_1.
\end{aligned} \tag{4.36}$$

Здесь M_1 и M_2 — матрицы плотности для первого и второго направления соответственно.

4.8 Спиноры

Есть ещё один способ описания направлений и поворотов физического пространства, основанный не на векторах состояния, а на спинорах.

Во многих формулах, например, в формуле (4.36), встречается не только вектор d, изображающий направление, но также эрмитово сопряжённый ему вектор $\mathsf{d}^\dagger$. При этом пространство состояний как бы удваивается за счёт эрмитового сопряжения.

Но, очевидно, что эрмитово сопряжённый вектор $\mathsf{d}^\dagger$, вообще-то говоря, можно представить в исходном пространстве состояний, т. е. в том же самом пространстве состояний, что и вектор d.

Посмотрим, что из этого получится.

Согласно п. п. 4.3.7 любая матрица U, представляющая собой произведение конечного числа унитарных матриц $\mathsf{U}_x(\alpha/2)$, $\mathsf{U}_y(\alpha/2)$ и $\mathsf{U}_z(\alpha/2)$ (соотношения (4.13), (4.14) и (4.15)), изображающих повороты в физическом пространстве, является унитарной матрицей. Обозначим её через U. Она изображает, в свою очередь, тоже некоторый поворот физического пространства.

Далее, каждая матрица $\mathsf{U}_x(\alpha/2)$, $\mathsf{U}_y(\alpha/2)$ и $\mathsf{U}_z(\alpha/2)$ имеет определитель, равный единице, поэтому принимая во внимание теорему об умножении определителей (1.17), убеждаемся, что $\Delta = \operatorname{Det}\mathsf{U} = 1$.

Запишем унитарную матрицу U в самом общем виде:

$$\mathsf{U} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}, \quad \text{здесь} \quad \Delta = \alpha\delta - \beta\gamma = 1.$$

Обратим матрицу U, воспользовавшись готовым результатом (соотношение (1.13)). Для этого элементы главной диагонали следует поменять местами, а элементы второстепенной диагонали нужно умножить на -1, кроме того, полученную матрицу следовало бы разделить на определитель Δ, но $\Delta = 1$. И тогда, принимая во внимание унитарность матрицы U, получим:

$$\mathsf{U}^\dagger = \mathsf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \delta & -\beta \\ -\gamma & \alpha \end{pmatrix},$$

Матрице U соответствует линейное преобразование $\Psi' = \mathsf{U}\Psi$, здесь Ψ' и Ψ — некоторые матрицы-столбцы:

$$\Psi' = \begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \end{pmatrix} \text{ и } \Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Эрмитово сопрягая равенство $\Psi' = \mathsf{U}\Psi$, получим: $(\Psi')^\dagger = \Psi^\dagger\mathsf{U}^\dagger = \Psi^\dagger\mathsf{U}^{-1}$, теперь здесь $\Psi^\dagger$ и $(\Psi')^\dagger$ — матрицы-строки: $\Psi^\dagger = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix}$ и $(\Psi')^\dagger = \begin{pmatrix} \psi_1'^* & \psi_2'^* \end{pmatrix}$.

Наконец, после транспонирования выражение для $(\Psi')^\dagger$ принимает вид: $(\Psi')^* = \mathsf{W}\Psi^*$, здесь

$$(\Psi')^* = \begin{pmatrix} \psi_1'^* \\ \psi_2'^* \end{pmatrix} \text{ и } \Psi^* = \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \end{pmatrix},$$

$$\mathrm{W} = (\mathsf{U}^{-1})^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \delta & -\gamma \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Итак, матрицы-столбцы при описании поворотов физического пространства могут преобразовываться двояко: или согласно матрице U, или согласно матрице W. И поэтому мы имеем дело с существенно различающимися математическими объектами.

Матрица-столбец, преобразующаяся согласно матрице U, называется **контравариантным спинором**; матрица-столбец, преобразующаяся согласно матрице W, называется **ковариантным спинором**.

На письме они различаются тем, что индексы компонент контравариантного спинора принято писать наверху: $\varphi^\lambda = \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix}$, а ковариантного спинора — внизу: $\chi_\lambda = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$, т. е.

$$(\varphi^\lambda)' = \mathsf{U}\varphi^\lambda, \quad \chi_\lambda' = \mathsf{W}\chi_\lambda\,. \tag{4.37}$$

Двумерное комплексное евклидово пространство, где определены спиноры, называется **спинорным пространством**.

Далее, в спинорном пространстве вводится **скалярное произведение** одного ко- и одного контравариантного спинора:

$$\chi_\lambda\varphi^\lambda = \chi_1\varphi^1 + \chi_2\varphi^2 = \begin{pmatrix} \chi_1 & \chi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix},$$

которое инвариантно относительно преобразований, описывающих поворот:

$$\begin{pmatrix} \chi_1' & \chi_2' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\varphi^1)' \\ (\varphi^2)' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 & \chi_2 \end{pmatrix} \mathsf{W}^{\mathsf{T}}\mathsf{U} \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 & \chi_2 \end{pmatrix} ((\mathsf{U}^{-1})^{\mathsf{T}})^{\mathsf{T}}\mathsf{U} \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \chi_1 & \chi_2 \end{pmatrix} \mathsf{U}^{-1}\mathsf{U} \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 & \chi_2 \end{pmatrix} \mathsf{E} \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 & \chi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix}.$$

Оказывается, контравариантные и ковариантные спиноры взаимосвязаны.

Запишем вторую формулу (4.37) в виде линейного преобразования:

$$\begin{aligned} \chi_1' &= \delta\chi_1 - \gamma\chi_2 \\ \chi_2' &= -\beta\chi_1 + \alpha\chi_2 \end{aligned}$$

Или, что то же самое,

$$\begin{aligned} -\chi_2' &= \alpha(-\chi_2) + \beta\chi_1 \\ \chi_1' &= \gamma(-\chi_2) + \delta\chi_1 \end{aligned}$$

Отсюда следует, что компоненты видоизменённого ковариантного спинора χ_1 и χ_2 преобразуются по правилу преобразования контравариантного спинора с компонентами χ^1 и χ^2

$$\begin{aligned} (\chi^1)' &= \alpha\chi^1 + \beta\chi^2, \\ (\chi^2)' &= \gamma\chi^1 + \delta\chi^2, \end{aligned}$$

при этом $\quad -\chi_2 = \chi^1, \quad \chi_1 = \chi^2.$

Пусть теперь

$$\chi_\mu = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}, \quad \chi^\lambda = \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon^{\lambda\mu} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_{\mu\lambda} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Непосредственно убеждаемся, что произведение матриц $\varepsilon^{\lambda\mu}$ и $\varepsilon_{\mu\lambda}$ в любом порядке равно единичной матрице.

Тогда взаимосвязь между ковариантными и контравариантными компонентами спиноров можно записать:

$$\chi_\mu = \varepsilon_{\mu\lambda}\chi^\lambda, \quad \chi^\lambda = \varepsilon^{\lambda\mu}\chi_\mu.$$

Эти выражения можно интерпретировать двояко: и как матричные, и как тензорные соотношения; тензорные обозначения в этой книге изучать не будем.

Дальнейшее развитие теории спиноров приводит к спинорному исчислению, которое по форме очень похоже на тензорное исчисление и имеет широкое применение в математике и теоретической физике.

Наконец, следует сделать одно замечание.

Вектору-столбцу $\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}$, если его интерпретировать как вектор состояния, можно поставить в соответствие эрмитово сопряжённый вектор $\begin{pmatrix}\chi_1^* & \chi_2^*\end{pmatrix}$. Если этот же вектор-столбец интерпретировать как ковариантный спинор, то ему можно поставить в соответствие контравариантный спинор $\begin{pmatrix}\chi^1\\ \chi^2\end{pmatrix}$, или, принимая во внимание равенства $\chi^1 = -\chi_2, \quad \chi^2 = \chi_1$, вектор-столбец $\begin{pmatrix}-\chi_2\\ \chi_1\end{pmatrix}$.

Т. е. способы описания вращений с привлечением векторов состояния и с привлечением спиноров — существенно различающиеся описания.

4.9 Приложение к главе 4. Сферическая астрономия и кватернионы

4.9.1 Задание видимых положений небесных объектов

Назначение математики — способствовать решению практически значимых задач. Поэтому сделаем один шаг в сторону от основной темы и убедимся, что возможно изложение сферической астрономии, существенно отличающееся от традиционного.

Сферическая астрономия занимается изучением видимых положений и движений небесных объектов. Её основополагающей задачей является введение систем небесных координат и установление связей между ними.

С этой целью традиционно вводится небесная сфера, а связь между координатами устанавливается с помощью формул сферической геометрии. Такой подход является, по своей сути, чисто геометрическим.

Ниже эта задача решается совсем по–другому — кватернионы для этого идеально подходят. Такой подход в чём-то напоминает аналитическую геометрию.

Вся теория строится для какого–то конкретного наблюдателя, поэтому начало координат помещают в ту точку, где находится наблюдатель. Далее будем считать для определённости, что **наблюдатель находится в Северном полушарии Земли**.

Видимые положения небесных объектов характеризуются только лишь направлениями на объект, которые, как известно, задаются в сферической системе координат (см. формулы (4.7)) двумя углами θ и φ. Или, что то же самое, каждое направление характеризуется тремя направляющими косинусами n, m, l:

$$n = \frac{X}{R} = \sin\theta' \cos\varphi',$$

$$m = \frac{Y}{R} = \sin\theta' \sin\varphi',$$

$$l = \frac{Z}{R} = \cos\theta'.$$

Здесь штрихи при θ' и φ' введены для того, чтобы избежать в дальнейшем пересечения обозначений, X, Y, Z — декартовы координаты, $R = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}$.

Поэтому направление на небесный объект будем задавать чисто мнимым (векторным) кватернионом q:

$$\mathsf{q} = n\mathbf{i} + m\mathbf{j} + l\mathbf{k} = \sin\theta' \cos\varphi' \mathbf{i} + \sin\theta' \sin\varphi' \mathbf{j} + \cos\theta' \mathbf{k}, \tag{4.38}$$

здесь $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ — мнимые единицы, а не орты декартовой системы координат. Модуль q, очевидно, равен единице: $\sqrt{\mathsf{q}\mathsf{q}^*} = 1$.

Каждая мнимая единица $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$, как и любой другой кватернион, после выбора декартовой или соответствующей сферической системы координат задаёт какое-то вполне определённое направление, причём направления, задаваемые кватернионами $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$, составляют правую тройку.

В дальнейшем, вместо того, чтобы как-то определять декартову систему координат, будем сразу задавать направления кватернионов $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ и применять соотношение (4.38).

4.9.2 Исходные основные направления

Основные направления — это особые, объективно выделенные направления, именно поэтому они являются опорными при введении систем небесных координат.

1. Отвесная линия, зенит, надир.

Отвес — это небольшой груз на шнурке, указывающий направление силы тяжести. Отвесная линия, т. е. линия отвеса, задаёт два основных направления, которые называются:

- зенит — направление противоположно силе тяжести,
- надир — направление совпадает с силой тяжести.

2. Ось мира, Северный и Южный полюс мира.

Наблюдателю представляется, что всё небо вращается как единое целое вокруг оси мира, которая задаёт два противоположных направления — на Северный и на Южный полюс мира.

Наблюдателю представляется, что вращение неба в окрестностях Северного полюса мира происходит против часовой стрелки, а в окрестностях Южного — по часовой стрелке.

Есть и другие основные направления, которые имеют отношение к эклиптике, а также к срединной линии Млечного Пути. Здесь они не рассматриваются.

3. Основные направления небесного меридиана

Ось мира и отвесная линия задают плоскость небесного меридиана (см. Рис. 4.2).

В этой плоскости расположены направления на полюса мира, зенит, надир, и, кроме того, выделяют ещё четыре направления: на север и юг, а также наивысшую и наинизшую точки небесного экватора.

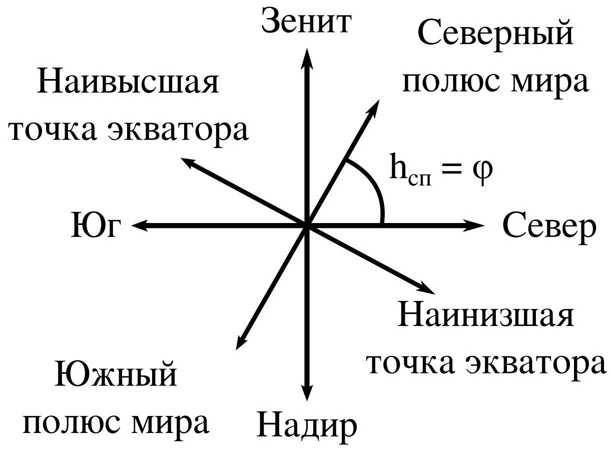

Рис. 4.2: Так выглядит плоскость небесного меридиана, если смотреть со стороны востока

Направления на север и юг перпендикулярны отвесной линии, при этом направление на север ближе (в угловой мере) к Северному полюсу мира, чем к Южному полюсу.

Направления на наивысшую и наинизшую точку небесного экватора перпендикулярны оси мира, при этом направление на наивысшую точку экватора ближе (в угловой мере) к зениту, чем к надиру.

Следует подчеркнуть, что **все углы, о которых идёт речь в этом приложении, являются центральными, т. е. лучи всех углов исходят из точки, принимаемой за начало координат, которая является той самой точкой, где находится наблюдатель**.

4.9.3 Горизонтальная система координат

Любое произвольное направление будем задавать кватернионом q (формула (4.38)), но прежде определимся с направлениями $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$, составляющими правую тройку.

Пусть $\mathbf{k} = \mathbf{k}_г$ — направление на зенит, тогда θ' — угол между направлениями на зенит и на светило, иначе говоря, это **зенитное расстояние** светила. Астрономы обозначают его буквой z. Итак, $\theta' = z$.

Отсюда $z = 0°$ — направление на зенит, а множество направлений, удовлетворяющих условию $z = 90°$ задаёт плоскость математического горизонта.

Теперь примем, что $\mathbf{i} = \mathbf{i}_г$ задаёт направление на юг, характеризуемое углами $z = 90°$ и $\varphi' = 0°$.

Тогда в силу того, что $\mathbf{i}_г$, $\mathbf{j}_г$, $\mathbf{k}_г$ составляют правую тройку, направление $\mathbf{j}_г$ оказывается направлением на восток, характеризуемое углами $z = 90°$ и $\varphi' = 90°$.

Это значит, что угол φ' возрастает от юга к востоку. Однако, в астрономии принято обратное направление возрастания величины углов, а именно, углы возрастают от юга по направлению движения небесной сферы, т. е. к западу. Поэтому следует положить $\varphi' = -A$. Угол A называется **азимутом**, который в астрономии традиционно отсчитывается от направления на юг, а не на север.

Итак, полагая в равенстве (4.38) $\mathbf{i} = \mathbf{i}_г$, $\mathbf{j} = \mathbf{j}_г$, $\mathbf{k} = \mathbf{k}_г$, $\theta' = z$ и $\varphi' = -A$, получим:

$$\mathsf{q} = \sin z \cos A\ \mathbf{i}_г - \sin z \sin A\ \mathbf{j}_г + \cos z\ \mathbf{k}_г, \tag{4.39}$$

Теперь охарактеризуем все направления, имеющие непосредственное отношение к горизонтальной системе координат.

$z = 0°$ — направление на **зенит**, $z = 180°$ — направление на **надир**. Множество направлений, удовлетворяющих условию $z = 90°$, задаёт плоскость **математического горизонта**.

Во всех остальных случаях условие $z = const$ задаёт тот или иной **альмукантара́т**.

Вместо зенитного расстояния, z, нередко применяется **высота светила**, h, которая удовлетворяет условию $h+z = 90°$. Таким образом, высота отсчитывается не от Северного полюса мира, а от математического горизонта.

В частности, для математического горизонта $h = 0°$. Если $h > 0°$, то светило находится над математическим горизонтом, если $h < 0°$, наоборот, под горизонтом.

Далее, при $h = 0°$ и $A = 0°$, $A = 90°$, $A = 180°$, $A = 270°$ получим соответственно направления на **юг, запад, север и восток**, лежащие в плоскости математического горизонта.

Плоскость **небесного меридиана** содержит все направления, удовлетворяющие условиям $A = 0°$ и $A = 180°$. Плоскость **первого вертикала** содержит все направления, удовлетворяющие условиям $A = 90°$ и $A = 270°$.

Наконец, множество направлений, удовлетворяющих условию $A = const$, называется **вертикалом** или **кругом высоты**.

4.9.4 Первая экваториальная система координат

Она вводится аналогично горизонтальной системе координат. Снова определимся с направлениями $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$, составляющими правую тройку.

Пусть $\mathbf{k} = \mathbf{k}_э$ — направление на Северный полюс мира, тогда θ' — угол между направлениями на Северный полюс мира и на светило, иначе говоря, это **полярное расстояние** светила.

Астрономы редко пользуются полярным расстоянием, вместо него они предпочитают **склонение** δ, которое аналогично высоте h в горизонтальной системе координат, и поэтому

$$\theta' + \delta = 90°.$$

Множество направлений, удовлетворяющих условию $\theta' = 90°$ или $\delta = 0°$, задаёт **плоскость небесного экватора**.

Отсюда понятно, что склонение — это угол, отсчитываемый от небесного экватора, и, следовательно, является аналогом географической широты.

Теперь примем, что $\mathbf{i} = \mathbf{i}_э$ задаёт направление на наивысшую точку экватора, характеризуемую углами $\delta = 0°$ и $\varphi' = 0°$.

Тогда в силу того, что $\mathbf{i}_э$, $\mathbf{j}_э$, $\mathbf{k}_э$ составляют правую тройку, направление $\mathbf{j}_э$ оказывается направлением на восток, характеризуемым углами $\delta = 0°$ и $\varphi' = 90°$.

Однако, в астрономии принято обратное направление возрастания величины углов в плоскости небесного экватора, а именно, углы возрастают от наивысшей точки экватора по направлению движения небесной сферы, т. е. к западу. Поэтому следует положить $\varphi' = -t$. Угол t называют **часовым углом**.

Тогда полагая в равенстве (4.38) $\mathbf{i} = \mathbf{i}_э$, $\mathbf{j} = \mathbf{j}_э$, $\mathbf{k} = \mathbf{k}_э$, $\theta' = 90° - \delta$ и $\varphi' = -t$, получим кватернион, задающий направление на светило относительно первой экваториальной системы координат:

$$\mathsf{q} = \cos\delta\cos t\ \mathbf{i}_э - \cos\delta\sin t\ \mathbf{j}_э + \sin\delta\ \mathbf{k}_э, \tag{4.40}$$

Следует подчеркнуть, что часовой угол традиционно измеряется не в градусной, а в часовой мере: $360° = 24^h$, а далее зависимость прямо пропорциональная: $90° = 6^h$, $15° = 1^h$, $15' = 1^m$, $15'' = 1^s$ и т. п.

Теперь охарактеризуем все направления, имеющие непосредственное отношение к первой экваториальной системе координат.

Равенство $\delta = +90°$ задаёт направление на **Северный полюс мира**, а $\delta = -90°$ — направление на **Южный полюс мира**, $\delta = 0°$ означает **небесный экватор**.

Во всех остальных случаях условие $\delta = const$ задаёт **небесные параллели**.

Условие $\delta > 0°$ означает, что светило находится в **Северном полушарии неба**, а условие $\delta < 0°$, наоборот, — в **Южном полушарии неба**.

Далее, при $\delta = 0°$ и $t = 0^h$, $t = 6^h$, $t = 12^h$, $t = 18^h$ получим направления соответственно на **наивысшую точку экватора, на запад, на наинизшую точку экватора и на восток**, причём все точки лежат в плоскости небесного экватора.

Плоскость **небесного меридиана** содержит все направления, удовлетворяющие условиям $t = 0^{\mathsf{h}}$ и $t = 12^{\mathsf{h}}$. Наконец, множество направлений, удовлетворяющих условию $t = const$, называется **кругом склонений**.

4.9.5 Высота Северного полюса мира над горизонтом численно равна географической широте

Ось Земли и ось мира параллельны (или совпадают, если наблюдатель находится на полюсе Земли). Почему?

Из классической механики известно, что:

1. вращение характеризуются вектором угловой скорости. Длина этого вектора задаёт угловую скорость вращения, а его направление — ось вращения;

2. все точки абсолютно твёрдого тела вращаются с одинаковой угловой скоростью, а точнее, вектор угловой скорости одинаков для любой точки абсолютно твёрдого тела. Поэтому оси, вокруг которых вращаются все точки тела, параллельны (или, в частных случаях, совпадают).

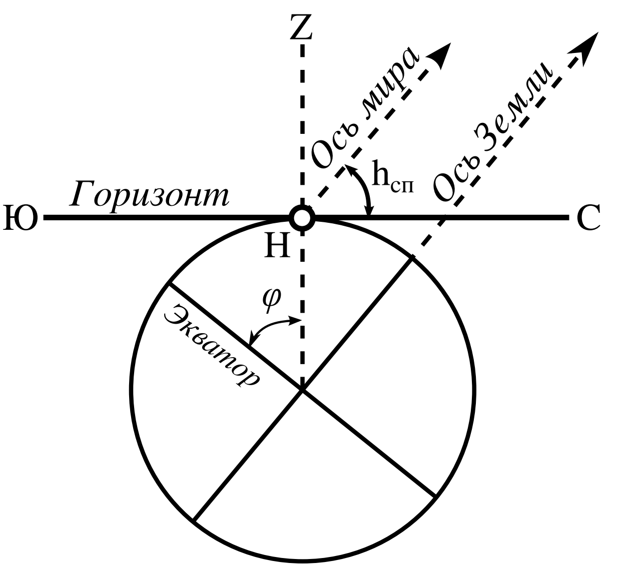

Рис. 4.3: Связь высоты полюса мира и географической широты

Вращающуюся вокруг своей оси Землю можно считать абсолютно твёрдым телом, поскольку она практически не деформируется в процессе осевого вращения. Поэтому все точки поверхности Земли вращаются вокруг параллельных или, в частном случае, вокруг совпадающих осей.

Итак, ось Земли и ось мира параллельны.

