# Семинар 2

## 2.1 Постулаты квантовой теории.

Квантовая теория является математической моделью современного представления о физических свойствах окружающего мира и физических систем из которых он состоит.

Описание произвольной физической системы опирается на понятие **состояния**. В классической теории состояние определяется заданием всех координат и скоростей составных частей системы в определенный момент времени. Однако неспособность классической теории дать адекватное описание микросистем (атомы, молекулы, ядра, "элементарные"частицы) привела к необходимости пересмотра понятия **состояние**. В квантовой теории состояние определяется не полным набором численных значений координат и скоростей, а меньшим числом данных иной природы.

В основе аксиаматической квантовой теории лежат следующие утверждения или постулаты:

- постулат состояния;
- принцип суперпозиции состояний;
- постулат соответствия оператор – физическая величина;
- постулат об измерении;
- постулат об эволюции состояний.

Содержание данных постулатов и формирует квантово-механическое описание мира.

**1. Постулат состояния:**

**Квантовое состояние** (или **состояние**). – это полный набор данных (физических величин), определяющих свойства системы.

Какие именно данные определяют состояние зависит от конкретной системы. В квантовой теории заложен рецепт определения такого набора данных. Однако детально этот рецепт становится очевиден после формулировки всех принципов квантовой теории:

**2. Принцип суперпозиции состояний**.

Принцип суперпозиции квантовых состояний утверждает, что между состояниями существуют особые соотношения, которые проявляются весьма "экзотическим"способом. А именно, если система находится в определенном состоянии, то можно, одновременно, считать, что она находится отчасти в двух или нескольких других состояниях, или в **суперпозиции** состояний.

Суперпозиция квантовых состояний не имеет аналога в классической теории и является утверждением, которое формулирует принцип на основе специально разработанного математического аппарата и схемы его применения. Схема является физической теорией, если устанавливаются законы, связывающие математический аппарат с физически наблюдаемыми процессами и явлениями. Именно эти законы и определяют квантовую теорию в целом.

Построение схемы квантовой теории основано на введении математических соотношений, определяющих принцип суперпозиции. По смыслу, суперпозиция состояний оперирует с величинами, которые можно "складывать", получая величины того же рода. Так как состояние

— совокупный набор данных, то, можно предположить, что состояние есть объект типа "вектора". В квантовой теории "вектор состояния" или просто вектор обозначается символом $|\ \ \rangle$. Если какой-то набор данных, определяющих систему, обозначить буквой $a$, то вектор состояния будет иметь вид $|a\rangle$. Векторы иных состояний или наборов данных могут быть обозначены $|b\rangle$, $|n\rangle$, $|\psi\rangle$, $|a, b, c \dots\rangle$ и т.д.

Допускается, что введенные векторы можно умножать на комплексное число $c\,|a\rangle$ и складывать между собой, образуя новые векторы, например:

$$|c\rangle = c_1\,|a\rangle + c_2\,|b\rangle\,, \tag{2.1}$$

где $c_1$ и $c_2$ — комплексные числа. Или в общем случае:

$$|y\rangle = \sum_{n=1}^{k} c_n\,|x_n\rangle\,, \tag{2.2}$$

где $c_n$ — комплексные числа.

Если вектор $|a, d, x \dots\rangle$ зависит от параметра $x$, то в силу возможности сложения векторов можно проинтегрировать вектор по $x$ и получить новый вектор:

$$|y\rangle = \int |a, d, x \dots\rangle\ dx. \tag{2.3}$$

Если происходит суперпозиция двух или большего числа состояний, то порядок в котором выполняется суперпозиция состояний несущественен. Кроме того, если коэффициенты суперпозиции не равны нулю, то соотношение суперпозиции между всеми состояниями симметрично. Так в (2.1) вектор состояния $|a\rangle$ может быть образован суперпозицией векторов состояний $|c\rangle$ и $|b\rangle$. Аналогично вектор состояния $|b\rangle$ может быть образован суперпозицией векторов состояний $|a\rangle$ и $|c\rangle$.

Квантовая теория вводит очень важное предположение о том, что состояние определяется лишь "направлением" вектора, а не его "величиной". Таким образом суперпозиция состояния с самим собой приводит к появлению нового состояния, то есть:

$$c_1\,|a\rangle + c_2\,|a\rangle = (c_1 + c_2)\,|a\rangle \equiv |a\rangle\,. \tag{2.4}$$

Вектор $(c_1{+}c_2)\,|a\rangle$ соответствует тому же состоянию, что и вектор $|a\rangle$ (если $c_1{+}c_2 \neq 0$). Это означает, что **если вектор состояния умножить на любое не равное нулю комплексное число, то полученный вектор соответствует тому же квантовому состоянию**. Это утверждение определяет коренное различие между понятиями квантовой и классической суперпозиции.

Если равенство (2.1) умножить на комплексное число $\alpha$, то, так как вектор $\alpha\,|c\rangle$ не меняет состояния $|c\rangle$, для определения состояния $|c\rangle$ в (2.1) существенно лишь отношение коэффициентов $c_1$ и $c_2$. Или, другими словами, суперпозиция двух состояний определяется одним комплексным числом или двумя вещественными параметрами.

В использованных выше понятиях вектор состояния является абстрактным математическим символом, не связанным с каким-либо числом. Чтобы иметь возможность оперировать с символами состояний необходимо установить соответствие между абстрактными символами состояния и, в общем случае, комплексными числами.

С этой целью в квантовой теории определяются **два вида векторов состояний**.

Пусть имеется число $\alpha$, которое будем считать соответствующим вектору $|a\rangle$. Число $\alpha$ рассматривается в квантовой теории как "скалярное" произведение вектора $|a\rangle$ на некоторый "новый" вид вектора. Эти "новые" векторы обозначаются символом $\langle \quad |$. Если нужно обозначить этот вектор каким-то набором переменных, например $b$, то используется обозначение $\langle b|$.

Скалярное произведение "нового" вектора $\langle b|$ и определенного ранее вектора состояния $|a\rangle$ обозначается $\langle b\,|a\rangle$. Такому скалярному произведению приписывается свойство комплексного числа. В квантовой теории принята следующая терминология: **векторы вида $|a\rangle$ называются кет-векторами, а вида $\langle b|$ бра-векторами**. Такая терминология введена Дираком и произошла от английского слова bracket (скобка), условным разбиением этого слова на две части $\langle bra|$—бра-вектор, $|ket\rangle$—кет-вектор.

Введенное скалярное произведение должно обеспечить выполнение принципа суперпозиции, то есть быть линейной функцией состояния. Условием того, что скалярное произведение является линейной функцией от $|a\rangle$, есть следующее выражение:

$$\langle b|\left\{c_1\,|a\rangle + c_2\,|a\rangle\right\} = c_1\langle b\,|a\rangle + c_2\langle b\,|a\rangle, \tag{2.5}$$

где $c_1$ и $c_2$ — произвольные комплексные числа.