На рисунке 4.3 изображены высота Северного полюса мира над горизонтом, $h_{\text{сп}}$, и географическая широта, φ, согласно их определениям, откуда следует, что **высота полюса мира над горизонтом численно равна географической широте наблюдателя**.

В самом деле, $h_{\text{сп}} = \varphi$, как углы с взаимно перпендикулярными сторонами: отвесная линия перпендикулярна математическому горизонту, а ось мира перпендикулярна земному экватору.

4.9.6 Связь между горизонтальной и первой экваториальной системой координат

Направления, определяемые кватернионами $\mathbf{j}_{\text{г}}$ и $\mathbf{j}_{\text{э}}$, совпадают, они исходят из начала координат, где находится наблюдатель, к востоку.

Посмотрите на рисунок 4.2, где плоскость небесного меридиана показана как раз со стороны востока. Если выполнить поворот вокруг направления $\mathbf{j}_{\text{г}} = \mathbf{j}_{\text{э}}$ в положительном направлении на угол $90^\circ - h_{\text{сп}} = 90^\circ - \varphi$, то направление на Северный полюс мира ($\mathbf{k}_{\text{э}}$) совпадёт с направлением на зенит ($\mathbf{k}_{\text{г}}$).

На языке кватернионов это можно записать так:

$$\mathbf{k}_{\text{г}} = (\cos\alpha + \mathbf{j}_{\text{э}}\sin\alpha)\mathbf{k}_{\text{э}}(\cos\alpha - \mathbf{j}_{\text{э}}\sin\alpha), \tag{4.41}$$

$$\mathbf{j}_{\text{г}} = \mathbf{j}_{\text{э}}.$$

здесь буквой α обозначена половина угла поворота, $\alpha = (90^\circ - \varphi)/2$, чтобы короче записывать формулы.

Очевидно, что направление $\mathbf{i}_{\text{г}}$ должно преобразовываться аналогично направлению $\mathbf{k}_{\text{г}}$:

$$\mathbf{i}_{\text{г}} = (\cos\alpha + \mathbf{j}_{\text{э}}\sin\alpha)\mathbf{i}_{\text{э}}(\cos\alpha - \mathbf{j}_{\text{э}}\sin\alpha),$$

Выполним необходимые вычисления:

$$\begin{aligned}
&\mathbf{i}_{\text{г}} = \cos^2\alpha\ \mathbf{i}_{\text{э}} + \sin\alpha\cos\alpha\ \mathbf{j}_{\text{э}}\mathbf{i}_{\text{э}} - \cos\alpha\sin\alpha\ \mathbf{i}_{\text{э}}\mathbf{j}_{\text{э}} - \sin^2\alpha\ \mathbf{j}_{\text{э}}\mathbf{i}_{\text{э}}\mathbf{j}_{\text{э}} = \\
&(\cos^2\alpha - \sin^2\alpha)\ \mathbf{i}_{\text{э}} - 2\cos\alpha\sin\alpha\ \mathbf{k}_{\text{э}} = \cos 2\alpha\ \mathbf{i}_{\text{э}} - \sin 2\alpha\ \mathbf{k}_{\text{э}}, \\
&\text{т. к.}\ \ \mathbf{i}_{\text{э}}\mathbf{j}_{\text{э}} = -\mathbf{j}_{\text{э}}\mathbf{i}_{\text{э}} = \mathbf{k}_{\text{э}}, \quad \mathbf{j}_{\text{э}}\mathbf{i}_{\text{э}}\mathbf{j}_{\text{э}} = -\mathbf{j}_{\text{э}}^2\ \mathbf{i}_{\text{э}} = \mathbf{i}_{\text{э}}.
\end{aligned}$$

И подставляя сюда $\alpha = (90^\circ - \varphi)/2$, получаем:

$$\mathbf{i}_{\text{г}} = \sin\varphi\ \mathbf{i}_{\text{э}} - \cos\varphi\ \mathbf{k}_{\text{э}}.$$

Аналогично

$$\mathbf{k}_{\text{г}} = \cos\varphi\ \mathbf{i}_{\text{э}} + \sin\varphi\ \mathbf{k}_{\text{э}}.$$

Выполним подстановки в равенство (4.39) и сгруппируем подобные слагаемые:

$$\begin{aligned}
&\mathsf{q} = \sin z\cos A\ \mathbf{i}_{\text{г}} - \sin z\sin A\ \mathbf{j}_{\text{г}} + \cos z\ \mathbf{k}_{\text{г}} = \\
&\sin z\cos A(\sin\varphi\ \mathbf{i}_{\text{э}} - \cos\varphi\ \mathbf{k}_{\text{э}}) - \sin z\sin A\ \mathbf{j}_{\text{э}} + \cos z(\cos\varphi\ \mathbf{i}_{\text{э}} + \sin\varphi\ \mathbf{k}_{\text{э}}) = \\
&(\cos z\cos\varphi + \sin z\sin\varphi\cos A)\mathbf{i}_{\text{э}} - \sin z\sin A\ \mathbf{j}_{\text{э}} + \\
&(\cos z\sin\varphi - \sin z\cos\varphi\cos A)\mathbf{k}_{\text{э}}.
\end{aligned}$$

Сравнивая полученное выражение с формулой (4.40), получаем формулы перехода от горизонтальной системы небесных координат к первой экваториальной системе:

$$\begin{aligned}
&\cos\delta\cos t = \cos z\cos\varphi + \sin z\sin\varphi\cos A,\\
&\cos\delta\sin t = \sin z\sin A,\\
&\sin\delta = \cos z\sin\varphi - \sin z\cos\varphi\cos A.
\end{aligned}$$

Теперь обратим эти равенства, но сначала обратим равенство (4.41):
$\mathbf{k}_{\text{г}} = (\cos\alpha + \mathbf{j}_{\text{э}}\sin\alpha)\mathbf{k}_{\text{э}}(\cos\alpha - \mathbf{j}_{\text{э}}\sin\alpha) = \mathbf{Q}\mathbf{k}_{\text{э}}\mathbf{Q}^*$, здесь для сокращения записи принято:

$$\mathbf{Q} = \cos\alpha + \mathbf{j}_{\text{э}}\sin\alpha = \cos\alpha + \mathbf{j}_{\text{г}}\sin\alpha, \quad \text{т. к. } \mathbf{j}_{\text{э}} = \mathbf{j}_{\text{г}}.$$

Умножим обе части равенства $\mathbf{k}_{\text{г}} = \mathbf{Q}\mathbf{k}_{\text{э}}\mathbf{Q}^*$ на сопряжённые кватернионы: $\mathbf{Q}^*\mathbf{k}_{\text{г}}\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^*\mathbf{Q}\mathbf{k}_{\text{э}}\mathbf{Q}^*\mathbf{Q} = \mathbf{k}_{\text{э}}$.

Отсюда

$$\begin{aligned}
&\mathbf{k}_{\text{э}} = (\cos\alpha - \mathbf{j}_{\text{г}}\sin\alpha)\mathbf{k}_{\text{г}}(\cos\alpha + \mathbf{j}_{\text{г}}\sin\alpha),\\
&\mathbf{j}_{\text{э}} = \mathbf{j}_{\text{г}},\\
&\mathbf{i}_{\text{э}} = (\cos\alpha - \mathbf{j}_{\text{г}}\sin\alpha)\mathbf{i}_{\text{г}}(\cos\alpha + \mathbf{j}_{\text{г}}\sin\alpha).
\end{aligned}$$

И далее, выполняя вычисления, аналогичные приведённым выше, получим формулы перехода от первой экваториальной системы небесных координат к горизонтальной системе:

$$\begin{aligned}
&\sin z\cos A = -\sin\delta\cos\varphi + \cos\delta\sin\varphi\cos t,\\
&\sin z\sin A = \cos\delta\sin t,\\
&\cos z = \sin\varphi\sin\delta + \cos\varphi\cos\delta\cos t.
\end{aligned}$$

Из рассмотренных примеров понятно, что можно не вводить понятие небесной сферы, а все задачи сферической астрономии решать с привлечением кватернионов.

Часть II

Квантово-механический формализм Дирака

Глава 5

Квантово-механические векторы и операторы

5.1 Независимость описания реальности от выбора систем координат

Математический аппарат квантовой механики, как оказалось, имеет своим истоком обычную классическую реальность. Поэтому проиллюстрируем в этой главе его существенные черты, не обращаясь к квантовым представлениям.

Физическая реальность, а именно, перемещение тел, действующие силы, напряжённости электрических и магнитных полей и т. п., существуют объективно, независимо от нас.

Мы можем произвольно выбирать системы координат и, в зависимости от нашего выбора, получим разные формулы. Но за всеми различиями в формулах скрывается объективно существующая физическая реальность. Следовательно, возможно описание реальности свободное от произвола, обусловленного выбором систем координат, короче говоря, возможно так называемое **инвариантное** описание реальности.

Именно на этом основана общеизвестная векторная алгебра, в которой векторы являются объектами трёхмерного евклидового, а попросту говоря, физического пространства.

Например, сила $\mathbf{F} = 5$ Н, действующая на плоскости, в какой-то одной системе координат может быть представлена вектором с компонентами $F_x = 5$, $F_y = 0$, а в другой $F_x = 3$, $F_y = 4$ и т. п., но выражение для работы силы $\mathcal{A} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{s}$ является инвариантным, т. е. не зависящим от конкретного выбора координат.

Аналогично, возможно инвариантное описание квантово-механической реальности, т. е. возможно описание, не зависящее от конкретного выбора координат или, как говорят физики, от выбора представления.

Выдающий английский физик-теоретик Поль Адриан Морис Дира́к разработал модификацию векторного исчисления специально для квантовой механики. Именно о таком векторном исчислении идёт речь далее.

5.2 Инвариантное описание векторов состояния

5.2.1 Кет- и бра- векторы

Единичному вектору, определяющему какое-либо направление, соответствует вектор состояния (4.20):

$$\mathsf{d} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix},$$

здесь θ и φ — сферические координаты, характеризующие направление.

Умножим матрицу-столбец d на матрицу (4.16), т. е. на $\mathsf{U}_0(\alpha/2) = \mathsf{E} \cdot e^{-i\alpha/2}$, или, что то же самое, на комплексное число $e^{-i\alpha/2}$. Получившаяся при этом матрица будет определять те же самые координаты x, y, z, и, следовательно, то же самое направление, какое было первоначально, т. к. матрица U_0 изображает тождественное преобразование физического пространства.

Итак, матрица d после преобразования будет иметь совершенно другой вид, несмотря на то, что она изображает то же самое направление.

И ещё. Выполним преобразование $\mathsf{d}' = \mathsf{U}\mathsf{d}$, здесь U — одна из матриц U_x, U_y, U_z (соотношения (4.13), (4.14) и (4.15)), или их любое произведение. Как известно, такие матрицы изображают повороты в физическом пространстве. Тогда матрицы-столбцы d, и $\mathsf{d}' = \mathsf{U}\mathsf{d}$ — совершенно разные матрицы, но, если принять пассивную интерпретацию (п. п. 3.7.2) преобразования $\mathsf{d}' = \mathsf{U}\mathsf{d}$, они изображают одно и то же направление.

Поэтому возникает естественное желание записывать всевозможные матрицы, изображающие одно и то же направление, единообразно, т. е. инвариантно, например, так: $|\mathsf{d}\rangle$.

$|\mathsf{d}\rangle$ называют кет-вектором.

Поскольку матрицам d соответствуют вполне определённые эрмитово сопряжённые матрицы $\mathsf{d}^\dagger$, то введём обозначение

$$\langle\mathsf{d}| = |\mathsf{d}\rangle^\dagger.$$

Вектор $\langle\mathsf{d}|$ называют бра-вектором.

В результате двойного эрмитового сопряжения любая матрица возвращается к исходному виду. И поскольку инвариантными обозначениями зашифрованы обычные матрицы, то

$$\langle\mathsf{d}|^\dagger = \left(|\mathsf{d}\rangle^\dagger\right)^\dagger = |\mathsf{d}\rangle.$$

Далее, выражение $\mathsf{d}^\dagger\mathsf{d}$ можно представить в инвариантной форме: $\langle\mathsf{d}|\mathsf{d}\rangle$. Это выражение является, по сути, скобкой. По-английски скобка — bracket. Отсюда понятно, почему векторы $\langle\mathsf{d}|$ и $|\mathsf{d}\rangle$ называются бра-векторами и кет-векторами соответственно.

5.2.2 Пространство состояний и ортонормированный базис в нём

Матрицу d (соотношение (4.20)) можно представить в следующем виде:

$$\mathsf{d} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \cos\frac{\theta}{2}\mathsf{e}_1 + \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi}\mathsf{e}_2, \qquad \text{здесь матрицы}$$

$$\mathsf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathsf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

обладают следующими свойствами: $\mathsf{e}_1^\mathsf{T} \cdot \mathsf{e}_1 = \mathsf{e}_2^\mathsf{T} \cdot \mathsf{e}_2 = 1$ и $\mathsf{e}_1^\mathsf{T} \cdot \mathsf{e}_2 = \mathsf{e}_2^\mathsf{T} \cdot \mathsf{e}_1 = 0$.

То же самое можно записать короче:

$$\mathsf{e}_i{}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{e}_j = \mathsf{e}_j{}^\mathsf{T} \cdot \mathsf{e}_i = \delta_{ij}, \qquad i, j = 1, 2. \tag{5.1}$$

здесь δ_{ij} — символ Кронекера. Он равен единице, если $i = j$, и нулю, если $i \neq j$.

Сейчас, пока мы рассматриваем самые простые ситуации, введение общепринятых компактных обозначений, вроде символа Кронекера, знака суммирования и т. п., кажется неуместным. Но уже теперь пора к ним привыкать, потому что общепринятые обозначения экономны, они позволяют обобщать многие результаты на более сложные случаи с минимальными усилиями, можно сказать, автоматически.

Инвариантная форма записи уравнений (5.1) такова:

$$\langle \mathsf{e}_i | \mathsf{e}_j \rangle = \langle \mathsf{e}_j | \mathsf{e}_i \rangle = \delta_{ij}, \qquad i, j = 1, 2. \tag{5.2}$$

Тогда инвариантная форма записи матрицы-столбца d принимает следующий вид:

$$|\mathsf{d}\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\mathsf{e}_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|\mathsf{e}_2\rangle. \tag{5.3}$$

Определение:

Пусть имеется множество всех векторов вида

$$|\mathsf{v}\rangle = v_1|\mathsf{e}_1\rangle + v_2|\mathsf{e}_2\rangle = \sum_{i=1}^{2} v_i|\mathsf{e}_i\rangle. \tag{5.4}$$

где v_1 и v_2 — произвольные комплексные числа.

Такое множество называется **двумерным комплексным евклидовым пространством**. Оно подобно двумерному действительному евклидовому пространству, т. е. подобно множеству векторов обычной плоскости, с единственным отличием: компоненты векторов являются комплексными числами.

Двумерное комплексное евклидово пространство также называют гильбертовым пространством, потому что если размерность пространства конечная, то комплексное евклидово пространство и (комплексное) гильбертово пространство совпадают. В дальнейшем будем применять термин «**пространство состояний**», как это принято в физике.

Векторы $|\mathsf{e}_1\rangle$ и $|\mathsf{e}_2\rangle$ составляют **ортонормированный базис** в пространстве состояний.

«Орто-» означает ортогональный, то есть скалярные произведения разных базисных векторов равны нулю, $\langle \mathsf{e}_1 | \mathsf{e}_2 \rangle = \langle \mathsf{e}_2 | \mathsf{e}_1 \rangle = 0$, «нормированный» означает, что базисные векторы нормированы на единицу: $\sqrt{\langle \mathsf{e}_1 | \mathsf{e}_1 \rangle} = \sqrt{\langle \mathsf{e}_2 | \mathsf{e}_2 \rangle} = 1$. О норме говорится ниже, см. п. п. 5.2.4.

5.2.3 Формула для скалярного произведения двух векторов

Принимая во внимание формулы (5.2), можно двум любым векторам из пространства состояний поставить в соответствие скалярное произведение типа бра-кет.

Получим явную формулу для такого произведения.

Итак, даны два вектора $|\mathsf{v}\rangle = v_1|\mathsf{e}_1\rangle + v_2|\mathsf{e}_2\rangle$ и $|\mathsf{w}\rangle = w_1|\mathsf{e}_1\rangle + w_2|\mathsf{e}_2\rangle$. Тогда $\langle \mathsf{w}| = (w_1|\mathsf{e}_1\rangle + w_2|\mathsf{e}_2\rangle)^\dagger = w_1^*\langle \mathsf{e}_1| + w_2^*\langle \mathsf{e}_2|$ и

$$\begin{aligned}
&\langle \mathsf{w}|\mathsf{v}\rangle = (w_1^*\langle \mathsf{e}_1| + w_2^*\langle \mathsf{e}_2|)(v_1|\mathsf{e}_1\rangle + v_2|\mathsf{e}_2\rangle) = \\
&w_1^*v_1\langle \mathsf{e}_1|\mathsf{e}_1\rangle + w_1^*v_2\langle \mathsf{e}_1|\mathsf{e}_2\rangle + w_2^*v_1\langle \mathsf{e}_2|\mathsf{e}_1\rangle + w_2^*v_2\langle \mathsf{e}_2|\mathsf{e}_2\rangle = \\
&w_1^*v_1 \cdot 1 + w_1^*v_2 \cdot 0 + w_2^*v_1 \cdot 0 + w_2^*v_2 \cdot 1 = w_1^*v_1 + w_2^*v_2.
\end{aligned}$$

Итак,

$$\langle \mathsf{w}|\mathsf{v}\rangle = w_1^*v_1 + w_2^*v_2 = \sum_{i=1}^{2} w_i^*v_i. \tag{5.5}$$

Теперь подставим сюда вместо $\langle \mathsf{w}|$ базисный вектор $\langle \mathsf{e}_1|$, что эквивалентно равенствам $w_1 = w_1^* = 1$ и $w_2 = w_2^* = 0$. И получим: $\langle \mathsf{e}_1|\mathsf{v}\rangle = v_1$.

Аналогично $\langle \mathsf{e}_2|\mathsf{v}\rangle = v_2$.

Т. е. коэффициенты разложения любого вектора по базисным векторам пространства состояний равны:

$$v_i = \langle \mathsf{e}_i|\mathsf{v}\rangle \qquad i,j = 1,2. \tag{5.6}$$

Тогда разложение любого вектора по базисным векторам принимает следующий вид:

$$|\mathsf{v}\rangle = v_1|\mathsf{e}_1\rangle + v_2|\mathsf{e}_2\rangle = \sum_{i=1}^{2} v_i|\mathsf{e}_i\rangle = \sum_{i=1}^{2} |\mathsf{e}_i\rangle\langle \mathsf{e}_i|\mathsf{v}\rangle. \tag{5.7}$$

Пусть теперь $\mathsf{w} = \mathsf{v}$, тогда равенство (5.5) принимает вид:

$$\langle \mathsf{v}|\mathsf{v}\rangle = \sum_{i=1}^{2} v_i^* v_i = \sum_{i=1}^{2} |v_i|^2 \geq 0. \tag{5.8}$$

5.2.4 Норма вектора в инвариантной записи

А теперь вспомним, что нормой вектора состояния называется квадратный корень из произведения эрмитово сопряжённого вектора на исходный вектор состояния. В инвариантной записи выражение для нормы произвольного вектора $|\mathsf{v}\rangle$ выглядит так: $\|\mathsf{v}\| = \sqrt{\langle \mathsf{v}|\mathsf{v}\rangle}$.

Извлечение корня всегда возможно, потому что согласно предыдущей формуле выражение $\langle \mathsf{v}|\mathsf{v}\rangle \geq 0$, т. е. неотрицательно.

Любой ненулевой вектор $|\mathsf{v}\rangle$ можно нормировать на единицу, разделив его на норму. Получившийся вектор, $\frac{|\mathsf{v}\rangle}{\sqrt{\langle \mathsf{v}|\mathsf{v}\rangle}}$, имеет норму, равную единице.

Вектор пространства состояний $|\mathsf{d}\rangle$ (формула 5.3), изображающий какое-то направление физического пространства, всегда нормирован на единицу: $\|\mathsf{d}\| = \sqrt{\langle \mathsf{d}|\mathsf{d}\rangle} = 1$, т. к.

$$\langle \mathsf{d}|\mathsf{d}\rangle = \sum_{i=1}^{2} |d_i|^2 = \left|\cos\frac{\theta}{2}\right|^2 + \left|\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\right|^2 = 1.$$

5.2.5 Пространство представлений

В квантовой механике принято, что кет-вектор, например, $|\mathsf{v}\rangle$, указывает на состояние системы и именно поэтому называется **вектором состояния**.

Коэффициенты v_1, v_2 зависят от того, какой конкретно ортонормированный базис выбран. Т. е. они, в силу равенств $v_i = \langle \mathsf{e}_i|\mathsf{v}\rangle$, представляют вектор состояния в конкретном ортонормированном базисе. Поэтому бра-векторы называются **векторами представления. Множество всех бра-векторов**

$$\langle \mathsf{v}| = v_1^*\langle \mathsf{e}_1| + v_2^*\langle \mathsf{e}_2| = \sum_{i=1}^{2} v_i^*\langle \mathsf{e}_i|.$$

образуют пространство представлений.

Происходит как бы удвоение пространства, в котором изображаются векторы, характеризующие направления физического пространства, причём **векторы пространства состояний переводятся в пространство представлений и обратно эрмитовыми сопряжениями**.

5.3 Линейные операторы

5.3.1 Квадратные матрицы и линейные операторы

Квадратная матрица Q задаёт правило, а точнее, линейное преобразование, в соответствии с которым матрице-столбцу v ставится в соответствие матрица-столбец Qv. В рассматриваемых нами случаях Q — квадратная матрица второго порядка, поэтому матрицы-столбцы v и Qv содержат по две строки.

В инвариантной записи матрицу Q изображают оператором $\hat{\mathsf{Q}}$, который, действуя на кет-вектор $|\mathsf{v}\rangle$ пространства состояний, переводит его в кет-вектор $\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{v}\rangle$ того же пространства.

Т. е. оператор, как и матрица, – это правило, преобразующее некоторый вектор пространства состояний в другой вектор. Отсюда понятно, что оператор в некотором смысле аналогичен функции. В самом деле, функция – это правило, в соответствии с которым одному числу ставится в соответствие другое. Аналогично, оператор – это как бы функция, но не для чисел, а для векторов.

Естественно, что операторы могут действовать также и в пространстве представлений, при этом бра-векторы переводятся эрмитово сопряжёнными операторами в другие бра-векторы. А именно, эрмитово сопрягая выражение $\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{v}\rangle$, получаем эквивалентное ему выражение: $\langle\mathsf{v}|\hat{\mathsf{Q}}^\dagger$.

5.3.2 Линейная комбинация

Определение.

Линейной комбинацией называется выражение, составленное из однотипных объектов, таких как векторы, матрицы и т. п., при этом допустимы только две операции: умножение на число и суммирование.

Например, матрица-столбец $\mathsf{v} = (\alpha_1\mathsf{v}_1 + \alpha_2\mathsf{v}_2 + \cdots + \alpha_n\mathsf{v}_n)$ является линейной комбинацией n матриц $\mathsf{v}_1, \mathsf{v}_2 \ldots \mathsf{v}_n$, здесь $\alpha_1, \alpha_2 \ldots \alpha_n$ — некоторые комплексные числа.

5.3.3 Определение линейного оператора

Для матриц справедливо равенство: $\mathsf{Q}(\alpha_1\mathsf{v}_1 + \alpha_2\mathsf{v}_2) = (\alpha_1\mathsf{Qv}_1 + \alpha_2\mathsf{Qv}_2)$.

Записывая его в инвариантной форме, получим условие, которому должны удовлетворять все линейные операторы:

$$\hat{\mathsf{Q}}(\alpha_1|\mathsf{v}_1\rangle + \alpha_2|\mathsf{v}_2\rangle) = \alpha_1\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{v}_1\rangle + \alpha_2\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{v}_2\rangle.$$

Это соотношение может служить в качестве определения линейных операторов.

Итак, **линейным оператором можно сразу действовать на линейную комбинацию векторов, а можно действовать сначала на отдельные векторы, составляющие линейную комбинацию, и лишь потом сконструировать линейную комбинацию.** Результат будет одинаковым.

Следует отметить, что **операторы, которые в инвариантной записи изображают матрицы, всегда линейные.**

5.3.4 Матричные элементы оператора в заданном базисе

Матричные элементы оператора $\hat{\mathsf{Q}}$ в ортонормированном базисе $|\mathsf{e}_1\rangle$, $|\mathsf{e}_2\rangle$ можно вычислить согласно формуле:

$$\mathsf{Q}_{ij} = \langle \mathsf{e}_i|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{e}_j\rangle, \qquad i,j = 1,2. \tag{5.9}$$

Это значит, что сначала нужно подействовать оператором $\hat{\mathsf{Q}}$ на $|\mathsf{e}_j\rangle$, а затем результат умножить на $\langle \mathsf{e}_i|$. Впрочем, произведение матриц ассоциативно, следовательно, ассоциативна и соответствующая произведению инвариантная форма записи. Поэтому можно сначала подействовать на $\langle \mathsf{e}_i|$ оператором $\hat{\mathsf{Q}}$, а потом результат умножить на $|\mathsf{e}_j\rangle$.

Четыре числа $Q_{ij},\ i,j = 1,2$ составляют квадратную матрицу второго порядка:

$$\mathsf{Q} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix}. \tag{5.10}$$

Отсюда понятно, почему числа Q_{ij} называются матричными элементами не только матрицы Q, но и оператора $\hat{\mathsf{Q}}$ в ортонормированном базисе $|\mathsf{e}_1\rangle$, $|\mathsf{e}_2\rangle$.

5.3.5 Восстановление оператора по его матричным элементам

Пусть оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ задан выражением:

$$\hat{\mathsf{Q}} = \sum_{i,j=1}^{2} Q_{ij}|\mathsf{e}_i\rangle\langle \mathsf{e}_j| \tag{5.11}$$

Вычислим по формуле (5.9) матричный элемент оператора $\hat{\mathsf{Q}}$, расположенный, например, в первой строке и втором столбце:

$$\langle \mathsf{e}_1|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{e}_2\rangle = \sum_{i,j=1}^{2} Q_{ij}\langle \mathsf{e}_1|\mathsf{e}_i\rangle\langle \mathsf{e}_j|\mathsf{e}_2\rangle = \sum_{i,j=1}^{2} Q_{ij}\delta_{1i}\delta_{j2} = Q_{12},$$

т. к. в этой формуле произведение $\delta_{1i}\delta_{j2}$ не равно нулю лишь при $i = 1$ и $j = 2$.

Аналогично можно вычислить все другие матричные элементы и убедиться, что оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ в ортонормированном базисе $|\mathsf{e}_1\rangle$, $|\mathsf{e}_2\rangle$ изображается матрицей (5.10).

Это значит, что, применив формулу (5.11), можно восстановить линейный оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ по его матричным элементам $Q_{ij},\ i,j = 1,2$.

5.3.6 Проекторы

Проекторами называются операторы вида $|\mathsf{e}\rangle\langle \mathsf{e}|$, здесь $|\mathsf{e}\rangle$ — базисный вектор ортонормированного базиса.

В ортонормированном базисе $|\mathsf{e}_1\rangle$, $|\mathsf{e}_2\rangle$ есть только два проектора: $\hat{\mathsf{P}}_1 = |\mathsf{e}_1\rangle\langle \mathsf{e}_1|$ и $\hat{\mathsf{P}}_2 = |\mathsf{e}_2\rangle\langle \mathsf{e}_2|$, а соответствующие им т. н. проективные матрицы имеют следующий вид:

$$\mathsf{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathsf{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{5.12}$$

Подействуем проектором $\hat{\mathsf{P}}_1$ на произвольный вектор $|\mathsf{v}\rangle = v_1|\mathsf{e}_1\rangle + v_2|\mathsf{e}_2\rangle$:

$$\hat{\mathsf{P}_1}|\mathsf{v}\rangle = |\mathsf{e}_1\rangle\langle \mathsf{e}_1|(v_1|\mathsf{e}_1\rangle + v_2|\mathsf{e}_2\rangle) = v_1|\mathsf{e}_1\rangle\langle \mathsf{e}_1|\mathsf{e}_1\rangle + v_2|\mathsf{e}_1\rangle\langle \mathsf{e}_1|\mathsf{e}_2\rangle =$$
$$v_1|\mathsf{e}_1\rangle \cdot 1 + v_2|\mathsf{e}_1\rangle \cdot 0 = v_1|\mathsf{e}_1\rangle.$$

Проектор $\hat{\mathsf{P}}_1$ выделяет из произвольного вектора $|\mathsf{v}\rangle$ ту его часть $v_1|\mathsf{e}_1\rangle$, которая направлена вдоль вектора $|\mathsf{e}_1\rangle$, т. е. проецирует вектор $|\mathsf{v}\rangle$ на вектор $|\mathsf{e}_1\rangle$. Аналогичное утверждение справедливо для $\hat{\mathsf{P}}_2$ и вообще для любого проектора. Отсюда понятно происхождение терминов «проектор», «проективная матрица».

Следует отметить, что проекторы являются, по сути, операторами плотности, см. п. 7.6.

5.3.7 Как быть в случае сомнений?

Если у вас возникают сомнения в том, правильно ли выполняются инвариантные вычисления, вспомните, что **инвариантные обозначения возникли из матричного исчисления, поэтому для них справедливы все правила действий с матрицами.**

5.4 Условие полноты ортонормированного базиса

Из уравнения (5.7) следует:

$$|\mathsf{v}\rangle = |\mathsf{e}_1\rangle\langle\mathsf{e}_1|\mathsf{v}\rangle + |\mathsf{e}_2\rangle\langle\mathsf{e}_2|\mathsf{v}\rangle = (|\mathsf{e}_1\rangle\langle\mathsf{e}_1| + |\mathsf{e}_2\rangle\langle\mathsf{e}_2|)|\mathsf{v}\rangle = \hat{\mathsf{E}}|\mathsf{v}\rangle,$$

здесь $\hat{\mathsf{E}}$ — тождественный оператор, действие которого ничего не меняет, выражение в скобках — сумма проекторов $\hat{\mathsf{P}}_1 + \hat{\mathsf{P}}_2 = \hat{\mathsf{E}}$; соответствующая им матрица, как следует из выражений (5.12), равна единичной матрице: $\mathsf{P}_1 + \mathsf{P}_2 = \mathsf{E}$.

Отсюда следует т. н. **условие полноты**:

$$\hat{\mathsf{E}} = | = |\mathsf{e}_1\rangle\langle\mathsf{e}_1| + |\mathsf{e}_2\rangle\langle\mathsf{e}_2| = \sum_{i=1}^{2} |\mathsf{e}_i\rangle\langle\mathsf{e}_i|. \tag{5.13}$$

здесь | — та самая перегородка, которая встречается во всех инвариантных выражениях.

Условие полноты означает, что любой вектор пространства состояний $|\mathsf{v}\rangle$ можно разложить по ортонормированному базису, для чего достаточно заменить вертикальную черту соответствующим выражением.

И вообще, условие полноты позволяет переходить от инвариантной формы записи к матричной и обратно на основе чисто формальной процедуры.

Например, запишем выражение $\langle\mathsf{v}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{v}\rangle$ в матричной форме:

$$\begin{aligned}&\langle\mathsf{v}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{v}\rangle = \langle\mathsf{v}|\hat{\mathsf{E}}\hat{\mathsf{Q}}\hat{\mathsf{E}}|\mathsf{v}\rangle = \langle\mathsf{v}|(|\mathsf{e}_1\rangle\langle\mathsf{e}_1| + |\mathsf{e}_2\rangle\langle\mathsf{e}_2|)\hat{\mathsf{Q}}(|\mathsf{e}_1\rangle\langle\mathsf{e}_1| + |\mathsf{e}_2\rangle\langle\mathsf{e}_2|)|\mathsf{v}\rangle = \\ &\langle\mathsf{v}|\mathsf{e}_1\rangle\langle\mathsf{e}_1|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{e}_1\rangle\langle\mathsf{e}_1|\mathsf{v}\rangle + \langle\mathsf{v}|\mathsf{e}_1\rangle\langle\mathsf{e}_1|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{e}_2\rangle\langle\mathsf{e}_2|\mathsf{v}\rangle + \langle\mathsf{v}|\mathsf{e}_2\rangle\langle\mathsf{e}_2|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{e}_1\rangle\langle\mathsf{e}_1|\mathsf{v}\rangle + \\ &\langle\mathsf{v}|\mathsf{e}_2\rangle\langle\mathsf{e}_2|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{e}_2\rangle\langle\mathsf{e}_2|\mathsf{v}\rangle,\end{aligned}$$

и, принимая во внимание равенства (5.6) и (5.9), продолжаем:

$$\langle\mathsf{v}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{v}\rangle = \sum_{i,j=1}^{2} \langle\mathsf{v}|\mathsf{e}_i\rangle\langle\mathsf{e}_i|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{e}_j\rangle\langle\mathsf{e}_j|\mathsf{v}\rangle = \sum_{i,j=1}^{2} v_i^* Q_{ij} v_j,$$

здесь v_i^* и v_j — коэффициенты разложения соответствующих векторов по базисным векторам, Q_{ij} — матричные элементы оператора $\hat{\mathsf{Q}}$.

Отсюда искомое матричное выражение имеет вид: $\mathsf{v}^\dagger\mathsf{Q}\mathsf{v}$.

Этот результат, прямо скажем, не впечатляет: можно было сразу записать матричное выражение. Но иногда рассмотренный приём бывает полезным.

5.5 Инвариантное выражение для угла между двумя направлениями

Выражение (4.36)) для угла β между двумя направлениями можно записать в инвариантной форме:

$$\cos^2\beta/2 = |\langle \mathsf{d}_2|\mathsf{d}_1\rangle|^2 = |\langle \mathsf{d}_1|\mathsf{d}_2\rangle|^2 = \langle \mathsf{d}_2|\hat{\mathsf{M}}_1|\mathsf{d}_2\rangle = \langle \mathsf{d}_1|\hat{\mathsf{M}}_2|\mathsf{d}_1\rangle. \tag{5.14}$$

здесь $\hat{\mathsf{M}}_1 = |\mathsf{d}_1\rangle\langle \mathsf{d}_1|$ и $\hat{\mathsf{M}}_2 = |\mathsf{d}_2\rangle\langle \mathsf{d}_2|$.

Пусть теперь направления $|\mathsf{d}_1\rangle$ и $|\mathsf{d}_2\rangle$ совпадают, т. е. $|\mathsf{d}_1\rangle = |\mathsf{d}_2\rangle = |\mathsf{d}\rangle$, тогда $\beta = 0$, $\cos^2\beta/2 = 1$. Отсюда $|\langle \mathsf{d}|\mathsf{d}\rangle| = 1$ и $\|\mathsf{d}\| = 1$.

Получился уже известный результат: **направления физического пространства изображают лишь векторы состояния, нормированные на единицу.**

Векторы $|\mathsf{e}_1\rangle$ и $|\mathsf{e}_2\rangle$ некоторого ортонормированного базиса, как и любые нормированные на единицу векторы пространства состояний, задают некоторые направления в физическом пространстве. Угол между этими двумя направлениями вычисляется по формуле:

$$\cos^2\beta/2 = |\langle \mathsf{e}_2|\mathsf{e}_1\rangle|^2 = 0, \quad \text{отсюда} \quad \beta/2 = 90^\circ, \quad \beta = 180^\circ. \tag{5.15}$$

Итак, **ортонормированному базису в пространстве состояний соответствуют взаимно противоположные единичные векторы физического пространства**.

И наоборот, **двум взаимно противоположным единичным векторам физического пространства соответствует некоторый базис в пространстве состояний**.

Рис. 5.1: Противоположные направления в физическом пространстве (слева) и ортонормированный базис в пространстве состояний (справа)

5.6 Собственные значения и собственные векторы линейных операторов

5.6.1 Определения

Представляют особый интерес случаи, когда **ненулевой вектор $|\mathsf{x}\rangle$ в результате действия линейного оператора $\hat{\mathsf{Q}}$ умножается на некоторое число**:

$$\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{x}\rangle = \lambda|\mathsf{x}\rangle. \tag{5.16}$$

Ненулевые векторы, удовлетворяющие такому условию, называются **собственными векторами**, а соответствующие им числа называются **собственными значениями** линейного оператора $\hat{\mathsf{Q}}$.

Уравнение (5.16) можно записать так: $\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{x}\rangle = \lambda\hat{\mathsf{E}}|\mathsf{x}\rangle$.

Перенесём $\lambda\hat{\mathsf{E}}|\mathsf{x}\rangle$ из правой части уравнения в левую, тогда справа останется нулевой вектор $|0\rangle$, все компоненты которого в любом базисе равны нулю. И получим:

$$(\hat{\mathsf{Q}} - \lambda\hat{\mathsf{E}})|\mathsf{x}\rangle = |0\rangle.$$

Оказывается, что **собственные векторы определены с точностью до постоянного множителя**. В самом деле, если некоторый вектор $|\mathsf{x}\rangle$ является собственным вектором, т. е. удовлетворяет уравнению $\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{x}\rangle = \lambda|\mathsf{x}\rangle$, то вектор $\alpha|\mathsf{x}\rangle$, где $\alpha \neq 0$, тоже удовлетворяет этому уравнению, поскольку оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ линейный.

5.6.2 Решение характеристического уравнения

Пусть в некотором ортонормированном базисе матричные элементы оператора $\hat{\mathsf{Q}}$ будут Q_{ij}, а компоненты разложения вектора $|\mathsf{x}\rangle$ по этому же базису будут x_j. Кроме того, в любом ортонормированном базисе $(\hat{\mathsf{E}})_{ij} = \delta_{ij}$. Тогда записывая предыдущее уравнение в матричной форме, получим:

$$\sum_{j=1}^{2} (Q_{ij} - \lambda\delta_{ij})x_j = 0, \qquad i = 1, 2,$$

что означает:

$$\begin{aligned} &(Q_{11} - \lambda)x_1 + Q_{12}x_2 = 0, \\ &Q_{21}x_1 + (Q_{22} - \lambda)x_2 = 0. \end{aligned} \tag{5.17}$$

Умножая первое уравнение на $-Q_{21}$, а второе на $(Q_{11} - \lambda)$, а затем их складывая, получим:

$$[(Q_{11} - \lambda)(Q_{22} - \lambda) - Q_{21}Q_{12}]x_2 = 0.$$

Очевидное решение $x_2 = 0$ и, следовательно, $x_1 = 0$ нас не интересует. Есть ещё одна возможность удовлетворить последнему равенству: необходимо потребовать, чтобы выражение в квадратных скобках было равно нулю, или, что то же самое, определитель системы уравнений (5.17) был бы равен нулю:

$$\Delta = \begin{vmatrix} Q_{11} - \lambda & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} - \lambda \end{vmatrix} = (Q_{11} - \lambda)(Q_{22} - \lambda) - Q_{21}Q_{12} = 0.$$

Мы имеем квадратное уравнение относительно λ. Такое уравнение называется **характеристическим** или **вековым**. Решив его, получим два собственных значения λ_1 и λ_2.

Итак, у системы (5.17) имеется бесчисленное множество решений не при любых λ, а лишь тогда, когда λ равна собственным значениям оператора $\hat{\mathsf{Q}}$.

Далее, в системе (5.17) x_1 можно принять за аргумент, а x_2 за функцию, или наоборот. В любом случае каждое уравнение системы задаёт в декартовой системе координат прямую линию, проходящую через начало координат. Две прямые, как известно, пересекаются только в одной точке, и этой точкой в рассматриваемом случае является начало координат: $x_1 = x_2 = 0$. Но такое решение нас не интересует.

Нас интересуют лишь особые случаи, когда имеется бесчисленное множество ненулевых решений, а это значит, что

— во-первых, λ равно λ_1 или λ_2,

— во-вторых, две прямые совпадают, следовательно, совпадают и уравнения системы (5.17), или же их можно сделать совпадающими, потому что соответствующие коэффициенты при x_1 и x_2 пропорциональны. И тогда от системы (5.17) останется лишь какое-то одно уравнение.

Отсюда понятно, что подставляя в систему (5.17) $\lambda = \lambda_1$ некоторое произвольное значение $x_1 \neq 0$, из любого уравнения системы получим некоторое x_2. Величины x_1 и x_2 являются искомыми коэффициентами разложения первого собственного вектора по выбранным базисным векторам. При необходимости собственный вектор можно нормировать.

Аналогично, после подстановки в систему (5.17) $\lambda = \lambda_2$, получим коэффициенты разложения второго собственного вектора.

5.6.3 Пример. Собственные значения и собственные векторы оператора $\hat{\sigma}_y$

Пусть оператор $\hat{\sigma}_y$ изображается в некотором базисе матрицей Паули $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$. Все дальнейшие вычисления выполняются именно в этом базисе.

Тогда уравнение для собственных векторов (5.16) и (5.17) принимает вид:

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad \text{или, что то же самое,}$$

$$\begin{aligned} -\lambda x_1 - i x_2 = 0, \\ i x_1 - \lambda x_2 = 0. \end{aligned}$$

Отсюда получаем характеристическое уравнение

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = (\lambda - 1)(\lambda + 1) = 0$$

и собственные значения: $\lambda_1 = 1$ и $\lambda_1 = -1$.

Убеждаемся, что система уравнений после подстановки в неё любого собственного значения сводится к одному независимому уравнению.

Например, при $\lambda = \lambda_1 = 1$ система эквивалентна равенству $x_2 = i x_1$.

Пусть $x_1 = re^{i\alpha_1}$, т. е. равно произвольному комплексному числу с ненулевым модулем, $r \neq 0$. Тогда собственный вектор $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ будет изображаться вектором-столбцом $\begin{pmatrix} re^{i\alpha_1} \\ rie^{i\alpha_1} \end{pmatrix}$.

Его норма равна:

$$\sqrt{\begin{pmatrix} re^{-i\alpha_1} & r(-i)e^{-i\alpha_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} re^{i\alpha_1} \\ rie^{i\alpha_1} \end{pmatrix}} = \sqrt{r^2 + r^2} = r\sqrt{2}.$$

Наконец, разделив вектор на его норму, получим первый собственный вектор, нормированный на единицу: $\mathsf{y}_1 = \frac{e^{i\alpha_1}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$.

Аналогично получаем и второй собственный вектор при $\lambda = \lambda_2 = -1$.

В итоге имеем:

$$\mathsf{y}_1 = \frac{e^{i\alpha_1}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \text{ при } \lambda_1 = 1 \quad \text{и} \quad \mathsf{y}_2 = \frac{e^{i\alpha_2}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \text{ при } \lambda_2 = -1. \tag{5.18}$$

Так находятся собственные значения и собственные векторы в самом простом случае двумерного пространства состояний.

Аналогично решаются более сложные задачи, но там добавляются некоторые особенности. Например, возможно вырождение, когда характеристическое уравнение имеет кратные корни, т. е. собственные значения совпадают. Для изучения подобных деталей следует обратиться к систематическим курсам линейной алгебры.

5.7 Свойства эрмитовых операторов

5.7.1 Собственные значения эрмитовых операторов — действительные числа

Оператор $\hat{\mathrm{G}}$ называется эрмитовым, или самосопряжённым, если он не меняется в результате эрмитового сопряжения: $\hat{\mathrm{G}}^\dagger = \hat{\mathrm{G}}$.

Докажем, что **собственные значения эрмитовых операторов являются действительными числами**.

Пусть λ_i и $|\mathrm{g}_i\rangle$, $i = 1, 2$ соответственно собственные значения и собственные векторы эрмитового оператора $\hat{\mathrm{G}}$. Пусть также собственные векторы нормированы на единицу: $\langle \mathrm{g}_i|\mathrm{g}_i\rangle = 1$.

Тогда $\langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_i\rangle = \langle \mathrm{g}_i|\lambda_i|\mathrm{g}_i\rangle = \lambda_i\langle \mathrm{g}_i|\mathrm{g}_i\rangle = \lambda_i$.