Бра-вектор определен полностью, если задано его скалярное произведение с любым кет—вектором. Так, например, если скалярное произведение равно нулю, то и сам $\langle bra|$-вектор равен нулю.

**Сумма двух бра-векторов** $\langle b| + \langle c|$ определяется из условия:

$$\left\{\langle b| + \langle c|\right\}|a\rangle \equiv \langle b\,|a\rangle + \langle c\,|a\rangle. \tag{2.6}$$

Произведение бра-вектора на комплексное число $c$ определяется равенством:

$$\left\{c\,\langle b|\right\}|a\rangle \equiv c\langle b\,|a\rangle. \tag{2.7}$$

На основании (2.5), (2.6) ясно, что определенное выше скалярное произведение удовлетворяет дистрибутивному закону умножения, а из (2.5), (2.7) вытекает, что умножение бра- и кет-векторов на число удовлетворяет обычной алгебре чисел.

В квантовой теории вводится специальное предположение о взаимосвязи бра- и кет-векторов. Бра-вектор, соответствующий кет-вектору $|a\rangle$ , обозначается $\langle a|$. Бра-вектор, соответствующий сумме кет-векторов $|a\rangle + |b\rangle$, является суммой бра-векторов $\langle a| + \langle b|$. Бра-вектор, соответствующий кет-вектору $c\,|a\rangle$, равен $c^*\,\langle a|$, здесь $c$ — комплексное число, а $c^*$ — комплексно сопряженное число. В общем виде можно записать

$$\langle a| = (|a\rangle)^\dagger \qquad \text{и} \qquad |a\rangle = (\langle a|)^\dagger\,, \tag{2.8}$$

где $\dagger$ — значок сопряжения (соответствия двух типов векторов). Ниже показано, что этот значок соответствует операции эрмитовского сопряжения.

Взаимно-однозначное соответствие бра- и кет-векторов означает, что любое состояние системы может быть охарактеризовано как "направлением" вектора кет, так и направлением вектора бра. То есть, теория симметрична относительно этих двух видов векторов.

Если даны два вектора $|a\rangle$ и $|b\rangle$, то скалярное произведение из них образуется в виде $\langle b\,|a\rangle$. Число, соответствующее этому скалярному произведению зависит линейно от $|a\rangle$ и антилинейно от $|b\rangle$. Здесь под антилинейностью понимается зависимость при которой число, образованное из $|b\rangle + |b'\rangle$ есть сумма чисел образованных их $|b\rangle$ и $|b'\rangle$ при скалярном произведении с $|a\rangle$; а число образованное из произведения вектора $\alpha\,|b\rangle$ ($\alpha$ −комплексное число) с вектором $|a\rangle$ равно умноженному на $\alpha^*$ числу, образованному из скалярного произведения $|b\rangle$ и $|a\rangle$. Величину, которая линейно зависит от $|a\rangle$ и антилинейно от $|b\rangle$, можно построить, кроме того, взяв комплексно-сопряженную величину от скалярного произведения вектора $|b\rangle$ на бра-вектор, сопряженный $|a\rangle$. В теории квантовых состояний вводится предположение, что эти числа равны:

$$\langle b\,|a\rangle = \langle a\,|b\rangle^*. \tag{2.9}$$

Если выбрать в (2.9) $|b\rangle \equiv |a\rangle$, то видно, что число $\langle a\,|a\rangle$ − вещественно и в случае $\langle a\,|a\rangle \neq 0$ положительно определено:

$$\langle a\,|a\rangle > 0. \tag{2.10}$$

Учитывая "геометрическую" терминологию для рассматриваемых объектов (векторы состояния), можно говорить о пространстве векторов состояний. В рассматриваемом пространстве векторов состояний, векторы $|a\rangle$ и $|b\rangle$ называются **ортогональными**, если

$$\langle a\,|b\rangle = 0. \tag{2.11}$$

**Длина** вектора состояния определяется равенством:

$$\|a\| = \sqrt{\langle a\,|a\rangle}. \tag{2.12}$$

Так как для вектора состояния существенно лишь "направление", то он определен с точностью до произвольного численного множителя. Поэтому можно принять соглашение о единой длине рассматриваемых векторов сотояния, которую удобно выбрать равной единице. Такой выбор длины вектора называется **нормировкой**, а вектор − нормированным. Нормировка вектора состояния не определяет его полностью, так как нормированный вектор все еще можно умножить на комплексное число по модулю равное единице, что не изменит единичной длины вектора, а полученный вектор будет соответствовать тому же состоянию:

$$|a\rangle \equiv e^{i\varphi}\,|a\rangle\,, \qquad \varphi - \mathrm{Re}. \tag{2.13}$$

Определенное выше "пространство" квантовых состояний соответствует известному в математике Гильбертову пространству, а вектор состояния − лучу в Гильбертовом пространстве.

Для справки: **Гильбертово пространство** (стандартно такое пространство обозначается символом $\mathbf{H}$) это:

a) векторное пространство комплексных чисел $\mathbf{C}$. Обозначение вектора (или луча) в $\mathbf{H}$ принято в виде: $|a\rangle$;

б) пространство с определенным скалярным произведением $\langle a | b \rangle$, удовлетворяющим следующим свойствам:

   – положительная определенность – $\langle a | a \rangle > 0.$,
   – линейность – $\langle a | c_1 b + c_2 c \rangle = c_1 \langle a | b \rangle + c_2 \langle a | c \rangle$, где $c_1$ и $c_2$ – комплексные числа,
   – эрмитовское сопряжение – $\langle a | b \rangle = \langle b | a \rangle^*$;

в) пространство нормированое по норме $\|a\| = \sqrt{\langle a | a \rangle}$.

Пусть каждому кет-вектору квантового состояния $|x\rangle$ соответствует некоторый кет-вектор $|y\rangle$. В этом случае можно сказать, что вектор $|y\rangle$ является функцией $F$ вектора $|x\rangle$. Чтобы выполнялся принцип суперпозиции состояний эта функция должна быть линейной. Перевод состояния $|x\rangle$ в состояние $|y\rangle$ можно рассматривать как действие линейного опрератора $\hat{F}$ ("шляпка" над буквой отличает символ оператора). Символически операция преобразования вектора $|x\rangle$ в вектор $|y\rangle$ обозначается соотношением:

$$|y\rangle = \hat{F} |x\rangle . \tag{2.14}$$

Если для любых векторов $|x\rangle$ выполняется равенство $\hat{F} |x\rangle = \lambda |x\rangle$, где $\lambda$ число, оператор является числом $\hat{F} = \lambda$. Оператор может быть равен нулю, единице и т.п. В соответствии с (2.14), число является частным случаем оператора.