В силу эрмитовости оператора $\hat{\mathrm{G}}$ имеем: $(\langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_i\rangle)^\dagger = \langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}^\dagger|\mathrm{g}_i\rangle = \langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_i\rangle$, и, записывая эту цепочку уравнений в обратном порядке, получаем: $\langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_i\rangle = (\langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_i\rangle)^\dagger = \lambda_i^\dagger = \lambda_i^*$.

Итак, $\langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_i\rangle = \lambda_i = \lambda_i^*$.

Следовательно, λ_i являются действительными числами.

5.7.2 Представление эрмитового оператора в его собственном базисе

Преобразуем выражение:

$$\langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_j\rangle = \langle \mathrm{g}_i|(\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_j\rangle) = \langle \mathrm{g}_i|(\lambda_j|\mathrm{g}_j\rangle) = \lambda_j\langle \mathrm{g}_i|\mathrm{g}_j\rangle. \tag{5.19}$$

В силу эрмитовости оператора $\hat{\mathrm{G}}$, а также потому, что эрмитово сопряжение комплексного числа эквивалентно его комплексному сопряжению, это же выражение можно преобразовать по-иному:

$$\langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_j\rangle = \langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}^\dagger|\mathrm{g}_j\rangle = (\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_i\rangle)^\dagger|\mathrm{g}_j\rangle = (\lambda_i|\mathrm{g}_i\rangle)^\dagger|\mathrm{g}_j\rangle =$$
$$\lambda_i^\dagger\langle \mathrm{g}_i|\mathrm{g}_j\rangle = \lambda_i^*\langle \mathrm{g}_i|\mathrm{g}_j\rangle = \lambda_i\langle \mathrm{g}_i|\mathrm{g}_j\rangle.$$

Вычитая второе выражение из первого, получим: $(\lambda_j - \lambda_i)\langle \mathrm{g}_i|\mathrm{g}_j\rangle = 0$.

Отсюда $\langle \mathrm{g}_i|\mathrm{g}_j\rangle = 0$, т. е. **собственные векторы эрмитового оператора ортогональны**, по крайней мере, в том случае, когда соответствующие им собственные значения не равны, $\lambda_j \neq \lambda_i$.

Будем считать, что собственные векторы $|\mathrm{g}_1\rangle$ и $|\mathrm{g}_2\rangle$ нормированы, потому что если это не так, то их всегда можно нормировать. Тогда векторы составят ортонормированный базис: $\langle \mathrm{g}_i|\mathrm{g}_j\rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2$, и, принимая во внимание равенство (5.19), получим формулу для матричных элементов:

$$G_{ij} = \langle \mathrm{g}_i|\hat{\mathrm{G}}|\mathrm{g}_j\rangle = \lambda_j\langle \mathrm{g}_i|\mathrm{g}_j\rangle = \lambda_j\delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2.$$

Соответствующая матрица такова: $\mathsf{G} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$.

Это значит, что **все недиагональные матричные элементы эрмитового оператора в его собственном базисе равны нулю, а диагональные — равны собственным значениям**.

Иначе говоря, **матрица эрмитового оператора, представленного в его собственном базисе, диагональна**.

Теперь воспользуемся равенством (5.11) и восстановим оператор $\hat{\mathrm{G}}$ по его матричным элементам:

$$\hat{\mathsf{G}} = \lambda_1 |\mathsf{g}_1\rangle\langle\mathsf{g}_1| + \lambda_2 |\mathsf{g}_2\rangle\langle\mathsf{g}_2| = \sum_{i=1}^{2} \lambda_i |\mathsf{g}_i\rangle\langle\mathsf{g}_i|. \tag{5.20}$$

Именно так изображается любой эрмитов оператор в своём собственном базисе.

До сих пор мы рассматривали случай, когда собственные значения эрмитового оператора не равны, $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Теперь допустим, что два собственных значения постепенно сближаются, т. е. λ_1 и λ_2 стремятся к одному и тому же значению λ. Тогда собственные векторы будут оставаться ортогональными. Наконец, и в пределе, когда $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$, они останутся таковыми.

Приведённые рассуждения наводят на мысль, что собственные векторы эрмитового оператора или изначально ортогональны, или, если они в процессе решения соответствующих уравнений оказались неортогональными, их можно ортогонализовать, т. е. заменить на эквивалентные ортогональные векторы. Строгое обоснование данного утверждения приводится в систематических курсах линейной алгебры.

Итак, **не уменьшая общности, можно считать, что собственные векторы эрмитового оператора всегда ортогональны**.

5.8 Оператор спина

5.8.1 Вывод формулы для оператора спина

Запишем уравнение (5.3) в несколько иных обозначениях: вместо $|\mathsf{d}\rangle$ будем писать $|\mathsf{d}_+\rangle$, а векторы ортонормированного базиса обозначим как $|\mathsf{z}_+\rangle$ и $|\mathsf{z}_-\rangle$:

$$|\mathsf{d}_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\mathsf{z}_+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|\mathsf{z}_-\rangle. \tag{5.21}$$

здесь $\langle\mathsf{z}_+|\mathsf{z}_+\rangle = \langle\mathsf{z}_-|\mathsf{z}_-\rangle = 1$, $\langle\mathsf{z}_+|\mathsf{z}_-\rangle = \langle\mathsf{z}_-|\mathsf{z}_+\rangle = 0$, θ и φ — углы сферической системы координат, задающие направление в физическом пространстве, изображаемое вектором $|\mathsf{d}_+\rangle$.

Вектор, характеризующий противоположное направление $|\mathsf{d}_-\rangle$, получим, выполнив замены $\theta \longrightarrow 180^\circ - \theta$ и $\varphi \longrightarrow 180^\circ + \varphi$:

$$|\mathsf{d}_-\rangle = \sin\frac{\theta}{2}|\mathsf{z}_+\rangle - \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|\mathsf{z}_-\rangle. \tag{5.22}$$

Векторы $|\mathsf{d}_+\rangle$ и $|\mathsf{d}_-\rangle$, как и любые векторы, задающие противоположные направления в физическом пространстве, ортогональны (см. п. п. 5.5): $\langle\mathsf{d}_+|\mathsf{d}_-\rangle = \langle\mathsf{d}_-|\mathsf{d}_+\rangle = 0$ и, кроме того, они нормированы: $\langle\mathsf{d}_+|\mathsf{d}_+\rangle = \langle\mathsf{d}_-|\mathsf{d}_-\rangle = 1$.

Итак, векторы $|\mathsf{d}_+\rangle$ и $|\mathsf{d}_-\rangle$ составляют ортонормированный базис.

Назовём

$$\hat{\sigma}_d = |\mathsf{d}_+\rangle\langle\mathsf{d}_+| - |\mathsf{d}_-\rangle\langle\mathsf{d}_-|$$

оператором проекции спина на направление $|\mathsf{d}_+\rangle$, или коротко, оператором спина, причём всё остальное, что есть в полном названии, будет молча подразумеваться.

Термин «оператор спина» взят из квантовой механики, но пока для нас это просто некоторая алгебраическая конструкция, которая позже будет наполнена физическим содержанием.

Оператор спина можно вычислить непосредственно, подставив в формулу для $\hat{\sigma}_d$ выражения $|\mathsf{d}_+\rangle$ и $|\mathsf{d}_-\rangle$. Но проще всего его восстановить из соответствующей матричной записи (4.29):

$$\begin{aligned}&\hat{\sigma}_d = |\mathsf{d}_+\rangle\langle\mathsf{d}_+| - |\mathsf{d}_-\rangle\langle\mathsf{d}_-| = n\hat{\sigma}_\mathsf{x} + m\hat{\sigma}_\mathsf{y} + l\hat{\sigma}_\mathsf{z}\\&\text{или}\\&\hat{\sigma}_d(\theta,\varphi) = (\sin\theta\cos\varphi)\hat{\sigma}_\mathsf{x} + (\sin\theta\sin\varphi)\hat{\sigma}_\mathsf{y} + (\cos\theta)\hat{\sigma}_\mathsf{z}.\end{aligned} \tag{5.23}$$

Очевидно, что оператор спина $\hat{\sigma}_d = |\mathsf{d}_+\rangle\langle\mathsf{d}_+| - |\mathsf{d}_-\rangle\langle\mathsf{d}_-|$ является эрмитовым оператором: $\hat{\sigma}_d^\dagger = \hat{\sigma}_d$.

5.8.2 Собственные векторы и собственные значения операторов $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$

Принимая во внимание равенство (5.23), а также то, что векторы $|\mathsf{d}_+\rangle$ и $|\mathsf{d}_-\rangle$ составляют ортонормированный базис, убедимся, что $\hat{\sigma}_d|\mathsf{d}_+\rangle = 1\cdot|\mathsf{d}_+\rangle$ и $\hat{\sigma}_d|\mathsf{d}_-\rangle = (-1)\cdot|\mathsf{d}_-\rangle$.

Это значит, что **оператор проекции спина имеет два собственных значения: $\lambda_1 = 1$ и $\lambda_2 = -1$.**

Из уравнений (5.21), (5.22) и (5.23) при $\theta = 0°$, $\varphi = 180°$, с учётом формулы Эйлера, $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$, получим:

$$\begin{aligned}|\mathsf{d}_+\rangle = |\mathsf{z}_+\rangle, \quad |\mathsf{d}_-\rangle = |\mathsf{z}_-\rangle,\\ \hat{\sigma}_d = \hat{\sigma}_z = |\mathsf{z}_+\rangle\langle\mathsf{z}_+| - |\mathsf{z}_-\rangle\langle\mathsf{z}_-|.\end{aligned} \tag{5.24}$$

причём собственные векторы $|\mathsf{z}_+\rangle$ при $\lambda_1 = 1$ и $|\mathsf{z}_-\rangle$ при $\lambda_2 = -1$, так же как и векторы $|\mathsf{d}_+\rangle$, $|\mathsf{d}_-\rangle$, составляют ортонормированный базис. Соответствующие матрицы имеют самый простой вид:
$\mathsf{z}_+ = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $\mathsf{z}_- = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$.

Матричные элементы оператора $\hat{\sigma}_z$ таковы: $\langle\mathsf{z}_+|\hat{\sigma}_z|\mathsf{z}_+\rangle = 1$, $\langle\mathsf{z}_+|\hat{\sigma}_z|\mathsf{z}_-\rangle = 0$ и т. д. Оказывается, что матрица оператора $\hat{\sigma}_z$ является диагональной σ_z-матрицей Паули: $\sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$.

Далее, из уравнений (5.21), (5.22) и (5.23) при $\theta = 90°$, $\varphi = 0°$, с учётом формулы Эйлера, $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$, получим, переобозначив $|\mathsf{d}_+\rangle = |\mathsf{x}_+\rangle$ и $|\mathsf{d}_-\rangle = |\mathsf{x}_-\rangle$:

$$\begin{aligned}&|\mathsf{x}_+\rangle = (|\mathsf{z}_+\rangle + |\mathsf{z}_-\rangle)/\sqrt{2} \quad \text{при } \lambda_1 = 1,\\&|\mathsf{x}_-\rangle = (|\mathsf{z}_+\rangle - |\mathsf{z}_-\rangle)/\sqrt{2} \quad \text{при } \lambda_2 = -1.\\&\hat{\sigma}_d = \hat{\sigma}_x = |\mathsf{x}_+\rangle\langle\mathsf{x}_+| - |\mathsf{x}_-\rangle\langle\mathsf{x}_-|, \quad \text{то есть}\\&\\&\hat{\sigma}_x = \tfrac{1}{2}(|\mathsf{z}_+\rangle + |\mathsf{z}_-\rangle)(\langle\mathsf{z}_+| + \langle\mathsf{z}_-|) - \tfrac{1}{2}(|\mathsf{z}_+\rangle - |\mathsf{z}_-\rangle)(\langle\mathsf{z}_+| - \langle\mathsf{z}_-|) =\\&|\mathsf{z}_+\rangle\langle\mathsf{z}_-| + |\mathsf{z}_-\rangle\langle\mathsf{z}_+|.\end{aligned} \tag{5.25}$$

В базисе $|\mathsf{z}_+\rangle$ и $|\mathsf{z}_-\rangle$ векторы $|\mathsf{x}_+\rangle$ и $|\mathsf{x}_-\rangle$ можно представить матрицами-столбцами:

$$\mathsf{x}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \text{ при } \lambda_1 = 1, \quad \text{и} \quad \mathsf{x}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}, \text{ при } \lambda_2 = -1.$$

Матричные элементы оператора $\hat{\sigma}_x$ вычисляются как обычно:
$\langle \mathsf{z}_+|\hat{\sigma}_x|\mathsf{z}_+\rangle = \langle \mathsf{z}_+|(|\mathsf{z}_+\rangle\langle \mathsf{z}_-| + |\mathsf{z}_-\rangle\langle \mathsf{z}_+|)|\mathsf{z}_+\rangle = 0$,
$\langle \mathsf{z}_+|\hat{\sigma}_x|\mathsf{z}_-\rangle = \langle \mathsf{z}_+|(|\mathsf{z}_+\rangle\langle \mathsf{z}_-| + |\mathsf{z}_-\rangle\langle \mathsf{z}_+|)|\mathsf{z}_-\rangle = 1$ и т. д.

И оказалось, что матрица оператора $\hat{\sigma}_x$ в принятом базисе является σ_x-матрицей Паули: $\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$.

Аналогично при $\theta = 90°$, $\varphi = 90°$, переобозначив $|\mathsf{d}_+\rangle = |\mathsf{y}_+\rangle$ и $|\mathsf{d}_-\rangle = |\mathsf{y}_-\rangle$, получаем:

$$\begin{aligned} &|\mathsf{y}_+\rangle = (|\mathsf{z}_+\rangle + i|\mathsf{z}_-\rangle)/\sqrt{2} \quad \text{при } \lambda_1 = 1,\\ &|\mathsf{y}_-\rangle = (|\mathsf{z}_+\rangle - i|\mathsf{z}_-\rangle)/\sqrt{2} \quad \text{при } \lambda_2 = -1.\\ &\hat{\sigma}_d = \hat{\sigma}_y = |\mathsf{y}_+\rangle\langle \mathsf{y}_+| - |\mathsf{y}_-\rangle\langle \mathsf{y}_-| = -i|\mathsf{z}_+\rangle\langle \mathsf{z}_-| + i|\mathsf{z}_-\rangle\langle \mathsf{z}_+|. \end{aligned} \tag{5.26}$$

Векторы $|\mathsf{y}_+\rangle$ и $|\mathsf{y}_-\rangle$ в базисе $|\mathsf{z}_+\rangle$ и $|\mathsf{z}_-\rangle$ представлены матрицами-столбцами:

$$\mathsf{y}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}, \text{ при } \lambda_1 = 1, \quad \text{и} \quad \mathsf{y}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}, \text{ при } \lambda_2 = -1.$$

а матрица оператора $\hat{\sigma}_y$ оказывается σ_y-матрицей Паули: $\sigma_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}$.

Наконец, все полученные здесь векторы состояний или соответствующие им матрицы-столбцы задают некоторые направления физического пространства и, как известно (см. п. п. 4.3.4), определены с точностью до произвольного комплексного множителя с единичным модулем, $e^{i\alpha}$.

В частности, матрицы y_+ и y_- можно записать так:

$$\mathsf{y}_+ = \frac{e^{i\alpha_1}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}, \text{ при } \lambda_1, = 1 \quad \text{и} \quad \mathsf{y}_- = \frac{e^{i\alpha_2}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}, \text{ при } \lambda_2 = -1.$$

Неудивительно, что точно такие же результаты получены при непосредственном вычислении собственных векторов оператора $\hat{\sigma}_y$ (см. равенства (5.18)).

5.8.3 О том, как называются представления

Решая задачи о движении тел в физическом пространстве, мы обычно задаёмся некоторой системой координат, и все соотношения, связывающие физические величины, записываем в этой системе координат.

Аналогично, решая задачи, сформулированные в терминах пространства состояний, мы задаёмся тем или иным ортонормированным базисом, а затем все векторы и операторы **представляем** в этом базисе, т. е. мы выбираем соответствующее **представление**.

Таким образом, **выбор представления** или, иначе говоря, выбор ортонормированного базиса в пространстве состояний, **аналогичен выбору системы координат** при решении задач о движении тел в физическом пространстве.

Обычно представления получают собственные названия по именам тех эрмитовых операторов, которые в данном представлении диагональны.

Например, приведённые в п. п. 5.8.2 собственные векторы операторов $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$ записаны в z-представлении, т. к. оператор $\hat{\sigma}_z$ в этом представлении диагонален, а именно, $\sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$.

Не составляет труда записать эти формулы, например, в x-представлении. Для этого в выражениях для $|\mathsf{y}_+\rangle$ и $|\mathsf{y}_-\rangle$, а также в формулах $\hat{\sigma}_y = |\mathsf{y}_+\rangle\langle\mathsf{y}_+| - |\mathsf{y}_-\rangle\langle\mathsf{y}_-|$, $\hat{\sigma}_z = |\mathsf{z}_+\rangle\langle\mathsf{z}_+| - |\mathsf{z}_-\rangle\langle\mathsf{z}_-|$, и вообще там, где встречаются $|\mathsf{z}_+\rangle$ и $|\mathsf{z}_-\rangle$ следует произвести замену, которая получается из соотношений (5.25):

$$|\mathsf{z}_+\rangle = (|\mathsf{x}_+\rangle + |\mathsf{x}_-\rangle)/\sqrt{2} \quad \text{и} \quad |\mathsf{z}_-\rangle = (|\mathsf{x}_+\rangle - |\mathsf{x}_-\rangle)/\sqrt{2},$$

а затем записать соответствующие матрицы.

Выполните вычисления самостоятельно в качестве упражнения.

Далее рассмотрим переход от одного представления к другому в самом общем виде.

5.9 Переход от одного представления к другому

5.9.1 Унитарные преобразования

Пусть даны два ортонормированных базиса $\langle\mathsf{e}_i^{(a)}|\mathsf{e}_j^{(a)}\rangle = \delta_{ij}$ и $\langle\mathsf{e}_i^{(b)}|\mathsf{e}_j^{(b)}\rangle = \delta_{ij},\ i,j = 1,2$, удовлетворяющие условию полноты (5.13):

$\mathsf{I} = |\mathsf{e}_1^{(a)}\rangle\langle\mathsf{e}_1^{(a)}| + |\mathsf{e}_2^{(a)}\rangle\langle\mathsf{e}_2^{(a)}|$ и $\mathsf{I} = |\mathsf{e}_1^{(b)}\rangle\langle\mathsf{e}_1^{(b)}| + |\mathsf{e}_2^{(b)}\rangle\langle\mathsf{e}_2^{(b)}|$.

Произвольный вектор $|\mathsf{d}\rangle$ можно представить в базисе (a) следующим образом:

$$|\mathsf{d}\rangle = (|\mathsf{e}_1^{(a)}\rangle\langle\mathsf{e}_1^{(a)}| + |\mathsf{e}_2^{(a)}\rangle\langle\mathsf{e}_2^{(a)}|)|\mathsf{d}\rangle = \langle\mathsf{e}_1^{(a)}|\mathsf{d}\rangle|\mathsf{e}_1^{(a)}\rangle + \langle\mathsf{e}_2^{(a)}|\mathsf{d}\rangle|\mathsf{e}_2^{(a)}\rangle,$$

$$\text{т. е.} \quad |\mathsf{d}\rangle = \sum_{i=1}^{2}\langle\mathsf{e}_i^{(a)}|\mathsf{d}\rangle|\mathsf{e}_i^{(a)}\rangle.$$

Аналогично представляем вектор $|\mathsf{d}\rangle$ в базисе (b):

$$|\mathsf{d}\rangle = \sum_{i=1}^{2}\langle\mathsf{e}_i^{(b)}|\mathsf{d}\rangle|\mathsf{e}_i^{(b)}\rangle.$$

В этих формулах $\langle\mathsf{e}_i^{(a)}|\mathsf{d}\rangle$ и $\langle\mathsf{e}_i^{(b)}|\mathsf{d}\rangle$ — коэффициенты, представляющие вектор $|\mathsf{d}\rangle$ в базисах (a) и (b) соответственно.

Воспользуемся снова условием полноты и выразим $\langle\mathsf{e}_i^{(b)}|\mathsf{d}\rangle$ через $\langle\mathsf{e}_i^{(a)}|\mathsf{d}\rangle$:

$$\langle\mathsf{e}_i^{(b)}|\mathsf{d}\rangle = \langle\mathsf{e}_i^{(b)}|(|\mathsf{e}_1^{(a)}\rangle\langle\mathsf{e}_1^{(a)}| + |\mathsf{e}_2^{(a)}\rangle\langle\mathsf{e}_2^{(a)}|)|\mathsf{d}\rangle = \langle\mathsf{e}_i^{(b)}|\mathsf{e}_1^{(a)}\rangle\langle\mathsf{e}_1^{(a)}|\mathsf{d}\rangle + \langle\mathsf{e}_i^{(b)}|\mathsf{e}_2^{(a)}\rangle\langle\mathsf{e}_2^{(a)}|\mathsf{d}\rangle,$$

$$\text{т. е.} \quad \langle\mathsf{e}_i^{(b)}|\mathsf{d}\rangle = \sum_{j=1}^{2}\langle\mathsf{e}_i^{(b)}|\mathsf{e}_j^{(a)}\rangle\langle\mathsf{e}_j^{(a)}|\mathsf{d}\rangle = \sum_{j=1}^{2}U_{ij}\langle\mathsf{e}_j^{(a)}|\mathsf{d}\rangle, \qquad i = 1,2.$$

Здесь $U_{ij} = \langle\mathsf{e}_i^{(b)}|\mathsf{e}_j^{(a)}\rangle,\ \ i,j = 1,2$ — матричные элементы матрицы U, задающей переход от (a)-представления к (b)-представлению, таким образом, матрица U имеет следующий вид:

$$\mathsf{U} = \begin{pmatrix} \langle\mathsf{e}_1^{(b)}|\mathsf{e}_1^{(a)}\rangle & \langle\mathsf{e}_1^{(b)}|\mathsf{e}_2^{(a)}\rangle \\ \langle\mathsf{e}_2^{(b)}|\mathsf{e}_1^{(a)}\rangle & \langle\mathsf{e}_2^{(b)}|\mathsf{e}_2^{(a)}\rangle \end{pmatrix}.$$

Предпоследнее равенство в матричной форме можно записать так:

$$\mathsf{d}^{(b)} = \mathsf{U}\mathsf{d}^{(a)}. \tag{5.27}$$

Аналогично выводится формула перехода от (b)-представления к (a)-представлению:

$$\mathsf{d}^{(a)} = \mathsf{U}'\mathsf{d}^{(b)}.$$

здесь $U'_{ij} = \langle \mathsf{e}_i^{(a)} | \mathsf{e}_j^{(b)} \rangle, \quad i,j = 1,2$, т. е. матрица U' выглядит точно так же, как матрица U, с единственным отличием: (a) и (b) поменялись местами.

Из двух последних равенств следует:

$$\mathsf{d}^{(b)} = \mathsf{U}\mathsf{U}'\mathsf{d}^{(b)} = \mathsf{E}\mathsf{d}^{(b)}, \qquad \mathsf{d}^{(a)} = \mathsf{U}'\mathsf{U}\mathsf{d}^{(a)} = \mathsf{E}\mathsf{d}^{(a)}.$$

Т.е. $\mathsf{U}\mathsf{U}' = \mathsf{U}'\mathsf{U} = \mathsf{E}$. Точно таким же соотношениям удовлетворяют взаимнообратные матрицы, следовательно, $\mathsf{U}' = \mathsf{U}^{-1}$ и $U'_{ij} = U^{-1}_{ij} = \langle \mathsf{e}_i^{(a)} | \mathsf{e}_j^{(b)} \rangle, \quad i,j = 1,2$.

Продолжаем, принимая во внимание равенства $\langle \mathsf{e}_i^{(a)} | \mathsf{e}_j^{(b)} \rangle = \langle \mathsf{e}_j^{(b)} | \mathsf{e}_i^{(a)} \rangle^\dagger = \langle \mathsf{e}_j^{(b)} | \mathsf{e}_i^{(a)} \rangle^*$:

$$\mathsf{U}^{-1} = \mathsf{U}' = \begin{pmatrix} \langle \mathsf{e}_1^{(a)} | \mathsf{e}_1^{(b)} \rangle & \langle \mathsf{e}_1^{(a)} | \mathsf{e}_2^{(b)} \rangle \\ \langle \mathsf{e}_2^{(a)} | \mathsf{e}_1^{(b)} \rangle & \langle \mathsf{e}_2^{(a)} | \mathsf{e}_2^{(b)} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \mathsf{e}_1^{(b)} | \mathsf{e}_1^{(a)} \rangle^* & \langle \mathsf{e}_2^{(b)} | \mathsf{e}_1^{(a)} \rangle^* \\ \langle \mathsf{e}_1^{(b)} | \mathsf{e}_2^{(a)} \rangle^* & \langle \mathsf{e}_2^{(b)} | \mathsf{e}_2^{(a)} \rangle^* \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \langle \mathsf{e}_1^{(b)} | \mathsf{e}_1^{(a)} \rangle^* & \langle \mathsf{e}_1^{(b)} | \mathsf{e}_2^{(a)} \rangle^* \\ \langle \mathsf{e}_2^{(b)} | \mathsf{e}_1^{(a)} \rangle^* & \langle \mathsf{e}_2^{(b)} | \mathsf{e}_2^{(a)} \rangle^* \end{pmatrix}^{\mathsf{T}} = \begin{pmatrix} \langle \mathsf{e}_1^{(b)} | \mathsf{e}_1^{(a)} \rangle & \langle \mathsf{e}_1^{(b)} | \mathsf{e}_2^{(a)} \rangle \\ \langle \mathsf{e}_2^{(b)} | \mathsf{e}_1^{(a)} \rangle & \langle \mathsf{e}_2^{(b)} | \mathsf{e}_2^{(a)} \rangle \end{pmatrix}^{\dagger} = \mathsf{U}^\dagger.$$

Полученный результат означает, что матрица U является унитарной, поскольку удовлетворяет равенству $\mathsf{U}^{-1} = \mathsf{U}^\dagger$ (соотношение (3.21)).

Теперь заменим обозначения на более удобные. Равенство (5.27) запишем в следующем виде:

$$\mathsf{d}' = \mathsf{U}\mathsf{d},$$

здесь U — унитарная матрица,

$$\mathsf{U} = \begin{pmatrix} \langle \mathsf{e}'_1 | \mathsf{e}_1 \rangle & \langle \mathsf{e}'_1 | \mathsf{e}_2 \rangle \\ \langle \mathsf{e}'_2 | \mathsf{e}_1 \rangle & \langle \mathsf{e}'_2 | \mathsf{e}_2 \rangle \end{pmatrix}, \tag{5.28}$$

удовлетворяющая условию: $\mathsf{U}^\dagger \cdot \mathsf{U} = \mathsf{U} \cdot \mathsf{U}^\dagger = \mathsf{E}$.

Теперь пусть дано равенство

$$|\mathsf{b}\rangle = \hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{d}\rangle,$$

согласно которому в результате действия некоторого линейного оператора $\hat{\mathsf{Q}}$ на произвольный вектор состояния $|\mathsf{d}\rangle$ получается некоторый вектор состояния $|\mathsf{b}\rangle$. В нештрихованном и в штрихованном базисах равенство $|\mathsf{b}\rangle = \hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{d}\rangle$ представляется соответствующими матричными равенствами: $\mathsf{b} = \mathsf{Q}\mathsf{d}$ и $\mathsf{b}' = \mathsf{Q}'\mathsf{d}'$, причём $\mathsf{d}' = \mathsf{U}\mathsf{d}$ и $\mathsf{b}' = \mathsf{U}\mathsf{b}$.

Выясним, как взаимосвязаны матрицы Q и Q'.

Из $\mathsf{b}' = \mathsf{Q}'\mathsf{d}'$ следует: $\mathsf{U}\mathsf{b} = \mathsf{Q}'\mathsf{U}\mathsf{d}$. Тогда

$$\mathsf{U}^\dagger\mathsf{U}\mathsf{b} = \mathsf{E}\mathsf{b} = \mathsf{b} = (\mathsf{U}^\dagger\mathsf{Q}'\mathsf{U})\mathsf{d} = \mathsf{Q}\mathsf{d}.$$

Отсюда $\mathsf{U}^\dagger\mathsf{Q}'\mathsf{U} = \mathsf{Q}$.

Обратим это равенство, домножая слева на U и справа на $\mathsf{U}^\dagger$:

$\mathsf{U}\mathsf{U}^\dagger\mathsf{Q}'\mathsf{U}\mathsf{U}^\dagger = \mathsf{E}\mathsf{Q}'\mathsf{E} = \mathsf{U}\mathsf{Q}\mathsf{U}^\dagger$.

И, окончательно, $\mathsf{Q}' = \mathsf{U}\mathsf{Q}\mathsf{U}^\dagger$.

Подведём итоги.

Полученные выше формулы

$$\begin{aligned} &\mathsf{d}' = \mathsf{U}\mathsf{d}, \quad (\mathsf{d}^\dagger)' = \mathsf{d}^\dagger \mathsf{U}^\dagger, \\ &\mathsf{Q}' = \mathsf{U}\mathsf{Q}\mathsf{U}^\dagger, \\ &\text{здесь} \;\; \mathsf{U}^\dagger \cdot \mathsf{U} = \mathsf{U} \cdot \mathsf{U}^\dagger = \mathsf{E}, \end{aligned} \tag{5.29}$$

до сих пор интерпретировались «пассивным» образом (см. п. п. 3.7.2).

Это значит, что вектор состояния $|\mathsf{d}\rangle$ и действующий в пространстве состояний линейный оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ представлены по-разному в штрихованном и нештрихованном ортонормированном базисе, а соотношения (5.28) и (5.29) устанавливают связь между двумя представлениями.

Возможна активная интерпретация этих же формул. Но прежде введём определение унитарного преобразования.

Оператор $\hat{\mathsf{U}}$, удовлетворяющий соотношению $\hat{\mathsf{U}}\hat{\mathsf{U}}^\dagger = \hat{\mathsf{U}}^\dagger\hat{\mathsf{U}} = \hat{\mathsf{E}}$, или, что то же самое, $\hat{\mathsf{U}}^\dagger = \hat{\mathsf{U}}^{-1}$, называется **унитарным оператором**.

Унитарный оператор $\hat{\mathsf{U}}$ порождает в пространстве состояний **унитарное преобразование**; соответствующие уравнения можно получить, записав соотношения (5.29) в инвариантной форме:

$$\begin{aligned} &|\mathsf{d}'\rangle = \hat{\mathsf{U}}|\mathsf{d}\rangle \quad \langle \mathsf{d}'| = \langle \mathsf{d}|\hat{\mathsf{U}}^\dagger, \\ &\hat{\mathsf{Q}}' = \hat{\mathsf{U}}\hat{\mathsf{Q}}\hat{\mathsf{U}}^\dagger. \end{aligned} \tag{5.30}$$

Теперь сформулируем активную интерпретацию соотношений (5.29).

Как известно, вектор состояния $|\mathsf{d}\rangle$ и действующий в пространстве состояний линейный оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ изображаются в некотором фиксированном базисе матрицей-столбцом d и квадратной матрицей Q. В результате действия унитарного оператора $\hat{\mathsf{U}}$, изображаемого в принятом базисе унитарной матрицей U, вектор $|\mathsf{d}\rangle$ переводится в новый вектор состояний $|\mathsf{d}'\rangle$, а оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ переводится в новый оператор $\hat{\mathsf{Q}}'$, согласно соотношениям (5.30). Новый вектор $|\mathsf{d}'\rangle$ и новый оператор $\hat{\mathsf{Q}}'$ изображаются в принятом базисе согласно соотношениям (5.29) матрицей-столбцом d' и квадратной матрицей Q'.

5.9.2 Свойства унитарных преобразований

Приведённые ниже свойства следуют из соотношений (5.30).

1. Собственные значения операторов при унитарных преобразованиях сохраняются.

Из уравнения, определяющего собственные значения операторов,
$\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{x}\rangle = \lambda|\mathsf{x}\rangle$ получаем:

$$\hat{\mathsf{U}}\hat{\mathsf{Q}}\hat{\mathsf{U}}^\dagger\hat{\mathsf{U}}|\mathsf{x}\rangle = \lambda\hat{\mathsf{U}}|\mathsf{x}\rangle, \text{ т. е. } \hat{\mathsf{Q}}'|\mathsf{x}'\rangle = \lambda|\mathsf{x}'\rangle.$$

Следовательно, если некоторое значение λ_1 является решением уравнения $\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{x}\rangle = \lambda|\mathsf{x}\rangle$, то λ_1 является также решением уравнения $\hat{\mathsf{Q}}'|\mathsf{x}'\rangle = \lambda|\mathsf{x}'\rangle$.

Итак, λ_1 является собственным значением и оператора $\hat{\mathsf{Q}}$, и оператора $\hat{\mathsf{Q}}'$. Это значит, что **унитарные преобразования оставляют неизменными собственные значения операторов**.

2. Унитарные преобразования оставляют неизменными скалярные произведения двух произвольно взятых векторов пространства состояния:

$$\langle \mathsf{b}'|\mathsf{d}'\rangle = \langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{U}}^\dagger\hat{\mathsf{U}}|\mathsf{d}\rangle = \langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{E}}|\mathsf{d}\rangle = \langle \mathsf{b}|\mathsf{d}\rangle.$$

3. Унитарные преобразования оставляют неизменными выражения следующего вида: $\langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{d}\rangle$, здесь $\hat{\mathsf{Q}}$ — некоторый линейный оператор.

$$\langle \mathsf{b}'|\hat{\mathsf{Q}}'|\mathsf{d}'\rangle = \langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{U}}^\dagger(\hat{\mathsf{U}}\hat{\mathsf{Q}}\hat{\mathsf{U}}^\dagger)\hat{\mathsf{U}}|\mathsf{d}\rangle = \langle \mathsf{b}|(\hat{\mathsf{U}}^\dagger\hat{\mathsf{U}})\hat{\mathsf{Q}}(\hat{\mathsf{U}}^\dagger\hat{\mathsf{U}})|\mathsf{d}\rangle = \langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{E}}\hat{\mathsf{Q}}\hat{\mathsf{E}}|\mathsf{d}\rangle = \langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{d}\rangle.$$

Отсюда следует, что собственные значения операторов, скалярные произведения $\langle \mathsf{b}|\mathsf{d}\rangle$, выражения вида $\langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{d}\rangle$ можно вычислять в любом базисе, т. е. результат вычислений не зависит от выбора представления. Это не должно удивлять: всё здесь перечисленное имеет непосредственное отношение к наблюдаемой картине реальности (см. п. п. 6.4), которая не зависит того произвола, который мы вынуждены вносить в математические формулы при описании реальности.

Глава 6

Спин 1/2

6.1 Экспериментальные основания и математическое описание

6.1.1 О собственном моменте импульса (спине) в квантовой механике

Пора наполнить описанную выше математическую схему физическим содержанием.

В качестве простейшей квантово-механической системы, которая, тем не менее, **содержит почти все существенные особенности квантово-механического описания реальности**, рассмотрим систему со спином 1/2.

Согласно классическим представлениям, источником магнетизма являются электрические токи. При вращении заряженных тел происходит перенос электрических зарядов, т. е. возбуждаются электрические токи, и, следовательно, возникает магнетизм.

Магнитные свойства вещества характеризуются магнитным моментом.

Отсюда понятно, что магнитный момент и момент импульса (применяются иные термины: момент количества движения, угловой момент), характеризующий количество вращательного движения, тесно взаимосвязаны.

В квантово-механической реальности такая связь тоже имеет место, причём, даже в чисто квантовых ситуациях, когда о вращении, как об аналоге классического вращения, говорить не приходится. В связи с этим в квантовой механике вводится понятие «спин» (от англ. spin — вращаться, вертеться) — собственный момент импульса квантово-механических систем, а также элементарных частиц, имеющий квантовую природу и не связанный с перемещением системы или частицы как целого.

Момент импульса имеет такую же размерность, что и $\hbar$ — приведённая постоянная Планка, $\hbar = 1,054572 \cdot 10^{-27}$ эрг·с. Поэтому спин, как правило, измеряется в единицах $\hbar$.

В 1925 году Дж. Уленбек и С. Гаудсмит, исходя из анализа спектроскопических данных, установили, что электрон обладает собственным (спиновым) моментом импульса, равным $\hbar/2$ и связанным с ним магнитным моментом, равным магнетону Бора $\mu_{\text{Б}} = \frac{\hbar e}{2mc}$, здесь e и m — заряд и масса электрона, c — скорость света.

Иначе говоря, спин электрона равен 1/2 (в единицах $\hbar$).

Несколько раньше, в 1921 году немецкие физики Отто Штерн и Вальтер Герлах экспериментально подтвердили наличие у атомов собственного момента импульса, т. е. спина.

Опыт Штерна-Герлаха состоит в следующем: пучки атомов серебра, а потом и других атомов, пропускали через сильно неоднородное магнитное поле, создаваемое мощным постоянным магнитом. Поскольку атомы большинства элементов обладают собственными моментами импульса и, следовательно, магнитными моментами, то на них действовала сила, пропорциональная проекции спина на направление магнитного поля, вследствие чего атомы отклонялись от первоначального направления движения.

Оказалось, что первоначальный пучок атомов всегда разделялся на несколько пучков, при условии, что магнитные моменты атомов не равны нулю. В частности, пучок атомов серебра разделялся на два пучка.

Отсюда следует, что **проекция магнитных моментов и, следовательно, спинов атомов на направление, выделенное магнитным полем, имеет дискретный спектр**.

Этот результат противоречит предсказаниям классической теории. Согласно классическим представлениям проекция момента импульса на направление магнитного поля должна иметь бесчисленное множество значений, иначе говоря, характеризоваться непрерывным спектром, т. к. первоначально магнитные моменты атомов ориентированы хаотично (непрерывно), а после прохождения через магнитное поле, хаотичность (непрерывность спектра) должна сохраниться.

Итак, опыт Штерна-Герлаха подтвердил положение квантовомеханической теории о квантовании собственного момента импульса атомов.

Позже уже одному Штерну удалось получить аналогичные результаты для пучков протонов и электронов. А именно, пучок электронов или протонов в опытах Штерна-Герлаха расщепляется так же, как пучок атомов серебра, т. е. на два пучка.

Далее мы будем иметь в виду электроны, но, очевидно, что все результаты можно будет дословно повторить для любых систем со спином 1/2.

Итак, в опыте Штерна-Герлаха можно получить два пучка электронов с противоположно ориентированными спинами. Потом можно поставить перед одним из пучков поглощающую перегородку и тогда останется лишь один пучок, где спины электронов ориентированы вдоль некоторого одного направления.

Иначе говоря, **можно приготовить пучок электронов или даже единственный электрон, поляризованный в некотором направлении; это означает, что проекция спина электронов(-а) на направление, выделенное магнитным полем, оказывается равной** $\hbar/2$.

6.1.2 Принцип суперпозиции

Обратимся теперь к уравнению (5.21):

$$|\mathsf{d}_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\mathsf{z}_+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|\mathsf{z}_-\rangle. \tag{6.1}$$

здесь $\langle \mathsf{z}_+|\mathsf{z}_+\rangle = \langle \mathsf{z}_-|\mathsf{z}_-\rangle = 1$, $\langle \mathsf{z}_+|\mathsf{z}_-\rangle = \langle \mathsf{z}_-|\mathsf{z}_+\rangle = 0$, а θ и φ — углы сферической системы координат, задающие направление в физическом пространстве, изображаемое нормированным на единицу вектором $|\mathsf{d}_+\rangle$.

Направление оси Oz в физическом пространстве задаётся условием $\theta = 0°$, и тогда $|\mathsf{d}_+\rangle = |\mathsf{z}_+\rangle$. Это значит, что направление оси Oz изображается вектором $|\mathsf{z}_+\rangle$. Аналогично, противоположное направление при $\theta = 180°$, $\varphi = 0°$ изображается вектором $|\mathsf{z}_-\rangle$.

Интерпретируем это уравнение с позиций опыта Штерна-Герлаха.

Пусть сначала с помощью прибора Штерна-Герлаха был подготовлен пучок электронов, поляризованный, вдоль направления $|\mathsf{d}_+\rangle$, причём угол между осью Oz и осью поляризации равен θ. Затем полученный пучок электронов был разделён вторым прибором Штерна-Герлаха на два пучка, поляризованных по направлениям $|\mathsf{z}_+\rangle$ и $|\mathsf{z}_-\rangle$, т. е. соответственно в положительном и отрицательном направлении оси Oz.

Более того, если бы электроны пускались по одному, то всё равно каждый электрон оказывался бы или в состоянии $|\mathsf{z}_+\rangle$, или в состоянии $|\mathsf{z}_-\rangle$.

И получается, что состояние $|\mathsf{d}_+\rangle$ содержит и состояние $|\mathsf{z}_+\rangle$, и состояние $|\mathsf{z}_-\rangle$, если только $\theta \neq 0°$ или $\theta \neq 180°$.

Следует особо подчеркнуть, что **состояния $|\mathsf{z}_+\rangle$ и $|\mathsf{z}_-\rangle$ являются взаимоисключающими, поэтому с позиций классической физики они не могут быть объединены в одном состоянии**.

В квантовой механике взаимоисключающие состояния сводятся воедино на основе **принципа суперпозиции**: если квантово-механическая система может находиться в состояниях $|\mathsf{z}_+\rangle$, $|\mathsf{z}_-\rangle$, то линейная комбинация

$$|\mathsf{d}_+\rangle = c_1|\mathsf{z}_+\rangle + c_2|\mathsf{z}_-\rangle,$$

где c_1, c_2 — некоторые комплексные числа, тоже характеризует какое-то состояние квантово-механической системы.

Направление поляризации задают только нормированные на единицу векторы состояний, поэтому дополнительно требуем, чтобы

$\sqrt{\langle \mathsf{d}_+|\mathsf{d}_+\rangle} = \sqrt{c_1^2 + c_2^2} = 1$.

И вообще, принцип суперпозиции можно формулировать так:

если квантово-механическая система может находиться в состояниях $|a_1\rangle$, $|a_2\rangle$, ... $|a_m\rangle$, то любая их линейная комбинация $\alpha_1|a_1\rangle + \alpha_2|a_2\rangle + \ldots + \alpha_m|a_m\rangle$ (здесь α_1, $\alpha_2, \ldots,$ α_m — некоторые комплексные числа) характеризует, после нормировки, ещё какое-то состояние этой системы.

6.1.3 Вычисление вероятностей

Продолжаем изучать ситуацию с расщеплением пучка электронов.

А именно, пучок электронов, первоначально поляризованный в направлении $|\mathsf{d}_+\rangle$, пропустили через прибор Штерна-Герлаха, с ориентацией магнитного поля вдоль оси $\mathrm{O}z$. И тогда пучок электронов разделится на два пучка, один из которых поляризован вдоль оси $\mathrm{O}z$ (состояние поляризации $|\mathsf{z}_+\rangle$), а другой поляризован в противоположном направлении (состояние поляризации $|\mathsf{z}_-\rangle$).

Если бы мы **заранее знали**, что электрон находится в том или ином определённом состоянии, то так бы и говорили, что электрон находится в этом состоянии. И всё! Нет никакого принципа суперпозиции!

Но существенной особенностью спина как квантово-механической системы является то, что невозможно заранее предсказать, в каком именно состоянии окажется электрон. Поэтому приходится говорить лишь о **вероятностях обнаружения** электрона в том или ином состоянии.

Тогда достоверно, т. е. с вероятностью, равной единице, обнаружится или состояние $|\mathsf{z}_+\rangle$, или состояние $|\mathsf{z}_-\rangle$, и по правилу сложения вероятностей несовместных событий получим: $\mathsf{p}_+ + \mathsf{p}_- = 1$, здесь p_+ — вероятность того, что спин ориентирован вдоль оси $\mathrm{O}z$, p_- — вероятность того, что спин ориентирован в обратном направлении.

Далее, из элементарных геометрических соображений понятно, что проекция спина на положительное направление оси $\mathrm{O}z$, т. е. проекция вектора длиной $\hbar/2$, первоначально ориентированного в направлении $|\mathsf{d}_+\rangle$, должна быть равна $\frac{\hbar}{2}\cos\theta$, где θ является, по сути, углом между двумя названными направлениями.