Для линейного оператора $\hat{F}$ выполняется равенство:

$$\hat{F}(c_1 |x_1\rangle + c_2 |x_2\rangle) = c_1 \hat{F} |x_1\rangle + c_2 \hat{F} |x_2\rangle , \tag{2.15}$$

где $c_1$, $c_2$ – произвольные комплексные числа.

Операторы можно складывать (вычитать) по правилу:

$$\left(\hat{F}_1 \pm \hat{F}_2\right) |x\rangle = \hat{F}_1 |x\rangle \pm \hat{F}_2 |x\rangle . \tag{2.16}$$

Два оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ **равны**, если для произвольных состояний $\hat{A} |x\rangle = \hat{B} |x\rangle$. Символически это равенство имеет вид $\hat{A} = \hat{B}$.

**Произведение** двух операторов определяется как результат последовательного действия этих операторов на вектор состояния. Так в произведении $\hat{A} \cdot \hat{B}$ сначала вычисляется действие оператора $\hat{B}$ на вектор состояния $|x\rangle$, а затем действие оператора $\hat{A}$ на вектор $\hat{B} |x\rangle$. Определение произведения двух операторов легко обобщается на случай произведения произвольного числа операторов (последовательное действие операторами справа на лево).

В общем случае $\hat{A} \cdot \hat{B} |x\rangle \neq \hat{B} \cdot \hat{A} |x\rangle$ при произвольных $|x\rangle$, то есть операторы не коммутируют (не переставляются) в произведении. В силу произвольности $|x\rangle$ это соотношение можно записать в операторном виде $\hat{A} \cdot \hat{B} \neq \hat{B} \cdot \hat{A}$.

Чтобы охарактеризовать возможность или правило перестановки операторов в произведении вводится понятие коммутатора двух операторов. **Коммутатор операторов** $\hat{A}$ и $\hat{B}$ обозначается символом $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$ и определяется равенством:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \equiv \hat{A} \cdot \hat{B} - \hat{B} \cdot \hat{A}. \tag{2.17}$$

Если коммутатор двух операторов равен нулю, то такие операторы называются коммутирующими $\hat{A}\cdot\hat{B} = \hat{B}\cdot\hat{A}$. Если коммутатор операторов не равен нулю, то правило перестановки операторов определяется выражением (2.17).

**Целая положительная степень оператора** определяется равенством

$$\hat{A}^n = \underbrace{\hat{A}\cdot\hat{A}\cdot\hat{A}\ldots\hat{A}}_{n}. \tag{2.18}$$

**Обратный оператор** к $\hat{A}$ обозначается как $\hat{A}^{-1}$. Обратный оператор определен только тогда, когда уравнение $\hat{A}\left|x\right\rangle = \left|y\right\rangle$ разрешимо относительно $\left|x\right\rangle$. В этом случае $\left|x\right\rangle = \hat{A}^{-1}\left|y\right\rangle$. По определению:

$$\hat{A}^{-1}\cdot\hat{A} = \hat{A}\cdot\hat{A}^{-1} \equiv 1, \qquad \left[\hat{A},\hat{A}^{-1}\right] = 0. \tag{2.19}$$

**Функция от оператора** определяется по аналогии с разложением функции в ряд Тейлора (если такое разложение возможно):

$$\hat{F}(\hat{A}) \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}F^{(n)}(0)\cdot\hat{A}^{(n)}, \qquad F^{(n)}(0) = \left.\frac{\partial^n F(x)}{\partial x^n}\right|_{x=0}. \tag{2.20}$$

Выше рассмотрено действие операторов на кет-состояния. Для определения смысла действия операторов на бра-состояния рассмотрим скалярное произведение $\left\langle b\right|$ с $\hat{F}\left|a\right\rangle$. Данное произведение, по определению – число линейно зависящее от вектора $\hat{F}\left|a\right\rangle$ и в соответствии с определением бра-вектора может рассматриваться как произведение вектора $\left|a\right\rangle$ на некоторый бра-вектор. Определенный таким образом бра-вектор зависит линейно от $\left\langle b\right|$, так что его можно рассматривать как результат действия некоторого линейного оператора на $\left\langle b\right|$. Этот линейный оператор определяется оператором $\hat{F}$ и его естественно считать тем же самым оператором, действующим на бра-вектор.

Бра-вектор, полученный в результате действия оператора $\hat{F}$ на $\left\langle b\right|$ удобно обозначить в виде: $\left\langle b\right|\hat{F} = \left\langle F^{\dagger}b\right|$, так что уравнение, определяющее вектор $\left\{\left\langle b\right|\hat{F}\right\}$ имеет вид:

$$\left\langle F^{\dagger}b\,\middle|a\right\rangle = \left\langle b\,\middle|\hat{F}a\right\rangle \equiv \left\langle b\middle|\,\hat{F}\,\middle|\,a\right\rangle. \tag{2.21}$$

Оператор, удовлетворяющий условию (2.21) называется самосопряженным или эрмитовским, что символически выражается операторным равенством $A = A^{\dagger}$. Учитывая операцию сопряжения бра – и кет – состояний ясно, что эта операция соответствует операции эрмитовского сопряжения.

Если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – самосопряженные, то и сумма операторов $\hat{A}+\hat{B}$ – также является самосопряженном оператором.

Рассмотрим соотношение (2.21) для произведения самосопряженных операторов. По определению

$$\left\langle b\middle|\,\hat{A}\cdot\hat{B}\,\middle|\,a\right\rangle = \left\langle\hat{A}^{\dagger}b\middle|\,\hat{B}\,\middle|\,a\right\rangle = \left\langle\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}b\,\middle|a\right\rangle = \left\langle(\hat{A}\cdot\hat{B})^{\dagger}b\,\middle|a\right\rangle. \tag{2.22}$$

Таким образом $(\hat{A}\hat{B})^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$. В результате оператор $\hat{R} = \hat{A}\cdot\hat{B}$–самосопряжен, если $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0$. Операторы $\hat{A}\cdot\hat{B}+\hat{B}\cdot\hat{A}$ и $i(\hat{A}\cdot\hat{B}-\hat{B}\cdot\hat{A})$– всегда самосопряжены (доказать самостоятельно).