Но такого не случится вследствие квантового характера спина: проекция будет или $+\hbar/2$, или $-\hbar/2$.

Тогда потребуем, чтобы получалось $\frac{\hbar}{2}\cos\theta$, **хотя бы в среднем**:

$$\mathsf{s}_z^{\text{ср}} = \sigma_+ \mathsf{p}_+ + \sigma_- \mathsf{p}_- = \frac{\hbar}{2}\mathsf{p}_+ + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)\mathsf{p}_- = \frac{\hbar}{2}\cos\theta. \tag{6.2}$$

Итак, есть два уравнения для p_+ и p_-:

$$\begin{aligned} \mathsf{p}_+ + \mathsf{p}_- &= \ 1 \ = \cos^2\theta/2 + \sin^2\theta/2. \\ \mathsf{p}_+ - \mathsf{p}_- &= \cos\theta = \cos^2\theta/2 - \sin^2\theta/2. \end{aligned}$$

Отсюда получаем вероятности:

$$\mathsf{p}_+ = \mathsf{P}(|\mathsf{d}_+\rangle \to |\mathsf{z}_+\rangle) = \cos^2\theta/2 \quad \text{и} \quad \mathsf{p}_- = \mathsf{P}(|\mathsf{d}_+\rangle \to |\mathsf{z}_-\rangle) = \sin^2\theta/2.$$

Точно такие же выражения для вероятностей получаются из формулы (6.1):

$$\begin{aligned} &\mathsf{p}_+ = |\langle \mathsf{z}_+|\mathsf{d}_+\rangle|^2 = \cos^2\theta/2 \\ &\text{и} \\ &\mathsf{p}_- = |\langle \mathsf{z}_-|\mathsf{d}_+\rangle|^2 = |e^{i\varphi}\sin\theta/2|^2 = \sin^2\theta/2. \end{aligned} \tag{6.3}$$

Выражения $\langle \mathsf{z}_+|\mathsf{d}_+\rangle$ и $\langle \mathsf{z}_-|\mathsf{d}_+\rangle$ и, вообще, выражения вида

$$\langle\text{конечное состояние}|\text{начальное состояние}\rangle,$$

называются **амплитудами вероятности.**

Вероятность перехода из начального состояния в конечное равна квадрату модуля амплитуды вероятности:

$$\mathsf{P} = |\langle\text{конечное состояние}|\text{начальное состояние}\rangle|^2. \tag{6.4}$$

6.1.4 Изображение физических величин эрмитовыми операторами

Выражение (6.2) для среднего значения спина можно записать, принимая во внимание равенства (6.3), следующим образом:

$$\mathsf{s}_z^{\text{ср}} = \frac{\hbar}{2}\mathsf{p}_+ + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)\mathsf{p}_- = \frac{\hbar}{2}|\langle \mathsf{z}_+|\mathsf{d}_+\rangle|^2 - \frac{\hbar}{2}|\langle \mathsf{z}_-|\mathsf{d}_+\rangle|^2 =$$

$$\frac{\hbar}{2}\langle \mathsf{d}_+|\mathsf{z}_+\rangle\langle \mathsf{z}_+|\mathsf{d}_+\rangle - \frac{\hbar}{2}\langle \mathsf{d}_+|\mathsf{z}_-\rangle\langle \mathsf{z}_-|\mathsf{d}_+\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle \mathsf{d}_+|(|\mathsf{z}_+\rangle\langle \mathsf{z}_+| - |\mathsf{z}_-\rangle\langle \mathsf{z}_-|)|\mathsf{d}_+\rangle.$$

И, окончательно, $\mathsf{s}_z^{\text{ср}} = \langle \mathsf{d}_+|\hat{\mathsf{s}}_z|)\mathsf{d}_+\rangle$, где

$$\hat{\mathsf{s}}_z = \frac{\hbar}{2}(|\mathsf{z}_+\rangle\langle \mathsf{z}_+| - |\mathsf{z}_-\rangle\langle \mathsf{z}_-|) = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z.$$

Здесь $\hat{\mathsf{s}}_z$ — эрмитов оператор с собственными значениями $\hbar/2$ и $-\hbar/2$, которым соответствуют собственные векторы $|\mathsf{z}_+\rangle$ и $|\mathsf{z}_-\rangle$.

Таким образом, **в эрмитовом операторе $\hat{\mathsf{s}}_z$ сошлись воедино все существенные характеристики той физической величины, которую мы называем проекцией спина на ось** $\mathrm{O}z$.

Принимая во внимание равенство (5.23), введём по аналогии эрмитов оператор проекции спина $\hat{\mathsf{s}}_d$ на произвольное направление $|\mathsf{d}_+\rangle$:

$$\hat{\mathsf{s}}_d = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_d = \frac{\hbar}{2}(|\mathsf{d}_+\rangle\langle \mathsf{d}_+| - |\mathsf{d}_-\rangle\langle \mathsf{d}_-|) = \frac{\hbar}{2}(n\hat{\sigma}_{\mathsf{x}} + m\hat{\sigma}_{\mathsf{y}} + l\hat{\sigma}_{\mathsf{z}}).$$

Обратите внимание, операторы $\hat{\mathsf{s}}_d$ и $\hat{\sigma}_d$ называются одинаково, потому что они различаются всего лишь коэффициентом пропорциональности $\hbar/2$, который можно «спрятать» выбором единиц измерения. В таком случае и вправду нет смысла вводить новый термин. Например, расстояние может быть 6371 км или 6371000 м, но эти разные числа имеют одно и то же название, а именно, это средний радиус Земли.

Оказывается, что **любые физические величины в квантовой механике изображаются эрмитовыми операторами, причём**

— действительные собственные значения эрмитового оператора являются теми значениями, которые может принимать физическая величина,

— собственные векторы эрмитового оператора указывают на те состояния, в которых физическая величина имеет определённые значения.

6.1.5 Формулы для операторов спина

Здесь приводятся основные формулы с минимальными комментариями относительно того, как они получаются. Исходим из полученной выше формулы:

$$\hat{\mathsf{s}}_d = \frac{\hbar}{2}(n\hat{\sigma}_x + m\hat{\sigma}_y + l\hat{\sigma}_z). \tag{6.5}$$

Здесь $n = \sin\theta\cos\varphi$, $m = \sin\theta\sin\varphi$, $l = \cos\theta$ — направляющие косинусы, задающие направление $|\mathsf{d}_+\rangle$, причём $n^2 + m^2 + l^2 = 1$, и, согласно формулам (5.25), (5.26) и (5.24)

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}_x &= |\mathsf{z}_+\rangle\langle\mathsf{z}_-| + |\mathsf{z}_-\rangle\langle\mathsf{z}_+|,\\
\hat{\sigma}_y &= -i|\mathsf{z}_+\rangle\langle\mathsf{z}_-| + i|\mathsf{z}_-\rangle\langle\mathsf{z}_+|,\\
\hat{\sigma}_z &= |\mathsf{z}_+\rangle\langle\mathsf{z}_+| - |\mathsf{z}_-\rangle\langle\mathsf{z}_-|.
\end{aligned}$$

Матрицы операторов $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$ в z-представлении, когда в качестве ортонормированного базиса приняты векторы $|\mathsf{z}_+\rangle$ и $|\mathsf{z}_-\rangle$, совпадают с соответствующими σ-матрицами Паули, поэтому алгебраические свойства операторов подобны алгебраическим свойствам σ-матриц Паули (см. формулы (4.22), (4.24), (4.25) и (4.26)).

Формулы для операторов проекций спина на координатные оси таковы:

$$\hat{\mathsf{s}}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x, \quad \hat{\mathsf{s}}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y, \quad \hat{\mathsf{s}}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z.$$

Тогда из формул, аналогичным равенствам (4.22), следует:

$$\hat{\mathsf{s}}_x^2 = \frac{\hbar^2}{4}\hat{\mathsf{E}}, \quad \hat{\mathsf{s}}_y^2 = \frac{\hbar^2}{4}\hat{\mathsf{E}}, \quad \hat{\mathsf{s}}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}\hat{\mathsf{E}}.$$

И, вообще, принимая во внимание антикоммутацию $\hat{\sigma}$ -операторов и равенство $n^2 + m^2 + l^2 = 1$, из формулы (6.5) получим:

$$\hat{\mathsf{s}}_d^2 = \frac{\hbar^2}{4}(n^2\hat{\sigma}_{\mathsf{x}}^2 + m^2\hat{\sigma}_{\mathsf{y}}^2 + l^2\hat{\sigma}_{\mathsf{z}}^2) = \frac{\hbar^2}{4}\hat{\mathsf{E}}.$$

Оператор квадрата спина принимает следующий вид:

$$\hat{\mathsf{s}}^2 = \hat{\mathsf{s}}_x^2 + \hat{\mathsf{s}}_y^2 + \hat{\mathsf{s}}_z^2 = 3\frac{\hbar^2}{4}\hat{\mathsf{E}}. \tag{6.6}$$

Формулы, подобные формулам (4.24), таковы:

$$\hat{\mathsf{s}}_x \cdot \hat{\mathsf{s}}_y = \frac{\hbar}{2}i\hat{\mathsf{s}}_z, \quad \hat{\mathsf{s}}_y \cdot \hat{\mathsf{s}}_z = \frac{\hbar}{2}i\hat{\mathsf{s}}_x, \quad \hat{\mathsf{s}}_z \cdot \hat{\mathsf{s}}_x = \frac{\hbar}{2}i\hat{\mathsf{s}}_y.$$

Операторы проекций спина на координатные оси антикоммутируют (аналогия с равенствами (4.25)):

$$\hat{\mathsf{s}}_x \cdot \hat{\mathsf{s}}_y = -\hat{\mathsf{s}}_y \cdot \hat{\mathsf{s}}_x,$$
$$\hat{\mathsf{s}}_y \cdot \hat{\mathsf{s}}_z = -\hat{\mathsf{s}}_z \cdot \hat{\mathsf{s}}_y,$$
$$\hat{\mathsf{s}}_z \cdot \hat{\mathsf{s}}_x = -\hat{\mathsf{s}}_x \cdot \hat{\mathsf{s}}_z.$$

Коммутационные соотношения для операторов проекций спина аналогичны равенствам (4.26):

$$\hat{\mathsf{s}}_x \cdot \hat{\mathsf{s}}_y - \hat{\mathsf{s}}_y \cdot \hat{\mathsf{s}}_x = i\hbar\hat{\mathsf{s}}_z,$$
$$\hat{\mathsf{s}}_y \cdot \hat{\mathsf{s}}_z - \hat{\mathsf{s}}_z \cdot \hat{\mathsf{s}}_y = i\hbar\hat{\mathsf{s}}_x,$$
$$\hat{\mathsf{s}}_z \cdot \hat{\mathsf{s}}_x - \hat{\mathsf{s}}_x \cdot \hat{\mathsf{s}}_z = i\hbar\hat{\mathsf{s}}_y.$$

6.2 Среднее значение физической величины и необходимость нормировки векторов состояний

Пусть некоторая физическая величина $\mathcal{Q}$ изображается эрмитовым оператором

$$\hat{\mathsf{Q}} = q_1|\mathsf{q}_1\rangle\langle\mathsf{q}_1| + q_2|\mathsf{q}_2\rangle\langle\mathsf{q}_2|,$$

здесь q_1 и q_2 — значения, которые принимает физическая величина, а $|\mathsf{q}_1\rangle$ и $|\mathsf{q}_2\rangle$ — соответствующие им собственные векторы оператора $\hat{\mathsf{Q}}$, которые составляют полный ортонормированный базис в пространстве состояний.

Пусть квантово-механическая система находится в состоянии $|\mathsf{b}\rangle$. В процессе измерения система окажется с некоторой вероятностью P_1 в состоянии $|\mathsf{q}_1\rangle$ и, следовательно, величина $\mathcal{Q}$ примет значение q_1, и с вероятностью P_2 окажется в состоянии $|\mathsf{q}_2\rangle$, при этом величина $\mathcal{Q}$ примет значение q_2. Согласно соотношению (6.4) $\mathsf{P}_1 = |\langle\mathsf{q}_1|\mathsf{b}\rangle|^2$, а $\mathsf{P}_2 = |\langle\mathsf{q}_2|\mathsf{b}\rangle|^2$.

Тогда

$$\mathcal{Q}_{\text{ср}} = q_1\mathsf{P}_1 + q_2\mathsf{P}_2 = q_1|\langle\mathsf{q}_1|\mathsf{b}\rangle|^2 + q_2|\langle\mathsf{q}_2|\mathsf{b}\rangle|^2 =$$
$$q_1\langle\mathsf{b}|\mathsf{q}_1\rangle\langle\mathsf{q}_1|\mathsf{b}\rangle + q_2\langle\mathsf{b}|\mathsf{q}_2\rangle\langle\mathsf{q}_2|\mathsf{b}\rangle = \langle\mathsf{b}|(q_1|\mathsf{q}_1\rangle\langle\mathsf{q}_1| + q_2|\mathsf{q}_2\rangle\langle\mathsf{q}_2|)|\mathsf{b}\rangle.$$

Отсюда окончательно получаем, что среднее значение физической величины $\mathcal{Q}$, при условии, что квантово-механическая система находится в состоянии $|\mathsf{b}\rangle$, определяется простой формулой:

$$\mathcal{Q}_{\text{ср}} = \langle\mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{b}\rangle. \tag{6.7}$$

Наконец, то, что физическая величина $\mathcal{Q}$ при измерении принимает одно из допустимых значений q_1 или q_2, — событие достоверное, вероятность которого согласно теории вероятностей должна быть равна единице:

$$\mathsf{P}_1 + \mathsf{P}_2 = |\langle\mathsf{q}_1|\mathsf{b}\rangle|^2 + |\langle\mathsf{q}_2|\mathsf{b}\rangle|^2 = \langle\mathsf{b}|\mathsf{q}_1\rangle\langle\mathsf{q}_1|\mathsf{b}\rangle + \langle\mathsf{b}|\mathsf{q}_2\rangle\langle\mathsf{q}_2|\mathsf{b}\rangle =$$
$$\langle\mathsf{b}|(|\mathsf{q}_1\rangle\langle\mathsf{q}_1| + |\mathsf{q}_2\rangle\langle\mathsf{q}_2|)|\mathsf{b}\rangle = \langle\mathsf{b}|\hat{\mathsf{E}}|\mathsf{b}\rangle = \langle\mathsf{b}|\mathsf{b}\rangle = 1.$$

Или, что то же самое,

$$\langle\mathsf{b}|\mathsf{b}\rangle = \sum_{k=1}^{2} |\langle\mathsf{q}_k|\mathsf{b}\rangle|^2 = \sum_{k=1}^{2} |b_k|^2 = 1.$$

здесь $b_k = \langle\mathsf{q}_k|\mathsf{b}\rangle$ — коэффициенты разложения вектора $|\mathsf{b}\rangle$ по базису $|\mathsf{q}_1\rangle$, $|\mathsf{q}_2\rangle$.

Это значит, что при **вычислении всевозможных вероятностей и средних значений физических величин векторы состояний должны быть нормированы на единицу**.

В процессе решения конкретных задач векторы состояний получаются, как правило, ненормированными, и поэтому их нормируют. А именно, если ненулевой вектор $|\mathsf{b}\rangle$ не нормирован, т. е. $\langle\mathsf{b}|\mathsf{b}\rangle = \beta^2 \neq 1$, то вектор $\frac{1}{\beta}|\mathsf{b}\rangle$, наоборот, нормирован на единицу.

6.3 Одновременная измеримость двух физических величин

6.3.1 Условие одновременной измеримости

Нам известно, что физическая величина изображается некоторым эрмитовым оператором, и что она может принимать с некоторыми вероятностями те или иные значения. И лишь в тех состояниях, которые описываются собственными векторами оператора физической величины, физическая величина принимает некоторые вполне определённые значения.

В связи с этим возникает вопрос, при каком условии две физические величины принимают определённые значения и, следовательно, одновременно измеримы?

Докажем утверждение.

Две физические величины одновременно измеримы тогда и только тогда, когда операторы этих физических величин коммутируют.

Пусть величины $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ одновременно измеримы, т. е. существует некоторое состояние $|\mathsf{x}\rangle$, в котором эти величины имеют некоторые определённые значения a и b соответственно. Т. е. имеют место равенства: $\hat{\mathsf{A}}|\mathsf{x}\rangle = a|\mathsf{x}\rangle$ и $\hat{\mathsf{B}}|\mathsf{x}\rangle = b|\mathsf{x}\rangle$.

Тогда, принимая во внимание линейность операторов, получаем:

$$\hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}}|\mathsf{x}\rangle = \hat{\mathsf{A}}b|\mathsf{x}\rangle = b\hat{\mathsf{A}}|\mathsf{x}\rangle = ba|\mathsf{x}\rangle = ab|\mathsf{x}\rangle = a\hat{\mathsf{B}}|\mathsf{x}\rangle = \hat{\mathsf{B}}a|\mathsf{x}\rangle = \hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{A}}|\mathsf{x}\rangle.$$

Отсюда следует, что операторы коммутируют: $\hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}} = \hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{A}}$.

Наоборот, пусть теперь операторы коммутируют.

Запишем равенство $\hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}} - \hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{A}} = \hat{\mathsf{O}}$, например, в $\mathcal{A}$-представлении, когда оператор $\hat{\mathsf{A}}$ диагонален:

$$\begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 0 & a_1b_{12} - b_{12}a_2 \\ a_2b_{21} - b_{21}a_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

При $a_1 \neq a_2$ необходимо дополнительно потребовать, чтобы $b_{12} = b_{21} = 0$. Это значит, матрица оператора $\hat{\mathsf{B}}$ оказывается диагональной одновременно с матрицей оператора $\hat{\mathsf{A}}$. И тогда собственные векторы оператора $\hat{\mathsf{B}}$ совпадают с собственными векторами оператора $\hat{\mathsf{A}}$. В состояниях, описываемых этими собственными векторами, обе физические величины имеют некоторые определённые значения, т. е. одновременно измеримы.

Если $a_1 = a_2 = a$, то оператор $\hat{\mathsf{A}}$ имеет следующий вид: $\hat{\mathsf{A}} = a\hat{\mathsf{E}}$. Нормированные на единицу собственные векторы $|\mathsf{b}_1\rangle$ и $|\mathsf{b}_2\rangle$ эрмитового оператора $\hat{\mathsf{B}}$ составляют полный ортонормированный базис в пространстве состояний, поэтому согласно равенству (5.13) имеем: $\hat{\mathsf{E}} = |\mathsf{b}_1\rangle\langle\mathsf{b}_1| + |\mathsf{b}_2\rangle\langle\mathsf{b}_2|$. Тогда $\hat{\mathsf{A}} = a(|\mathsf{b}_1\rangle\langle\mathsf{b}_1| + |\mathsf{b}_2\rangle\langle\mathsf{b}_2|)$. И теперь очевидно, что собственные векторы эрмитового оператора $\hat{\mathsf{B}}$ являются также и собственными векторами оператора $\hat{\mathsf{A}}$. Следовательно, и в случае $a_1 = a_2 = a$ обе физические величины одновременно измеримы.

6.3.2 Следствия для спина 1/2

Особенности квантово-механической системы со спином $1/2$ **таковы, что:**

— одновременно измерить проекции спина хотя бы на две координатные оси невозможно, поскольку $\hat{\mathsf{s}}_x$, $\hat{\mathsf{s}}_y$, $\hat{\mathsf{s}}_z$ не коммутируют между собой,

— одновременно могут быть измерены лишь две величины: квадрат спина и проекция спина на любое направление, потому что $\hat{\mathsf{s}}^2$ и $\hat{\mathsf{s}}_d$ коммутируют.

6.4 Неизменность значений наблюдаемых величин при унитарных преобразованиях

В конце предыдущей главы описаны унитарные преобразования, переход от одного представления к другому и важные для физики свойства унитарных операторов (см. п. п. 5.9.2).

Как известно, переход от одного представления к другому, осуществляемый унитарными преобразованиями, аналогичен замене системы координат. Таким образом, мы сами выбираем тот или иной способ описания реальности.

Естественно, что **физическая реальность не зависит от нашего произвола, следовательно, при унитарных преобразованиях картина реальности меняться не должна**.

Следовательно, то, что наблюдается, можно вычислять в любом представлении, и результат будет одинаков.

Наблюдаемые величины таковы:

1. Множества значений, которые принимают физические величины.

2. Вероятности переходов квантово-механической системы из одного состояния $|\mathsf{d}\rangle$ в другое $|\mathsf{b}\rangle$, т. е. выражения типа $\mathsf{P} = |\langle \mathsf{b}|\mathsf{d}\rangle|^2$.

3. Среднее значение физической величины $\mathcal{Q}$ в каком-либо состоянии $|\mathsf{b}\rangle$: $\mathcal{Q}_{\text{ср}} = \langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{b}\rangle$.

Наконец, имеются математические свойства, которые не проявляются непосредственно в физической реальности, в экспериментах, но, тем не менее, они сохраняются при унитарных преобразованиях, например, амплитуды вероятностей переходов $\langle \mathsf{b}|\mathsf{d}\rangle$.

Ещё пример: собственные векторы эрмитовых операторов, изображающих физические величины, в любых представлениях составляют ортонормированную систему векторов (или они могут быть сделаны такими).

Глава 7

Дальнейшие обобщения

7.1 Единообразие квантово-механического формализма

Вся квантовая механика, если иметь в виду её формальную сторону, строится единообразно, причём основные её черты проявляются уже в случае спина $1/2$**.** — Это не должно удивлять. В классической механике ситуация аналогичная.

Например, при движении вдоль прямой, т. е. в случае одной степени свободы, уравнение движения записывается согласно второму закону Ньютона:

$$m \cdot a = F.$$

При движении на плоскости, т. е. в случае двух степеней свободы уравнения движения таковы:

$$\begin{aligned} m \cdot a_x &= F_x, \\ m \cdot a_y &= F_y. \end{aligned}$$

При движении в пространстве, где есть уже три степени свободы, уравнения движения принимают вид:

$$\begin{aligned} m \cdot a_x &= F_x, \\ m \cdot a_y &= F_y, \\ m \cdot a_z &= F_z. \end{aligned}$$

Более того, при аналитическом изложении классической механики все степени свободы описываются единообразно, и не важно, сколько степеней свободы имеется у классической системы, одна или целых сто.