Помимо скалярного произведения бра- и кет-векторов можно рассмотреть их произведение следующего вида $|a\rangle\langle b|$. Скалярно умножая данное произведение на произвольный вектор $|x\rangle$ справа, получим вектор $|a\rangle$ умноженный на число $\langle b\,|x\rangle$, то есть новый кет-вектор, который линейно зависит от вектора $|x\rangle$. Таким образом, $|a\rangle\langle b|$– есть линейный оператор, который действует на кет-векторы. Умножая $|a\rangle\langle b|$ на бра-вектор $\langle x|$ слева получим бра-вектор $\langle b|$, умноженный на число $\langle x\,|a\rangle$. То есть $|a\rangle\langle b|$– может рассматриваться как оператор, действующий как на бра- так и на кет-состояние, при этом

$$(|a\rangle\langle b|)^{\dagger} = |b\rangle\langle a|\,. \tag{2.23}$$

**3. Постулат соответствия оператор–физическая величина**.

Как отмечалось ранее, направления бра- или кет-векторов соответствуют состояниям физической системы в определенный момент времени. Следующее утверждение квантовой теории состоит в том, что динамическим переменным системы соответствуют линейные самосопряженные операторы (в тот же момент времени).

**Динамическими переменными** называются физические величины, использующиеся при классическом описании системы (координаты, скорости, импульсы, моменты импульсов, энергия, а так же функции от этих величин и т.п.).

Таким образом вводится утверждение:

**динамическая переменная $\Rightarrow$ линейный самосопряженный оператор**

Или другими словами физической величине $F$ ставится в соответствие линейный самосопряженный оператор $\hat{F}$: $F \Rightarrow \hat{F}$.

В квантовой теории имеет большое значение уравнение вида:

$$\hat{F}\,|a\rangle = \alpha\,|a\rangle\,, \tag{2.24}$$

где $\alpha$ число. Если уравнение (2.24) выполняются, то $\alpha$ называется собственным значением оператора $\hat{F}$, а вектор $|a\rangle$ – собственным вектором линейного оператора $\hat{F}$. Соответственно (2.24) уравнение на собственные значения оператора $\hat{F}$.

Решение уравнения вида (2.24) может иметь место при различных значениях $\alpha \in \alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_n\ldots$, (в том числе и образующих дискретный ряд чисел). В этом случае:

$$\hat{F}\,|a_n\rangle = \alpha_n\,|a_n\rangle\,, \tag{2.25}$$

где каждому собственному числу $\alpha_n$ соответствует свой собственный вектор $|a_n\rangle$. Совокупность всех $\alpha_n$ называется **спектром оператора**. В сучае, если одному собственному числу соответствует несколько векторов состояний, спектр называется вырожденным.

$$\hat{F}\,|a_{nk}\rangle = \alpha_n\,|a_{nk}\rangle\,, \quad k \in 1, 2, \ldots f, \tag{2.26}$$

а $f$– называется кратностью вырождения.

Для самосопряженных операторов выполняются следующие утверждения, вытекающие из (2.26), (2.25):

– собственные значения самосопряженного оператора – вещественные числа;

– собственные значения, соответствующие сопряженным бра- и кет-состояниям, совпадают;

– бра-вектор, сопряженный кет-вектору, является собственным бра-вектором, относящимся к тому же собственному значению, что и кет-вектор, и обратно;

– собственные векторы самосопряженного оператора ортонормированы (ортогональны и нормированы). В случае, если спектр оператора дискретный, условие ортонормировки состояний имеет вид:

$$\left\langle a_n \middle| a_m \right\rangle = \delta_{nm}, \tag{2.27}$$

где $\delta_{nm}$– символ Кронекера.

В случае, если спектр непрерывен, уравнение (2.25) имеет следующий вид:

$$\hat{F} \left| x \right\rangle = \alpha \left| x \right\rangle \tag{2.28}$$

то есть уравнение имеет решение при любых значениях $\alpha$ на отрезке $\alpha_{min} \leqslant \alpha \leqslant \alpha_{max}$. Условие ортонормировки состояний в этом случае есть:

$$\left\langle x \middle| x' \right\rangle = \delta(x - x'). \tag{2.29}$$

Здесь $\delta(x)$ –дельта-функция Дирака.

– набор собственных векторов эрмитовского оператора – полный. Условие полноты векторов состояний можно представить в форме:

$$\sum_n \left| n \right\rangle \left\langle n \right| = 1 \quad \text{или} \quad \int \left| x \right\rangle \left\langle x \right| \, dx = 1. \tag{2.30}$$

Динамические переменные, собственные состояния которых образуют полную систему, называются **наблюдаемыми**. Другими словами, свойство системы, которое может быть измерено есть наблюдаемая.

Не всякая динамическая переменная в конкретной физической системе обладает достаточным количеством собственных состояний, чтобы образовать полную систему. Переменные, собственные состояния которых не образуют полной системы, не являются наблюдаемыми и не могут быть измерены.

**4. Постулат об измерении**.

В квантовой теории постулируется, что **результатом измерения динамической переменной (или физической величины) является число, принадлежащее спектру оператора этой физической величины**. Кроме того, **в результате процесса измерения, вектор состояния системы изменяется и становится собственным для оператора этой физической величины**. Таким образом, если до измерения квантовая система определялась вектором состояния $\left| \psi \right\rangle$ и в этой системе проводится измерение величины $F$, которой соответствует самосопряженный оператор $\hat{F}$, то:

a. необходимо определить собственные векторы и собственные числа оператора $\hat{F}$ (например, в случае дискретного невырожденного спектра)

$$\hat{F} \left| n \right\rangle = f_n \left| n \right\rangle, \quad n = 1, 2 \ldots; \tag{2.31}$$

б. результатом измерения может быть только одно из чисел $f_n$;

в. вероятность измерения определенного числа $f_n$ определяется квадратом модуля коэффициента разложения состояния $|\psi\rangle$ по полному набору состояний $|n\rangle$.

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle ; \qquad a_n \equiv \langle n |\psi\rangle, \tag{2.32}$$

$$\text{вероятность}(f_n) = \left|\langle n |\psi\rangle\right|^2 = \langle \psi |n\rangle\langle n |\psi\rangle = \langle\psi| P_n |\psi\rangle, \tag{2.33}$$

здесь $P_n \equiv |n\rangle\langle n|-$ оператор проектирования на состояние $|n\rangle$. Оператор проектирования удовлетворяет очевидным соотношениям:

$$P_n P_m = \delta_{nm} P_n, \quad P_n^\dagger = P_n; \tag{2.34}$$

г. в результате измерения состояние $|\psi\rangle$ переходит (редуцируется) в состояние $|\psi\rangle \Rightarrow |\Phi_n\rangle = |n\rangle$, которое является собственным для оператора $\hat{F}$. Другими словами, любое последующее измерение физической величины $\hat{F}$ в заданной системе будет приводить с вероятностью равной единице к значению величины $f_n$.

Нормированное состояние после измерения $|\Phi_n\rangle$ имеет вид:

$$|\Phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi| P |\psi\rangle}} \cdot P_n |\psi\rangle . \tag{2.35}$$

Как следует из постулата об измерении физической величины процесс измерения в квантовой теории носит вероятностный характер. То есть теория предсказывает лишь вероятность измерения конкретного значения. Многократное повторение измерения в системе предполагает наличие ансамбля систем в состоянии $|\psi\rangle$. В этом случае можно внести понятие среднего значения физической величины, которое будет получено в результате многократных измерений в данном ансамбле состояний. Обозначим среднее значение величины $F$ символом $\langle F\rangle$, тогда по определению теории вероятности на основании (2.33):

$$\langle F\rangle = \sum_n f_n \cdot |\langle n |\psi\rangle|^2 = \sum_n f_n \langle \psi |n\rangle\langle n |\psi\rangle. \tag{2.36}$$

С учетом (2.32),(2.31) данное равенство можно преобразовать следующим образом:

$$\langle F\rangle = \sum_n \langle\psi| \hat{F} |n\rangle\langle n |\psi\rangle = \langle\psi| \hat{F} |\psi\rangle. \tag{2.37}$$

Выражение $\langle\psi| \hat{F} |\psi\rangle$ – определяет правило вычисления среднего значения произвольной физической величины, полученной в результате многократного повторения процесса измерения $F$ в ансамбле состояний $|\psi\rangle$.

Из постулата соответствия оператор–физическая величина и постулата об измерении вытекает теорема "принцип неопределенности для физических величин", которая формулируется следующим образом:

**Теорема** *Если для произвольных линейных эрмитовских операторов* $\hat{F}$ *и* $\hat{M}$ *выполняется равенство*:

$$\left[\hat{F}, \hat{M}\right] = i\hat{K}, \tag{2.38}$$

где $\hat{K}$ – линейный эрмитовский оператор, то для операторов среднеквадратичных отклонений $\Delta\hat{F}^2 = (\hat{F} - < F >)^2$ и $\Delta\hat{M}^2 = (\hat{M} - < M >)^2$ имеет место неравенство:

$$\langle(\Delta\hat{F})^2\rangle\langle(\Delta\hat{M})^2\rangle \geqslant \frac{\langle\hat{K}^2\rangle}{4} \tag{2.39}$$

Содержательная часть данной теоремы состоит в том, что физические величины $F$ и $M$ могут быть измерены точно в одном состоянии, только при условии, если их операторы коммутируют друг с другом.

**5. Эволюция квантовых состояний**

Квантовое состояние реальной физической системы зависит от времени $|\psi(t)\rangle$. Развитие состояния во времени (эволюция) определяется уравнением

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(t)\right\rangle = \hat{H}\ \left|\psi(t)\right\rangle, \tag{2.40}$$

где $\hbar$– постоянная Планка, а $\hat{H}$ – некоторый специальный самосопряженный оператор, который носит название оператор Гамильтона или Гамильтониан системы и определяется как сумма операторов кинетической энергии $T$ и потенциальной функции $U$. $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$. В случае, если потенциальная функция не зависит от времени, $U$ совпадает с потенциальной энергией системы. Явный вид этих операторов устанавливается в теории представлений (см. ниже).

Если, например, состояние $|\psi(t)\rangle$– является собственным состоянием оператора Гамильтона

$$\hat{H}\left|\psi(t, E_n)\right\rangle = E_n\left|\psi(t, E_n)\right\rangle, \tag{2.41}$$

то, как следует из (2.40), зависимость такого состояния от времени определяется выражением:

$$\left|\psi(t, E_n)\right\rangle = \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)\left|E_n\right\rangle, \tag{2.42}$$

здесь $E_n$ – энергия системы, а $|E_n\rangle$-собственный вектор оператора $H$. В квантовой теории состояния типа (2.42) называются стационарными квантовыми состояниями.

Эволюция состояния $|\psi(t)\rangle$ во времени может быть описана на языке оператора эволюции, который связывает состояния в различные моменты времени. Так, если в начальный момент $t = 0$ исходное состояние обозначить $|\psi(0)\rangle$, то состояние в момент времени $t$ определяется выражением:

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \hat{U}(t)\left|\psi(0)\right\rangle, \tag{2.43}$$

где $\hat{U}(t)$- оператор эволюции. Подставляя (2.43) в (2.40) нетрудно получить уравнение для определения оператора эволюции:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U} = \hat{H}\,\hat{U}. \tag{2.44}$$

Очевидно, что если $\hat{H}$ не зависит от времени, то оператор эволюции равен:

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t\right). \tag{2.45}$$

Подводя итог формулировки общих принципов квантовой теории можно еще раз вернуться к понятию состояния квантовой системы. В определении состояния утверждается, что состояние – это полный набор переменных, характеризующих систему. В общем случае этот набор переменных устанавливается как совокупность физических величин, операторы которых коммутируют друг с другом и коммутируют с оператором Гамильтона.

## 2.2 Представление квантовых состояний и операторов

Изложенная выше формальная аксиоматическая схема квантовой теории, построенная в воображаемом гильбертовом пространстве не является физической теорией, так как не позволяет ответить на вопрос о том, как конкретно изложенные принципы связаны с физическими системами и наблюдаемыми, не устанавливает явного вида операторов физических величин и соответствия этих операторов известным математическим операторам. Физическое "оживление" квантовой теории осуществляется на основе так называемой теории представлений. Теория представлений устанавливает связь квантовых состояний с комплексными числами и операторов с математическими операциями над полем комплексных чисел .

Как следует из определения квантовых состояний комплексные числа образуются при скалярном произведении векторов состояний.

Введем следующую терминологию. Будем называть векторы состояний физических величин следующим образом (ниже $x$ –координата, $p$–импульс, $E$–энергия):

$|x\rangle$– состояние с определенным значением координаты,

$|p\rangle$– состояние с определенным значением импульса,

$|E_n\rangle$– состояние с определенным значением энергии,

$|f_n\rangle$– состояние с определенным значением физической величины $F$ и т.д.

В теории представлений вводится понятие: **функция состояния в $F$-представлении** по следующему определению:

$$\Psi_{\text{состояние}}(\text{представление}) \equiv \left\langle \text{представление} \middle| \text{состояние} \right\rangle. \tag{2.46}$$

В соответствии с (2.46), например, следующие скалярные произведения будут именоваться:

$\left\langle x \middle| p \right\rangle$– функция состояния с определенным значением импульса в координатном представлении;

$\left\langle p \middle| x \right\rangle$– функция состояния с определенным значением координаты в импульсном представлении;

$\left\langle x \middle| E_n \right\rangle$– функция состояния с определенным значением энергии в координатном представлении;

$\left\langle f_n \middle| A \right\rangle$– функция состояния с определенным значением физической величины $A$ в $F$-представлении и т.п.