Аналогично оказывается, что **можно взять за образец систему со спином** $1/2$ **и распространить её свойства на более сложные ситуации**. Но при этом к уже известным нам особенностям описания квантово-механической реальности добавляются некоторые существенные детали.

Теперь рассмотрим очень кратко, что конкретно добавляется.

7.2 Обобщение на произвольный случай дискретного спектра

Для начала рассмотрим обобщение на тот случай, когда физическая величина принимает не два значения, как при спине $1/2$, а любое конечное число значений большее двух, $n > 2$.

Если в случае спина 1/2 размерность пространства состояний была равна двум, то теперь она равна $n > 2$, и столько же векторов будет в ортонормированном базисе, если отсутствует вырождение (о вырождении см. ниже).

Поэтому там, где какой-то индекс изменялся от 1 до 2, аналогичный индекс будет изменяться от 1 до n. А именно:

— условия ортонормированности и полноты базиса пространства состояний принимают вид (сравните с (5.2) и (5.13)):

$$\langle \mathsf{e}_i | \mathsf{e}_j \rangle = \langle \mathsf{e}_j | \mathsf{e}_i \rangle = \delta_{ij}, \qquad i, j = 1, 2, \ldots, n. \tag{7.1}$$

$$\hat{\mathsf{E}} = | = |\mathsf{e}_1\rangle\langle \mathsf{e}_1| + |\mathsf{e}_2\rangle\langle \mathsf{e}_2| + \ldots + |\mathsf{e}_n\rangle\langle \mathsf{e}_n| = \sum_{i=1}^{n} |\mathsf{e}_i\rangle\langle \mathsf{e}_i|.$$

— любой вектор $|\mathsf{v}\rangle$ пространства состояний может быть представлен в виде линейной комбинации векторов полного ортонормированного базиса:

$$|\mathsf{v}\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i |\mathsf{e}_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle \mathsf{e}_i | \mathsf{v} \rangle |\mathsf{e}_i\rangle.$$

— условие нормировки вектора состояния на единицу имеет вид:

$$\langle \mathsf{v} | \mathsf{v} \rangle = \sum_{i=1}^{n} |v_i|^2 = \sum_{i=1}^{n} |\langle \mathsf{e}_i | \mathsf{v} \rangle|^2 = 1,$$

причём квадрат нормы любого вектора является неотрицательной величиной:

$$\langle \mathsf{v} | \mathsf{v} \rangle \geq 0. \tag{7.2}$$

Итак, практически всё, если иметь в виду формальную сторону, дословно переносится из случая $n = 2$ на случай $n > 2$.

Теперь несколько слов о вырождении.

Может оказаться, что у характеристического уравнения эрмитового оператора, изображающего физическую величину, какой-то корень получится кратным. Тогда этому собственному значению соответствует не один, а несколько собственных векторов; их в точности столько, какова кратность корня.

Эту ситуацию можно представить несколько иначе: каждому из упомянутых собственных векторов соответствует своё собственное значение, пренебрежимо мало отличающееся от других собственных значений. Поэтому образно можно сказать, что близкие собственные значения «слиплись» в одно значение.

Вырождение — не математический казус. Совпадающие, «слипшиеся» собственные значения при дополнительных воздействиях на квантово-механическую систему могут стать различными, что проявляется в эксперименте. Иначе говоря, при определённых условиях вырождение может сниматься.

Собственные векторы, соответствующие одному и тому же собственному значению, в процессе решения уравнений получаются, как правило, и не нормированными, и не ортогональными; их можно сделать и нормированными, и ортогональными. В линейной алгебре изучается приём ортогонализации таких векторов.

Если физическая величина принимает бесконечное счётное число значений, то размерность пространства состояний тоже становится бесконечной и с формальной точки зрения вроде бы ничего не меняется, лишь верхний предел в суммах оказывается бесконечным (∞).

Но тогда во весь рост встают проблемы сходимости.

В частности требуется, чтобы любой вектор состояния $|\mathsf{v}\rangle$ можно было нормировать на единицу, а для этого **норма вектора состояния должна быть конечной**, или, иначе, должно выполняться равенство:

$$\langle \mathsf{v}|\mathsf{v}\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |v_i|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle \mathsf{e}_i|\mathsf{v}\rangle|^2 < \infty. \tag{7.3}$$

7.3 Соотношение неопределённости

7.3.1 Что такое коммутатор

Коммутатором $[\mathsf{A},\mathsf{B}]$ двух операторов $\hat{\mathsf{A}}$ и $\hat{\mathsf{B}}$ называется оператор, вычисляемый согласно формуле:

$$[\mathsf{A},\mathsf{B}] = \hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}} - \hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{A}}.$$

Если $\hat{\mathsf{A}}$ и $\hat{\mathsf{B}}$ эрмитовы, то коммутатор $[\mathsf{A},\mathsf{B}]$ является т. н. **антиэрмитовым оператором**, поскольку удовлетворяет условию:

$$[\mathsf{A},\mathsf{B}]^\dagger = (\hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}} - \hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{A}})^\dagger = \hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{A}} - \hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}} = -[\mathsf{A},\mathsf{B}].$$

Зато оператор $\hat{\mathsf{K}}$

$$[\mathsf{A},\mathsf{B}] = i\hat{\mathsf{K}} \tag{7.4}$$

является эрмитовым:

$$\hat{\mathsf{K}}^\dagger = (-i[\mathsf{A},\mathsf{B}])^\dagger = (-i)^\dagger([\mathsf{A},\mathsf{B}])^\dagger = i(-[\mathsf{A},\mathsf{B}]) = \hat{\mathsf{K}}.$$

7.3.2 Вывод соотношения неопределённости

В классической механике физические величины изображаются числами, которые всегда коммутируют. **В квантовой механике физические величины изображаются операторами, которые коммутируют не всегда, что позволяет отобразить существенные особенности квантовой реальности, например, соотношение неопределённости, являющееся для квантовой механики основополагающим.** Приступим к его выводу.

Пусть некоторая величина $\mathcal{A}$ принимает ряд значений $a_1, a_2, \ldots, a_n$. Её среднее значение вычисляется по формуле:

$$\overline{a} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} a_i.$$

Отклонение отдельного измерения от среднего значения равно: $\Delta a = a - \overline{a}$. Соответствующий оператор имеет вид: $\widehat{\Delta\mathsf{A}} = \hat{\mathsf{A}} - \overline{a}\hat{\mathsf{E}}$, здесь $\hat{\mathsf{E}}$ — тождественный оператор, который, действуя на любой вектор состояния, оставляет его неизменным. Тогда величине $(\Delta a)^2$ сопоставляется эрмитовый оператор $(\widehat{\Delta\mathsf{A}})^2$.

В качестве меры разброса результатов измерения возьмём, как это принято в статистике, среднеквадратичное отклонение результатов отдельных измерений от среднего значения:

$$\sqrt{\overline{(\Delta a)^2}} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(a_i - \overline{a})^2}.$$

Пусть теперь квантово-механическая система находится в состоянии $|\mathsf{x}\rangle$. Тогда согласно общей формуле вычисления средних значений можно записать:

$$\overline{(\Delta a)^2} = \langle \mathsf{x}|(\widehat{\Delta \mathsf{A}})^2|\mathsf{x}\rangle = \alpha. \tag{7.5}$$

Аналогично для некоторой другой величины $\mathcal{B}$:

$$\overline{(\Delta b)^2} = \langle \mathsf{x}|(\widehat{\Delta \mathsf{B}})^2|\mathsf{x}\rangle = \beta. \tag{7.6}$$

Введём теперь вспомогательный вектор $|\mathsf{v}\rangle = (\eta\widehat{\Delta \mathsf{A}} - i\widehat{\Delta \mathsf{B}})|\mathsf{x}\rangle$, здесь η — некоторое действительное число. Принимая во внимание эрмитовость операторов $\widehat{\Delta \mathsf{A}}$ и $\widehat{\Delta \mathsf{B}}$, можно записать эрмитово сопряжённый вектор: $\langle \mathsf{v}| = \langle \mathsf{x}|(\eta\widehat{\Delta \mathsf{A}} + i\widehat{\Delta \mathsf{B}})$.

Согласно равенству (7.2) квадрат нормы любого вектора неотрицателен:

$$\mathcal{N}^2 = \langle \mathsf{v}|\mathsf{v}\rangle = \langle \mathsf{x}|(\eta\widehat{\Delta \mathsf{A}} + i\widehat{\Delta \mathsf{B}})(\eta\widehat{\Delta \mathsf{A}} - i\widehat{\Delta \mathsf{B}})|\mathsf{x}\rangle \geq 0.$$

Отсюда

$$\mathcal{N}^2 = \eta^2\langle \mathsf{x}|(\widehat{\Delta \mathsf{A}})^2|\mathsf{x}\rangle - i\eta\langle \mathsf{x}|(\widehat{\Delta \mathsf{A}}\widehat{\Delta \mathsf{B}} - \widehat{\Delta \mathsf{B}}\widehat{\Delta \mathsf{A}})|\mathsf{x}\rangle + \langle \mathsf{x}|(\widehat{\Delta \mathsf{B}})^2|\mathsf{x}\rangle \geq 0.$$

Принимая во внимание $\widehat{\Delta \mathsf{A}} = \hat{\mathsf{A}} - \overline{a}\hat{\mathsf{E}}$ и $\widehat{\Delta \mathsf{B}} = \hat{\mathsf{B}} - \overline{b}\hat{\mathsf{E}}$, в результате элементарных вычислений убеждаемся, что $\widehat{\Delta \mathsf{A}}\widehat{\Delta \mathsf{B}} - \widehat{\Delta \mathsf{B}}\widehat{\Delta \mathsf{A}} = \hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}} - \hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{A}}$.

Тогда с учётом формулы (7.4) можно записать:

$$\widehat{\Delta \mathsf{A}}\widehat{\Delta \mathsf{B}} - \widehat{\Delta \mathsf{B}}\widehat{\Delta \mathsf{A}} = [\mathsf{A}, \mathsf{B}] = i\hat{\mathsf{K}},$$

а второе слагаемое в выражении для $\mathcal{N}^2$ примет следующий вид:

$$-i\eta\langle \mathsf{x}|(\widehat{\Delta \mathsf{A}}\widehat{\Delta \mathsf{B}} - \widehat{\Delta \mathsf{B}}\widehat{\Delta \mathsf{A}})|\mathsf{x}\rangle = -i\eta\langle \mathsf{x}|(i\hat{\mathsf{K}})|\mathsf{x}\rangle = \eta\langle \mathsf{x}|(\hat{\mathsf{K}})|\mathsf{x}\rangle = \eta k,$$

здесь k — среднее значение величины, изображаемой эрмитовым оператором $\hat{\mathsf{K}}$.

Принимая во внимание равенства (7.5) и (7.6), неравенство для квадрата нормы можно представить в следующем виде:

$$\mathcal{N}^2 = \eta^2\alpha + \eta k + \beta \geq 0.$$

Выделяем полный квадрат:

$$\mathcal{N}^2 = \alpha\left(\eta + \frac{k}{2\alpha}\right)^2 + \beta - \frac{k^2}{4\alpha} \geq 0.$$

Минимальное значение скобки, которая возводится в квадрат, равно нулю. Поэтому из того, что $\mathcal{N}^2 \geq 0$ следует, что $\beta - \frac{k^2}{4\alpha} \geq 0$. Отсюда $\sqrt{\alpha}\cdot\sqrt{\beta} \geq \frac{k}{2}$.

Введём обозначения: $\Delta\mathcal{A} = \sqrt{\alpha}$, $\Delta\mathcal{B} = \sqrt{\beta}$, здесь $\Delta\mathcal{A}$ и $\Delta\mathcal{B}$ являются среднеквадратичными отклонениями от средних значений для величин $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ соответственно.

И тогда **соотношение неопределённости** принимает следующий вид:

$$\Delta\mathcal{A}\cdot\Delta\mathcal{B} \geq \frac{k}{2}. \tag{7.7}$$

Оказывается, что соотношение неопределённости справедливо также и в случае бесконечного дискретного спектра, и в случае непрерывного спектра. Доказательство аналогично.

7.3.3 Некоторые следствия из соотношения неопределённости

$\Delta\mathcal{A}$ и $\Delta\mathcal{B}$ из левой части неравенства (7.7) являются мерой разброса результатов измерения величин $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$. Если $\hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}} \neq \hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{A}}$ и, следовательно, $k \neq 0$, то $\Delta\mathcal{A}$ и $\Delta\mathcal{B}$ не могут быть одновременно сколь угодно малыми. Это означает, что **соотношение неопределённости ставит предел точности для одновременных измерений двух физических величин, изображаемых некоммутирующими операторами**.

Если в каком-то состоянии квантово-механической системы две физические величины $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$ всё же допускают сколь угодно точные измерения, т. е. они могут одновременно иметь вполне определённые значения, то $\Delta\mathcal{A}$ и $\Delta\mathcal{B}$ в неравенстве (7.7) равны нулю, следовательно, $k = 0$, а значит и $\hat{\mathsf{K}} = \hat{0}$. Отсюда следует, что $\hat{\mathsf{A}}\hat{\mathsf{B}} = \hat{\mathsf{B}}\hat{\mathsf{A}}$.

Итак, **если две величины одновременно измеримы со сколь угодно большой точностью, то изображающие их операторы коммутируют, и, наоборот, если не измеримы, то не коммутируют**. Этот результат для частного случая был получен выше в п. п. 6.3.

Оказывается, что операторы координат $\hat{\mathsf{x}}$, $\hat{\mathsf{y}}$, $\hat{\mathsf{z}}$ и операторы соответствующих импульсов $\hat{\mathsf{p}}_x$, $\hat{\mathsf{p}}_y$, $\hat{\mathsf{p}}_z$ микрочастицы удовлетворяет коммутационным соотношениям:

$$[\hat{\mathsf{x}}, \hat{\mathsf{p}}_x] = i\hbar, \qquad [\hat{\mathsf{y}}, \hat{\mathsf{p}}_y] = i\hbar, \qquad [\hat{\mathsf{z}}, \hat{\mathsf{p}}_z] = i\hbar.$$

Сравнивая это равенство с равенством (7.4), получаем: $\hat{\mathsf{K}} = \hbar$, поэтому k, среднее значение величины, изображаемой оператором $\hat{\mathsf{K}}$, равно $\hbar$.

И окончательно:

$$\Delta\mathcal{X} \cdot \Delta\mathcal{P}_x \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad \Delta\mathcal{Y} \cdot \Delta\mathcal{P}_y \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad \Delta\mathcal{Z} \cdot \Delta\mathcal{P}_z \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Впервые соотношение неопределённости в такой форме было сформулировано Вернером Гейзенбергом в 1927 году. Эти неравенства указывают на принципиальную невозможность одновременного измерения координат и соответствующих им импульсов со сколь угодно большой точностью, что означает отсутствие у микрочастиц траекторий, трактуемых в классическом смысле.

Приведённая постоянная Планка, $\hbar = 1,054572 \cdot 10^{-27}$ эрг·с имеет такую же размерность, что и действие — фундаментальная физическая величина, определяющая поведение физической системы в классическом смысле через принцип наименьшего действия и в квантовом смысле через феймановские интегралы по траекториям. Кроме того, момент импульса тоже имеет такую же размерность.

Поэтому если в условиях конкретной задачи действие или момент импульса окажутся значительно больше $\hbar$, так что величиной $\hbar$ можно пренебречь, применима классическая механика, поскольку в таком случае операторы физических величин можно считать коммутирующими, т. е. обычными числами.

В частности, электроны, обращающиеся на значительном удалении от атомного ядра, являются, по своей сути, классическими частицами, поскольку обладают моментом импульса, значительно превосходящим значение $\hbar$.

7.4 Обобщение на случай непрерывного спектра

Случай непрерывного спектра формально отличается от случая дискретного бесконечного спектра тем, что **бесконечное суммирование заменяется интегрированием**.

Например, когда индекс i из выражения (7.3) принимает непрерывный спектр значений, b_i является не числовой последовательностью, а функцией. Обозначим аргумент этой функции, как обычно, через x, и после замены суммирования интегрированием, получим:

$$\langle \mathsf{b}|\mathsf{b}\rangle = \int |b(x)|^2\, dx < \infty.$$

Теперь слегка изменим обозначение для символа Кронекера: вместо δ_{ij} будем писать δ_{j-i}, но суть оставим той же самой. А именно, $\delta_{j-i} = 1$ когда $j - i = 0$, и $\delta_{j-i} = 0$ в случае, когда $j - i \neq 0$.

Тогда выражение

$$b_i = \sum_{j=1}^{n} b_j \delta_{j-i}, \qquad j = 1, 2, \ldots, n,$$

обобщённое на случай непрерывного спектра, принимает следующий вид:

$$b(x') = \int b(x)\delta(x - x')\, dx. \tag{7.8}$$

По аналогии с $\delta-$символом Кронекера естественно принять, что $\delta(x - x') = 0$, если $x - x' \neq 0$. Тогда соответствующая интегральная сумма сведётся к единственному слагаемому в окрестности $x' = x$:

$$b(x') \approx b(x)\Big|_{x=x'} \;\delta \cdot \Delta x.$$

Отсюда понятно, что в пределе, при $\Delta x \to 0$, δ должна стремиться к бесконечности так, чтобы произведение $\delta \cdot \Delta x$ стремилось к единице, т. е. должно выполняться равенство:

$$\delta(x - x') = \begin{cases} +\infty & \text{при} \;\; x = x', \\ \;\;0 & \text{при} \;\; x \neq x'. \end{cases} \tag{7.9}$$

Функция, удовлетворяющая равенствам (7.8) и (7.9), называется **δ-функцией Дирака**.

Итак, δ-функция Дирака является аналогом символа Кронекера.

Поэтому записав условие ортонормированности базисных векторов не через символ Кронекера, а через δ-функцию Дирака,

$$\langle \mathsf{e}_x|\mathsf{e}'_x\rangle = \delta(x - x'),$$

можно обобщить формализм векторов состояний на случай непрерывного спектра.

Следует отметить, что дельта–функция обладает свойствами, которые исключают возможность её изучения средствами классического математического анализа. Поэтому сначала математики высказывали резкие критические замечания в адрес дираковской формулировки квантовой механики.

Благодаря трудам ленинградских математиков Н. М. Гюнтера, С. Л. Соболева, а также французского математика Л. Шварца математическое сообщество признало теорию обобщённых функций. Оказывается, δ-функция является типичной обобщённой функцией.

Теперь запишем некоторые формулы для векторов состояний, обращаясь к δ-функции.

Условие полноты, т. е. аналог формулы (5.13), принимает следующий вид:

$$\hat{\mathsf{E}} = \mathsf{I} = \int |\mathsf{e}_x\rangle\langle \mathsf{e}_x|\, dx. \tag{7.10}$$

Теперь, умножив это равенство справа на $|\mathsf{v}\rangle$, получим разложение этого вектора по базисным векторам (аналог соотношения (5.7)):

$$|\mathsf{v}\rangle = \hat{\mathsf{E}}|\mathsf{v}\rangle = \int |\mathsf{e}_x\rangle\langle\mathsf{e}_x|\mathsf{v}\rangle\, dx = \int v(x)|\mathsf{e}_x\rangle\, dx.$$

т. е. вектор $|\mathsf{v}\rangle$ складывается из базисных векторов, взятых с разными весами $v(x) = \langle\mathsf{e}_x|\mathsf{v}\rangle$:

$$\langle\mathsf{e}_x|\mathsf{v}\rangle = \int v(x')\langle\mathsf{e}_x|\mathsf{e}_{x'}\rangle\, dx' = \int v(x')\delta(x - x')\, dx' = v(x).$$

Это равенство является аналогом равенства (5.6).

Теперь запишем разложение вектора $|\mathsf{w}\rangle$ по базисным векторам в следующем виде:

$$|\mathsf{w}\rangle = \int w(x)|\mathsf{e}_x\rangle\, dx.$$

Отсюда следует:

$$\langle\mathsf{w}| = \int w^*(x)\langle\mathsf{e}_x|\, dx.$$

$$\langle\mathsf{w}|\mathsf{v}\rangle = \int w^*(x)\left(\int v(x')\langle\mathsf{e}_x|\mathsf{e}_{x'}\rangle\, dx'\right) dx = \int w^*(x)\left(\int v(x')\delta(x - x')\, dx'\right) dx.$$

В результате получаем аналог формулы (5.5) для скалярного произведения двух векторов:

$$\langle\mathsf{w}|\mathsf{v}\rangle = \int w^*(x)v(x)\, dx. \tag{7.11}$$

7.5 Волновые функции

7.5.1 Случай дискретного спектра

Мы уже встречались с волновыми функциями: спиноры (см. п. 4.8) являются типичными волновыми функциями, которые при дальнейшем развитии теории приводят к спинорному исчислению. Но, оказывается, есть ещё одна возможность описания квантово-механической реальности, основанная на волновых функциях.

Далее в качестве примера и образца будем рассматривать простейший двумерный случай.