По определению функции некоторого состояния в определенном представлении является комплексным числом или комплексной функцией своих переменных, вычисление которых определяется стандартными, хорошо известными правилами теории функций комплексной переменной. На основании (2.46) и (2.9) видно, в качестве вектора представления состояний может быть вектор, соответствующий произвольной динамической переменной. Более того, по сути имеется полная симметрия между переменными, определяющими состояние и перменными, определяющими представление. По историческим причинам в квантовой теории координатное представление имеет, в определенной степени, преимуществое значение, так как квантовая механика, построенная Шредингером в координатном представлении приводит к хорошо разработанному математическому способу описаная, основаному на решении дифференциальных уравнений. При этом $\Psi_E(x) \equiv \langle x \,|E \rangle$ называется волновой функцией в координатном представлении. Энергетическое представление было использовано Гейзенбергом, приведя к формулировке матричной квантовой механики. По сути можно построить неограниченное число представлений квантовой теории.

Аналогично способу задания соответствия состояний и комплексных функций необходимо ввести правила задания соответствия для операторов, действующих в формальном математическом гильбертовом пространстве, математическим операциям определенным над полем комплексных чисел (функций) в заданном представлении.

Любое преобразование векторов состояний в Гильбертовом пространстве под действием оператора, в общем случае имеет вид:

$$|A\rangle = \hat{S}\,|B\rangle\,, \tag{2.47}$$

где $\hat{S}-$ произвольный оператор. В квантовой теории для физических величин и функций от них используются только линейные самосопряженные (эрмитовские) операторы.

Установим вид соотношения (2.47) в произвольном $F$-представлении. Пусть физической величине $F$ соответствует линейный эрмитовский оператор $\hat{F}$, собственные значения $f_n$ которого, образуют дискретный спектр:

$$\hat{F}\,|n\rangle = f_n\,|n\rangle\,, \quad n = 1, 2 \ldots \tag{2.48}$$

Разложения состояний $|A\rangle$ и $|B\rangle$ из (2.47) по полному набору состояний $|n\rangle$ имеют вид:

$$|A\rangle = \sum_n a_n\,|n\rangle = \sum_n |n\rangle\,\langle n\,|A\rangle \tag{2.49}$$

$$|B\rangle = \sum_n b_n\,|n\rangle = \sum_n |n\rangle\,\langle n\,|B\rangle \tag{2.50}$$

Подставляя (2.49), (2.50) в (2.47) и умножая полученное равенство на $\langle m|$, находим:

$$\langle m\,|A\rangle = \sum_n \langle m|\,\hat{S}\,|\,n\rangle\langle n\,|B\rangle, \quad m, n \in 1, 2 \ldots \tag{2.51}$$

Если ввести для краткости обозначение $\langle m|\,\hat{S}\,|\,n\rangle \equiv S_{mn}$, то видно, что уравнение (2.51) является матричным уравнением, связывающим набор комплексных чисел $\langle m\,|A\rangle$ ($m = 1, 2, \ldots$) с набором комплексных чисел $\langle n\,|B\rangle$ ($n = 1, 2, \ldots$). Каждый из этих наборов образует функции состояния $A$ или $B$ в $F$−представлении:

$$\begin{pmatrix} \langle 1 | A \rangle \\ \langle 2 | A \rangle \\ \vdots \\ \langle k | A \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & \dots \\ S_{21} & S_{22} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{k1} & S_{k2} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1 | B \rangle \\ \langle 2 | B \rangle \\ \vdots \\ \langle k | B \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{2.52}$$

Таким образом, вектор состояния определенный набором комплексных чисел $\langle n | A \rangle$ получается из вектора состояния определенного набором комплексных чисел $\langle n | B \rangle$ путем действия оператора, имеющего вид матрицы $S$, элементы которой $S_{nm}$ называются матричными элементами оператора $\hat{S}$. Фактически (2.52) и определяет вид оператора $\hat{S}$ в $F$-представлении.

Рассмотрим один тривиальный, но поучительный пример. Пусть оператор $\hat{S}$ совпадает с оператором $\hat{F}$. В этом случае на основании (2.48) имеем:

$$\langle m | \hat{S} | n \rangle \equiv \langle m | \hat{F} | n \rangle = f_n \langle m | n \rangle = f_n \delta_{nm}, \tag{2.53}$$

где $\delta_{nm}$− символ Кронекера. Таким образом, **оператор в своем собственном представлении есть диагональная матрица, на главной диагонали которой стоят собственные числа оператора**

$$\hat{F} \to \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & f_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & f_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \tag{2.54}$$

Как следует из изложенного выше размерность матрицы оператора определяется числом состояний $|n\rangle$. Так, если оператор имеет только два собственных состояния, то операторы, действующие в пространстве этих двух состояний являются квадратными матрицами размерности $2 \times 2$. При числе состояний $n$ − образуются квадратные матрицы размерности $n \times n$. Для случая бесконечного числа состояний операторы являются квадратными матрицами бесконечной размерности.

Для случая, когда оператор $\hat{F}$ − имеет непрерывный спектр, уравнение (2.48) есть:

$$\hat{F} |F\rangle = f |F\rangle, \tag{2.55}$$

и вместо (2.51), действуя аналогично выводу уравнения (2.51) получим интегральное равенство:

$$\langle F | A \rangle = \int \langle F | \hat{S} | F' \rangle \langle F' | B \rangle \, dF'. \tag{2.56}$$

Таким образом, если спектр оператора непрерывен, оператор $\hat{S}$ становится ядром интегрального преобразования. В случае, если $\hat{S} \equiv \hat{F}$, ядро интегрального преобразования (2.56) имеет вид:

$$\langle F | \hat{S} | F' \rangle \equiv \langle F | \hat{F} | F' \rangle = S_{FF'} = f' \delta(F - F'), \tag{2.57}$$

где $\delta(F - F')$– дельта-функция Дирака. Оператор в этом частном случае (оператор в своем собственном представлении) является бесконечно мерной непрерывной диагональной матрицей, на главной диагонали которой расположены собственные значения оператора.

Например, координата (частицы) $x$ – принимает непрерывный ряд значений. Ядро интегрального преобразования (2.56) оператора координаты в координатном представлении, в соответствии с (2.56), (2.57) есть:

$$\left\langle x\right| \hat{x} \left| x'\right\rangle = x'\, \delta(x - x'). \tag{2.58}$$

Таким образом, оператор координаты в координатном представлении есть умножение на координату $x$ ($\hat{x} \equiv x$), а уравнение (2.47) в кординатном представлении имеет вид:

$$\left\langle x \left| A\right\rangle \right. = x\left\langle x \left| B\right\rangle \right. . \tag{2.59}$$

Аналогично, если импульс частицы в системе принимает непрерывный ряд значений, получим, что оператор импульса в импульсном представлении есть умножение на импульс ($\hat{p} = p$).