Будем исходить из того, что:

• каждому вектору двумерного пространства состояний $|\mathsf{d}\rangle = d_1|\mathsf{e}_1\rangle + d_2|\mathsf{e}_2\rangle$ (здесь $|\mathsf{e}_1\rangle$, $|\mathsf{e}_2\rangle$ — некоторый полный ортонормированный базис в этом пространстве) соответствует волновая функция d, которая представляет собой два упорядоченных комплексных числа $\mathrm{d} = \mathrm{d}(d_1, d_2)$, здесь $d_1 = \langle\mathsf{e}_1|\mathsf{d}\rangle$ и $d_2 = \langle\mathsf{e}_2|\mathsf{d}\rangle$,

• для любых двух волновых функций $\mathrm{d} = \mathrm{d}(d_1, d_2)$ и $\mathrm{b} = \mathrm{b}(b_1, b_2)$ определено скалярное произведение:

$$\langle\mathrm{b}|\mathrm{d}\rangle = b_1^*d_1 + b_2^*d_2 = \sum_{i=1}^{2} b_i^*d_i. \tag{7.12}$$

А если интерпретировать скобку как скалярное произведение не волновых функций, а векторов состояний, то получается точно такой же результат:

$\langle \mathrm{b}|\mathrm{d}\rangle = (b_1^*\langle \mathsf{e}_1| + b_2^*\langle \mathsf{e}_2|)(d_1|\mathsf{e}_1\rangle + d_2|\mathsf{e}_2\rangle) = b_1^* d_1 + b_2^* d_2$,

• векторам полного ортонормированного базиса $|\mathsf{e}_1\rangle$ и $|\mathsf{e}_2\rangle$, также, как и любым другим векторам, соответствуют некоторые волновые функции, обозначаемые как ξ_1 и ξ_2. Они тоже составляют полный ортонормированный базис: $\langle \xi_i|\xi_j\rangle = \delta_{ij}, \qquad i,j = 1,2$, поэтому любую волновую функцию d можно представить в виде линейной комбинации базисных функций:

$$\mathrm{d} = d_1\xi_1 + d_2\xi_2 = \sum_{i=1}^{2} d_i\xi_i.$$

Отсюда понятно, что формулы для волновых функций совпадают с точностью до обозначений с соответствующими формулами для векторов состояний.

А теперь только для волновых функций введём дополнительное правило.

Любой линейный оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ действует на волновую функцию, стоящую справа, действие оператора на волновую функцию, стоящую слева не определено. При символической записи формул будем убирать у операторов правую перегородку, чтобы было видно, на какие именно волновые функции они действуют.

Рассмотрим переход от записи формул для векторов состояний в формализме Дирака (слева от стрелки) к записи формул для волновых функций (справа от стрелки):

$$\begin{aligned}
&\langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{d}\rangle \longrightarrow \langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}\mathsf{d}\rangle,\\
&\langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{d}\rangle = (\langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}|)^{\dagger\dagger}|\mathsf{d}\rangle = (|\hat{\mathsf{Q}}^\dagger|\mathsf{b}\rangle)^\dagger|\mathsf{d}\rangle \longrightarrow |\hat{\mathsf{Q}}^\dagger\mathsf{b}\rangle^\dagger|\mathsf{d}\rangle = \langle \hat{\mathsf{Q}}^\dagger\mathsf{b}|\mathsf{d}\rangle.
\end{aligned}$$

Отсюда следует, что $\langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}\mathsf{d}\rangle = \langle \hat{\mathsf{Q}}^\dagger\mathsf{b}|\mathsf{d}\rangle$,

Итак, **при пересечении черты, разделяющей левую и правую часть скалярного произведения, оператор заменяется на эрмитово сопряжённый**.

А если, кроме того, оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ является эрмитовым, т. е. $\hat{\mathsf{Q}}^\dagger = \hat{\mathsf{Q}}$, то

$$\langle \mathsf{b}|\hat{\mathsf{Q}}\mathsf{d}\rangle = \langle \hat{\mathsf{Q}}\mathsf{b}|\mathsf{d}\rangle. \tag{7.13}$$

Нетрудно сделать соответствующие обобщения на случай дискретного конечного спектра любой размерности или на случай дискретного бесконечного спектра, но при этом следует признать, что от введения волновых функций вместо векторов состояний какой-либо выгоды нет.

Наоборот, волновые функции оказываются особенно удобными в случае непрерывного спектра, потому что они оказываются комплексными функциями, а не просто упорядоченным набором комплексных чисел. При этом всё сказанное выше дословно обобщается на случай непрерывного спектра, к рассмотрению которого мы приступаем.

7.5.2 Случай непрерывного спектра

Волновые функции в двумерном случае представляют собой два числа, $\mathsf{d} = \mathsf{d}(d_1, d_2)$, в случае бесконечного дискретного спектра они являются бесконечным рядом чисел: $\mathsf{d} = \mathsf{d}(d_1, d_2, \cdots, d_n, \cdots)$. Наконец, когда спектр непрерывный, $\mathsf{d} = \mathsf{d}_x$, индекс x принимает любые действительные значения. Поэтому в привычных обозначениях это обычная функция $d(x)$ комплексного переменного.

Тогда в скалярном произведении двух волновых функций вместо суммирования (см. формулу (7.12)), появляется интегрирование точно так же, как в формуле (7.11):

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \int \varphi^*(x)\psi(x)\,dx. \tag{7.14}$$

В частности, функции ортонормированного базиса $\xi_q(x)$ удовлетворяют условию нормировки на δ-функцию:

$$\langle \xi_{q'}(x)|\xi_q(x)\rangle = \int \xi^*_{q'}(x)\xi_q(x)\,dx = \delta(q-q').$$

Допустим, что ортонормированный базис является полным, тогда любую волновую функцию $\psi(x)$ можно представить в виде линейной комбинации базисных функций:

$$\psi(x) = \int p(q)\xi_q(x)\,dq, \tag{7.15}$$

здесь $p(q)$ — коэффициенты разложения волновой функции по выбранному базису; $p(q) = \langle \xi_q(x)|\psi(x)\rangle$, т. к.

$$\langle \xi_q(x)|\psi(x)\rangle = \int p(q')\langle \xi_q(x)|\xi_{q'}(x)\rangle\,dq' = \int p(q')\delta(q-q')\,dq' = p(q).$$

В интегралах появились штрихи при q, что несущественно, поскольку переменную интегрирования можно обозначать любой буквой.

Обратите внимание на то, что **символическая запись позволяет представлять формулы более экономно**, потому что интеграл по x оказывается «спрятанным» в скалярном произведении.

Комплексно сопрягая выражение для $\psi(x)$, получим:

$$\psi^*(x) = \int p^*(q')\xi^*_{q'}(x)\,dq'. \tag{7.16}$$

Пусть теперь имеется некоторый линейный эрмитов оператор $\hat{\mathsf{Q}}$, действующий в пространстве волновых функций, согласно которому некоторой произвольной волновой функции ψ ставится в соответствие другая функция $\hat{\mathsf{Q}}\psi$.

Запишем $\hat{\mathsf{Q}}\psi$ в собственном базисе оператора $\hat{\mathsf{Q}}$. Иначе говоря, будем считать, что базисные функции $\xi_q(x)$ являются собственными функциями эрмитового оператора $\hat{\mathsf{Q}}$, т. е. выполняется равенство: $\hat{\mathsf{Q}}\xi_q(x) = q\xi_q(x)$. Тогда в силу линейности оператора и равенства (7.15) имеем:

$$\hat{\mathsf{Q}}\psi = \int p(q)\hat{\mathsf{Q}}\xi_q(x)\,dq = \int q\,p(q)\xi_q(x)\,dq.$$

Отсюда, а также принимая во внимание равенство (7.16), вычислим скалярное произведение согласно формуле (7.14):

$$\langle\psi|\hat{\mathsf{Q}}\psi\rangle = \int \left(\int p^*(q')\xi^*_{q'}(x)\,dq'\right)\left(\int q\,p(q)\xi_q(x)\,dq\right)\,dx =$$

$$\int p^*(q')\,dq'\int q\,p(q)\left(\int \xi^*_{q'}(x)\xi_q(x)\,dx\right)dq =$$

$$\int p^*(q')\,dq'\int q\,p(q)\delta(q'-q)\,dq = \int q'p^*(q')p(q')\,dq',$$

Опуская в последнем интеграле штрихи, окончательно получаем:

$$\langle\psi|\hat{\mathsf{Q}}\psi\rangle = \int qp^*(q)p(q)\,dq.$$

В случае спина 1/2 среднее значение физической величины $\mathcal{Q}$ задаётся формулой (6.7). Потребуем, чтобы и сейчас среднее значение величины $\mathcal{Q}$ в состоянии, описываемом волновой функцией ψ, задавалось аналогичной формулой:

$$\mathcal{Q}_{\text{ср}} = \langle\psi|\hat{\mathsf{Q}}\psi\rangle = \int qp^*(q)p(q)\,dq = \int q|p(q)|^2\,dq. \tag{7.17}$$

Из теории вероятности известно, что это выражение и в самом деле является средним значением величины $\mathcal{Q}$ при условии, что $|p(q)|^2\,dq$ — вероятность того, что величина $\mathcal{Q}$ принимает некоторое значение в пределах от q до $q + dq$.

Но тогда вероятность того, что величина $\mathcal{Q}$ примет любое допустимое значение, равна единице, как вероятность достоверного события:

$$\int |p(q)|^2\,dq = 1.$$

Пусть $\hat{\mathsf{Q}} = \hat{\mathsf{E}}$, здесь $\hat{\mathsf{E}}$ — единичный оператор, оставляющий любую волновую функцию неизменной, тогда $q = 1$, и равенство (7.17) принимает следующий вид:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int |p(q)|^2\,dq.$$

Из двух последних равенств следует, что формула (7.17) для $\mathcal{Q}_{\text{ср}}$ даст правильные результаты при условии, что волновая функция нормирована на единицу: $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

Если в ходе решения конкретных задач волновая функция ψ получается ненормированной, т. е. $\langle\psi|\psi\rangle \neq 1$, её следует нормировать, а именно, разделить на $\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$.

Теперь представим равенство $\varphi = \hat{\mathsf{Q}}\psi$ в матричном виде. Воспользуемся линейностью оператора и разложением по базисным функциям (7.15):

$$\langle\xi_{q'}|\varphi\rangle = \langle\xi_{q'}|\hat{\mathsf{Q}}\psi\rangle = \int p(q)\langle\xi_{q'}|\hat{\mathsf{Q}}\xi_q\rangle\,dq.$$

Тогда

$$f(q') = \int \hat{\mathsf{Q}}_{q'q}p(q)\,dq, \tag{7.18}$$

здесь $f(q') = \langle\xi_{q'}|\varphi\rangle$ — коэффициенты разложения функции φ по базисным функциям $\xi_q(x)$, а $Q_{q'q}$ — матричные элементы оператора $\hat{\mathsf{Q}}$ в этом же базисе:

$$Q_{q'q} = \langle\xi_{q'}|\hat{\mathsf{Q}}\xi_q\rangle = \int \xi^*_{q'}(x)\hat{\mathsf{Q}}\xi_q(x)\,dx.$$

Равенство (7.18) можно интерпретировать так: $\mathsf{f} = \mathsf{Q}\mathsf{p}$, т. е. матрица Q умножается на вектор–столбец $\mathsf{p}(q)$, а в результате получается вектор–столбец $\mathsf{f}(q')$, при этом все индексы меняются непрерывно.

Рассмотрим теперь унитарное преобразование, порождённое линейным унитарным оператором $\hat{\mathsf{U}}$. Тогда волновые функции ψ и φ преобразуются согласно формулам: $\psi' = \hat{\mathsf{U}}\psi$ и $\varphi' = \hat{\mathsf{U}}\varphi$, а любой линейный оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ преобразуется по формуле (5.30), а именно: $\hat{\mathsf{Q}}' = \hat{\mathsf{U}}\hat{\mathsf{Q}}\hat{\mathsf{U}}^\dagger$.

Поскольку при пересечении перегородки оператор становится эрмитово сопряжённым, получаем:

$$\langle\varphi'|\hat{\mathsf{Q}}'\psi'\rangle = \langle\hat{\mathsf{U}}\varphi|\hat{\mathsf{U}}\hat{\mathsf{Q}}\hat{\mathsf{U}}^\dagger\cdot\hat{\mathsf{U}}\psi\rangle = \langle\hat{\mathsf{U}}^\dagger\cdot\hat{\mathsf{U}}\varphi|\hat{\mathsf{Q}}\hat{\mathsf{U}}^\dagger\cdot\hat{\mathsf{U}}\psi\rangle = \langle\hat{\mathsf{E}}\varphi|\hat{\mathsf{Q}}\hat{\mathsf{E}}\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{\mathsf{Q}}\psi\rangle.$$

При $\hat{\mathsf{Q}} = \hat{\mathsf{E}}$:

$$\langle \varphi' | \psi' \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle. \tag{7.19}$$

Т. е. любое скалярное произведение двух волновых функций, а также выражение вида $\langle \varphi | \hat{\mathsf{Q}} \psi \rangle$, в том числе выражение для среднего значения физической величины, при унитарном преобразовании остаётся неизменным.

Примем пассивную интерпретацию унитарного преобразования, изображаемого оператором $\hat{\mathsf{U}}$. Это значит, что волновые функции и операторы как таковые полагаются неизменными; унитарное преобразование меняет лишь их представления в разных базисах. Иными словами, выражения вида $\langle \varphi | \hat{\mathsf{Q}} \psi \rangle$ и в частности выражения (7.17) и (7.19) можно вычислять в любом представлении.

Однако при выводе формул мы исходили из $\hat{\mathsf{Q}}$-представления, т. е. считали, что эрмитов оператор $\hat{\mathsf{Q}}$ диагонален, а базисные функции $\xi_q(x)$ являются его собственными функциями. Теперь понятно, что это требование, если иметь в виду результаты, а не его вывод, является избыточным и необязательным.

Поэтому можно считать, что в общем случае базисные функции $\xi_q(x)$ не являются собственными функциями оператора $\hat{\mathsf{Q}}$. Единственное, что требуется от базиса — он должен быть ортонормированным и полным; полнота базиса означает, что любая волновая функция может быть представлена в виде некоторой линейной комбинации базисных функций.

Наконец, символическое выражение (7.13), а именно, $\langle \varphi | \hat{\mathsf{Q}} \psi \rangle = \langle \hat{\mathsf{Q}} \varphi | \psi \rangle$, где $\hat{\mathsf{Q}}$ — эрмитов оператор, в развёрнутой форме принимает вид:

$$\int \varphi^*(x) \hat{\mathsf{Q}} \psi(x)\, dx = \int \psi(x) \hat{\mathsf{Q}}^* \varphi^*(x)\, dx,$$

здесь $\hat{\mathsf{Q}}^*$ — оператор, комплексно сопряжённый оператору $\hat{\mathsf{Q}}$. Он удовлетворяет условию: $(\hat{\mathsf{Q}}\varphi)^* = \hat{\mathsf{Q}}^* \varphi^*$.

В самом деле:

$$\int \varphi^*(x) \hat{\mathsf{Q}} \psi(x)\, dx = \int (\hat{\mathsf{Q}} \varphi(x))^* \cdot \psi(x)\, dx = \int (\hat{\mathsf{Q}}^* \varphi^*(x)) \cdot \psi(x)\, dx =$$

$$\int \psi(x) \hat{\mathsf{Q}}^* \varphi^*(x)\, dx.$$

Итак, символические обозначения для волновых функций, полученные при модификации формализма Дирака, оказались в случае непрерывного спектра экономными и удобными.

7.6 Оператор и матрица плотности

Оператором плотности называется оператор $\hat{\mathsf{D}} = |\mathsf{d}\rangle\langle\mathsf{d}|$, при условии, что вектор состояния $|\mathsf{d}\rangle$ нормирован на единицу, $\langle \mathsf{d} | \mathsf{d} \rangle = 1$.

Далее показано, что операторы плотности, точно так же как векторы состояний, пригодны для полноценного описания квантово-механических систем.

Оператор плотности удовлетворяет условию $\hat{\mathsf{D}}^2 = \hat{\mathsf{D}}$:

$$\hat{\mathsf{D}}^2 = (|\mathsf{d}\rangle\langle\mathsf{d}|)^2 = |\mathsf{d}\rangle\langle\mathsf{d}|\mathsf{d}\rangle\langle\mathsf{d}| = |\mathsf{d}\rangle \cdot 1 \cdot \langle\mathsf{d}| = \hat{\mathsf{D}}.$$

В отличие от векторов состояний, которые определены с точностью до произвольного комплексного множителя с единичным модулем, операторы плотности не обладают аналогичным произволом, т. к. если $|\mathsf{d}'\rangle = e^{i\varphi}|\mathsf{d}\rangle$, то $\langle \mathsf{d}'| = e^{-i\varphi}\langle\mathsf{d}|$ и $\hat{\mathsf{D}}' = \hat{\mathsf{D}}$.

Теперь, чтобы наглядно проиллюстрировать вычисления, снова вернёмся к двумерному случаю.

Матричные элементы оператора плотности в некотором полном ортонормированном базисе $|\mathsf{e}_1\rangle$, $|\mathsf{e}_2\rangle$ таковы:

$$D_{ij} = \langle \mathsf{e}_i|\hat{\mathsf{D}}|\mathsf{e}_j\rangle = \langle \mathsf{e}_i|\mathsf{d}\rangle\langle \mathsf{d}|\mathsf{e}_j\rangle = d_i d_j^*, \quad i,j = 1,2. \tag{7.20}$$

Естественно, что соответствующая матрица $\mathsf{D} = \mathsf{d}\mathsf{d}^\dagger$ называется матрицей плотности.

Кстати, для системы со спином 1/2, поляризованной в направлении вектора $|\mathsf{d}\rangle$ с направляющими косинусами $n = \sin\theta\cos\varphi$, $m = \sin\theta\sin\varphi$, $l = \cos\theta$, матрица плотности, иначе называемая также матрицей проектирования, в σ_z-представлении имеет, согласно равенству (4.28), следующий вид:

$$\mathsf{d}\mathsf{d}^\dagger = \frac{1}{2}[\mathsf{E} + (\sin\theta\cos\varphi)\sigma_x + (\sin\theta\sin\varphi)\sigma_y + (\cos\theta)\sigma_z].$$

Введём определение.

Следом квадратной матрицы называется сумма её диагональных элементов. Обозначается: Sp от немецкого Spur — след. Иногда применяется обозначение Tr, происходящее от английского Trace — след.

Вычислим $Sp\mathsf{D}$ в принятом базисе:

$$\begin{aligned}&Sp\mathsf{D} = D_{11} + D_{22} = \langle \mathsf{e}_1|\mathsf{d}\rangle\langle \mathsf{d}|\mathsf{e}_1\rangle + \langle \mathsf{e}_2|\mathsf{d}\rangle\langle \mathsf{d}|\mathsf{e}_2\rangle = \\ &\langle \mathsf{d}|\mathsf{e}_1\rangle\langle \mathsf{e}_1|\mathsf{d}\rangle + \langle \mathsf{d}|\mathsf{e}_2\rangle\langle \mathsf{e}_2|\mathsf{d}\rangle = \langle \mathsf{d}|(|\mathsf{e}_1\rangle\langle \mathsf{e}_1| + |\mathsf{e}_2\rangle\langle \mathsf{e}_2|)|\mathsf{d}\rangle = \langle \mathsf{d}|\mathsf{d}\rangle = 1.\end{aligned}$$

Итак, **равенство $Sp\mathsf{D} = 1$ эквивалентно условию нормировки вектора состояния $|\mathsf{d}\rangle$ на единицу: $\langle \mathsf{d}|\mathsf{d}\rangle = 1$.**

Выразим теперь среднее значение $\mathcal{Q}_{\text{ср}} = \langle \mathsf{d}|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{d}\rangle$ физической величины $\mathcal{Q}$ при условии, что квантово-механическая система находится в состоянии $|\mathsf{d}\rangle$.

Воспользуемся условием полноты ортонормированного базиса:

$$\mathcal{Q}_{\text{ср}} = \langle \mathsf{d}|(|\mathsf{e}_1\rangle\langle \mathsf{e}_1| + |\mathsf{e}_2\rangle\langle \mathsf{e}_2|)\hat{\mathsf{Q}}(|\mathsf{e}_1\rangle\langle \mathsf{e}_1| + |\mathsf{e}_2\rangle\langle \mathsf{e}_2|)|\mathsf{d}\rangle.$$

В этой сумме $2 \cdot 2 = 4$ слагаемых, которые, принимая во внимание равенство (7.20), можно записать в следующем виде:

$$\langle \mathsf{d}|\mathsf{e}_j\rangle\langle \mathsf{e}_j|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{e}_i\rangle\langle \mathsf{e}_i|\mathsf{d}\rangle = \langle \mathsf{e}_j|\hat{\mathsf{Q}}|\mathsf{e}_i\rangle\langle \mathsf{e}_i|\mathsf{d}\rangle\langle \mathsf{d}|\mathsf{e}_j\rangle = Q_{ji}D_{ij} = D_{ij}Q_{ji}, \quad i,j = 1,2.$$

Поэтому

$$\mathcal{Q}_{\text{ср}} = \sum_{i,j=1}^{2} Q_{ij}D_{ji} = \sum_{i=1}^{2}\left(\sum_{j=1}^{2} Q_{ij}D_{ji}\right) = \sum_{i=1}^{2}(QD)_{ii} = Sp(\mathsf{QD}).$$

Аналогично $\mathcal{Q}_{\text{ср}} = Sp(\mathsf{DQ})$.

Окончательная формула для среднего значения физической величины $\mathcal{Q}$ при условии, что квантово-механическая система находится в состоянии, описываемом матрицей плотности D, принимает следующий вид:

$$\mathcal{Q}_{\text{ср}} = Sp(\mathsf{QD}) = Sp(\mathsf{DQ}).$$

В частности, для некоторого оператора плотности $\hat{\mathsf{B}} = |\mathsf{b}\rangle\langle \mathsf{b}|$ среднее значение вычисляется по формуле $\mathcal{B}_{\text{ср}} = \langle \mathsf{d}|\hat{\mathsf{B}}|\mathsf{d}\rangle = Sp(\mathsf{BD}) = Sp(\mathsf{DB})$.

С другой стороны, $\mathcal{B}_{\text{ср}} = \langle \mathsf{d}|\hat{\mathsf{B}}|\mathsf{d}\rangle = \langle \mathsf{d}|\mathsf{b}\rangle\langle \mathsf{b}|\mathsf{d}\rangle = |\langle \mathsf{b}|\mathsf{d}\rangle|^2 = \mathsf{P}$, здесь P — вероятность перехода из состояния $|\mathsf{d}\rangle$ в состояние $|\mathsf{b}\rangle$. Отсюда

$$\mathsf{P} = Sp(\mathsf{BD}) = Sp(\mathsf{DB}).$$

Итак, матрица плотности позволяет вычислять вероятности переходов из одного состояния в другое и средние значения физических величин. Поэтому матрицы плотности, также как и векторы состояний, пригодны для полноценного описания квантово-механических систем.

Оказывается, **возможности применения матриц плотности даже шире, чем у векторов состояния: матрицы плотности применимы для описания статистических ансамблей, состоящих из квантово-механических систем**.