Как уже отмечалось выше, конкретный вид уравнений квантовой механики может быть получен в представлении любой физической величины или динамической переменной. Исторически первые уравнения квантовой теории были установлены независимо в координатном представлении (Шредингер) и энергетическом представлении (Гейзенберг). Так уравнение (2.40) в координатном представлении имеет вид:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\langle x \left| \psi\right\rangle \right. = \hat{H}\left\langle x \left| \psi\right\rangle \right. . \tag{2.60}$$

Здесь $\left\langle x \left| \psi\right\rangle \right. \equiv \psi(x,t)$ – волновая функция в координатном представлении, а $\hat{H}$ – оператор Гамильтона в координатном представлении. Для одной частицы массы $m$, находящейся в потенциальном поле с потенциальной энергией $U(x)$ (для одномерного случая) оператор $\hat{H}$ есть:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x). \tag{2.61}$$

Для определения явного вида $\hat{H}$ необходимо установить вид оператора импульса в координатном представлении, так как вид оператора потенциальной энергии в координатном представлении, в силу (2.58), (2.59) совпадает с потенциальной функцией.

В силу того, что оператор импульса в импульсном представлении известен — это есть умножение на импульс, возникает задача нахождения вида оператора импульса в координатном представлении.

Для состояний с определенным значением импульса, (состояний непрерывного спектра) имеет место равенство:

$$\left\langle p' \left| p\right\rangle \right. = \delta(p - p'). \tag{2.62}$$

В силу условия полноты состояний с определенным значением координаты $\int \left| x\right\rangle \left\langle x\right| \, dx = 1$, перепишем (2.62) в виде:

$$\left\langle p' \left| p\right\rangle \right. = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left\langle p' \left| x\right\rangle \right. \left\langle x \left| p\right\rangle \right. dx = \delta(p - p'). \tag{2.63}$$

По определению $\langle x\,|p\rangle \equiv \psi_p(x)$ – функция состояния с определенным значением импульса в координатном представлении, а $\langle p'\,|x\rangle = \langle x\,|p'\rangle^* = \psi^*_{p'}(x)$ – комплексно сопряженная функция состояния с определенным значением импульса в координатном представлении, то есть (2.63) имеет вид:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{p'}(x)\cdot\psi_p(x)\,dx = \delta(p-p'). \tag{2.64}$$

Для $\delta$ –функции Дирака известно интегральное определение:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left[ix\left(k-k'\right)\right]\,dx = 2\pi\,\delta(k-k'). \tag{2.65}$$

Таким образом:

$$\langle x\,|p\rangle \equiv \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right). \tag{2.66}$$

Очевидно, что спектр оператора не зависит от типа представления и, например, уравнение на собственные функции оператора импульса в координатном представлении $\hat{p}_x$ имеет вид:

$$\hat{p}_x\langle x\,|p\rangle = p\,\langle x\,|p\rangle. \tag{2.67}$$

На основании (2.66) можно установить, что оператор импульса в координатном представлении есть:

$$\hat{p}_x \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}. \tag{2.68}$$

В результате одномерное уравнение Шредингера для частицы в поле $U(x)$ в координатном представлении имеет вид уравнения в частных производных:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right]\psi(x,t). \tag{2.69}$$

Волновая функция в координатном представлении обычно и называется волновой функцией. Волновая функция удовлетворяет следующей статистической интерпретации: $|\psi(x,t)|^2\,dx$ –есть вероятность обнаружить частицу в интервале $x \div x + dx$ в момент времени $t$. На волновую функцию в координатном представлении накладываются три условия, которые называются **стандартными**. А именно, волновая функция должна быть: **ограниченой, непрерывной и однозначной** функцией своих переменных.

Статистическая интерпретация функции состояния в произвольном представлении отражает вероятностный характер принципов квантовой механики и имеет аналогичный смысл.

## 2.3 Трансформационные свойства квантовых состояний

Известно, что понятие симметрии физической системы тесно связано с законами сохранения. Наличие симметрии в физической системе выражается в сохранении ее физических свойств при определенных преобразованиях. Преобразования связаны с унитарными операторами, действующими на систему или на координатный базис. Рассмотрим действие линейного унитарного преобразования $U$ на векторы состояний системы $\{|\psi_n\rangle\}$, приводящее к новым состояниям $\{|\psi_n'\rangle\}$.

$$|\psi_n'\rangle = U\,|\psi_n\rangle\,, \quad U^\dagger = U^{-1}. \tag{2.70}$$

Таким унитарным преобразованием может быть, например, сдвиг во времени, сдвиг в пространстве, вращение системы координат относительно начала координат и т.п.

Напомним, что в классической теории из принципа однородности времени вытекает закон сохранения энергии системы, из принципа однородности пространства — закон сохранения импульса, из принципа изотропии пространства — закон сохранения момента импульса. В свою очередь принципы однородности и изотропии позволяют определять линейные преобразования, соответствующие сдвигу по времени, сдвигу начала координат в трехмерном пространстве, повороту систем координат и т.д.

Рассматривая скалярное произведение преобразованных состояний (2.70):

$$\left\langle\psi_n'\,\middle|\psi_m'\right\rangle = \left\langle\psi_n\middle| U^\dagger U\,\middle|\,\psi_m\right\rangle = \left\langle\psi_n\,\middle|\psi_m\right\rangle \tag{2.71}$$

видно, что при унитарных преобразованиях "длина" вектора состояний и "угол" между векторами в пространстве состояний $\{\langle\psi_n'|\}$ сохраняются. Здесь понятие "угол" использовано на основе аналогии со скалярным произведением векторов в трехмерном пространстве.

Определяя некоторое унитарное преобразование над вектором состояний (2.70), необходимо установить как меняются операторы наблюдаемых при таких преобразованиях. Для этого рассмотрим матричный элемент произвольного оператора $\hat{Q}$ и так как $U^\dagger U = 1$, получим:

$$\left\langle\psi_n\middle|\,\hat{Q}\,\middle|\,\psi_m\right\rangle = \left\langle\psi_n\middle|\,U^\dagger U\hat{Q}U^\dagger U\,\middle|\,\psi_m\right\rangle = \left\langle\psi_n'\middle|\,U\hat{Q}U^\dagger\,\middle|\,\psi_m'\right\rangle \equiv \left\langle\psi_n'\middle|\,\hat{Q}'\,\middle|\,\psi_m'\right\rangle \tag{2.72}$$

Таким образом при унитарных преобразованиях оператор $Q$ преобразуется по закону:

$$Q' = UQU^\dagger = UQU^{-1} \tag{2.73}$$

Оператор $U$, определяющий унитарное преобразование, переходит в единичную матрицу $I$, если вызванное преобразованием изменение $\varepsilon$ некоторой переменной стремится к нулю. В этом случае, для малых $\varepsilon$, $U$ можно представить в виде:

$$U = I + i\varepsilon\hat{T}, \tag{2.74}$$

где $\varepsilon$— бесконечное малое число, а оператор $\hat{T}$ определяет бесконечно малое преобразование и называется **генератором бесконечно малого преобразования**. Для того, чтобы удовлетворить условию $U^\dagger U = I$, с точностью до бесконечно малых порядка $\varepsilon$, необходимо чтобы $\hat{T} = \hat{T}^\dagger$. Так как

$$U^\dagger U = (1 - i\varepsilon T'^\dagger)(1 + i\varepsilon T^\dagger) \simeq 1 + i\varepsilon(T - T^\dagger) + o(\varepsilon^2) = 1 + o(\varepsilon^2).$$

Таким образом, генератор бесконечно малого преобразования является эрмитовским оператором, а, следовательно, связан с наблюдаемой.

Два последовательных унитарных преобразования также дают унитарное преобразование. В связи с этим, $n$-последовательных бесконечно-малых преобразований, каждое из которых вызывает изменение $\Delta = \varepsilon/n$, определяется оператором:

$$U = \left[I + i\Delta\hat{T}\right]^n. \tag{2.75}$$

Предел при $n \to \infty$, приводит к понятию оператора конечного преобразования:

$$U = \lim_{n\to\infty}\left[I + i\frac{\varepsilon}{n}\hat{T}\right]^n = \exp\left(i\varepsilon\hat{T}\right) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(i\varepsilon)^k}{k!}\hat{T}^k. \tag{2.76}$$

Так как оператор конечного унитарного преобразования (2.76) определяется оператором $\hat{T}$, то очевидно, что коммутатор $[U, T] = 0$. Это означает, что собственные состояния $\hat{T}$ являются одновременно и собственными для $U$, а собственные значения оператора $\hat{T}$ не изменяются (сохраняются) при действии оператора $U$.

Инвариантность системы по отношению к унитарному преобразованию определяет закон сохранения собственных значений эрмитовского оператора $\hat{T}$, что соответствует определенному закону сохранения физической величины $T$.

1. **Сдвиг во времени**

   Рассмотрим преобразование $\hat{T}(\tau)$, которое переносит физическую систему во времени из $t$ в $t + \tau$, или меняет временную координату с $t$ на $t' = t - \tau$

$$\hat{T}(\tau)\,|t\rangle = |t'\rangle = |t - \tau\rangle\,. \tag{2.77}$$

   Если изменение времени $\tau$ мало, то формальное разложение состояния $|t'\rangle$ в ряд Тейлора дает:

$$|t'\rangle = |t\rangle + (-\tau)\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle + \frac{1}{2!}(-\tau)^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}|t\rangle + \cdots \equiv \exp\left(-\tau\frac{\partial}{\partial t}\right)|t\rangle\,. \tag{2.78}$$

   В результате, сравнивая (2.77) с (2.78), с учетом уравнения Шредингера ($i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi\rangle = \hat{H}\,|\psi\rangle$) находим, что оператор сдвига во времени есть:

$$\hat{T}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right), \tag{2.79}$$

   где $\hat{H}$ – оператор Гамильтона. Оператор (2.79) является оператором сдвига во времени для состояний в которых $H$ сам явно не зависит от времени. То есть симметрия системы, связанная с однородностью времени, приводит к закону сохранения энергии, так как собственными числами оператора Гамильтона являются энергии $\hat{H}\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle$. Изменение квантовых состояний во времени определяется в этом случае выражением:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{T}(-t)\,|\psi(0)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}\right)|\psi(0)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}tE_0\right)|\psi(0)\rangle\,. \qquad (2.80)$$

Здесь $E_0$— энергия состояния системы в начальный момент времени. Оператор $U(t) = T(-t) = T(t)^{\dagger}$ называется **оператором эволюции**.

2. **Сдвиг в пространстве**

Одномерный оператор сдвига $\hat{D}(z)$, перемещающий систему из точки $z_0$ в точку $z_0 + z$ и, следовательно, изменяющий координату с $z_0$ на $z' = z_0 - z$ определяется равенством

$$\hat{D}(z)\,|z_0\rangle = |z'\rangle = |z_0 - z\rangle\,. \qquad (2.81)$$

Аналогично предыдущему случаю, если перемещение мало, получим

$$|z'\rangle = |z_0\rangle + (-z)\frac{\partial}{\partial z_0}|z_0\rangle + \frac{1}{2!}(-z)^2\frac{\partial^2}{\partial z_0^2}|z_0\rangle + \cdots \equiv \exp\left(-z\frac{\partial}{\partial z_0}\right)|z_0\rangle \qquad (2.82)$$

или

$$\hat{D}(z) = \exp\left(-iz\,\frac{p_z}{\hbar}\right), \qquad (2.83)$$

где $p_z = -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial z}$— проекция оператора импульса на ось $z$. Для трехмерного сдвига, на вектор $\vec{r}$, обобщением (2.83) является:

$$\vec{D}(\vec{r}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\vec{r}\cdot\hat{\vec{p}}\right), \qquad (2.84)$$

где $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$— оператор импульса в координатном представлении.

3. **Вращение в пространстве**

Оператор поворота вокруг оси $z$ на угол $\varphi$ определяется равенством:

$$\hat{R}_z(\varphi)\,|\varphi_0\rangle = |\varphi'\rangle = |\varphi_0 - \varphi\rangle\,. \qquad (2.85)$$

Аналогично предыдущим случаям:

$$|\varphi'\rangle = \exp\left(-\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi_0}\right)|\varphi_0\rangle = \exp\left(-i\frac{L_z}{\hbar}\,\varphi\right)|\varphi_0\rangle\,, \qquad (2.86)$$

где $L_z = -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi}$— оператор момента импульса $\vec{L} = [\vec{r}\times\vec{p}]$. Для произвольного вращения вокруг оси $\vec{n}$ на угол $\alpha$, обобщение (2.86) есть:

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\alpha) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\alpha(\vec{J}\cdot\vec{n})\right), \qquad (2.87)$$

где $\vec{J}$ — оператор углового момента системы.

Оператором углового момента называется любой векторный оператор $\vec{j}$, удовлетворяющий коммутационным соотношениям:

$$[\,j_i, j_j\,] = i\varepsilon_{ijk}j_k, \qquad (2.88)$$

где $\varepsilon_{ijk}$— полностью антисимметричый, единичный тензор третьего ранга (символ Леви-Чивита).