§ 2. ПРИМЕРЫ ЛИНЕЙНЫХ ВЕКТОРНЫХ ПРОСТРАНСТВ

А. Смещения в трех измерениях

Всевозможные смещения частицы в трехмерном пространстве относительно начала координат — самый естественный пример действительного линейного векторного пространства. Сумма любых двух смещений, очевидно, тоже есть смещение. В качестве базиса обычно выбирают три единичных вектора $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$, направленных вдоль осей x, y и z, а скалярное произведение определяется как произведение длин двух векторов на косинус угла между ними. Такое определение не зависит от выбора базиса; читатель может проверить геометрически, что оно обладает необходимыми свойствами (3.3).

Б. Смещения совокупности из N частиц в трех измерениях

В этом примере, являющемся обобщением предыдущего, естественнее всего выбрать базис из $3N$ единичных векторов $\mathbf{e}_{tx}$, $\mathbf{e}_{ty}$, $\mathbf{e}_{tz}$, где $t=1, 2, \ldots, N$ и $\mathbf{e}_{tx}$ представляет собой смещение частицы t на единичный отрезок в направлении x, при котором все остальные частицы неподвижны. Можно определить скалярное произведение как сумму по всем частицам обычных скалярных произведений, определенных ранее в п. «А». Тогда произвольный вектор

$$\mathbf{r}=\sum_{t=1}^{N}\sum_{i=x,\,y,\,z} r_{ti}\mathbf{e}_{ti} \tag{3.8}$$

будет соответствовать смещению всех частиц, при котором частица t перемещается в направлении x на расстояние r_{tx} и т. д.

В. Пространство функций

Далее мы рассмотрим совокупность всех непрерывных функций $\psi(x)$, где x находится в интервале $a\leqslant x\leqslant b$, с граничными условиями $\psi(a)=\psi(b)=0$. Легко показать, что эта совокупность образует векторное пространство в соответствии с определением, данным в § 1, но не совсем ясно, как нам определить здесь скалярное произведение. В действительности можно показать, что определе-

ние

$$(\psi', \psi) = \int_a^b \psi'^*(x)\,\psi(x)\,dx \tag{3.9}$$

удовлетворяет формальным требованиям (3.3). В этом случае две функции ψ' и ψ ортогональны, если интеграл (3.9) обращается в нуль, и функция ψ нормирована, если $\int_a^b |\psi(x)|^2 dx = 1$. Если положить для простоты $a=0$, $b=\pi$, то набор

$$\psi_n(x) = (2/\pi)^{1/2} \sin nx,$$

где n — целое число, образует ортонормированный базис бесконечной размерности. Соотношение

$$(\psi_m, \psi_n) = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \sin mx \sin nx\,dx = \delta_{n,m} \tag{3.10}$$

доказывается легко, но требуется тщательно исследовать условие полноты, чтобы доказать справедливость разложения

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \tag{3.11}$$

для любой функции из нашей совокупности и тем самым показать, что функции $\psi_n(x)$ действительно образуют базис.

Коэффициенты c_n в разложении (3.11) совершенно аналогичны коэффициентам r_i в формуле (3.2), и в соответствии с (3.6) имеем

$$c_n = (\psi_n, \psi) = (2/\pi)^{1/2} \int_0^\pi \sin nx\,\psi(x)\,dx. \tag{3.12}$$

В формулах (3.11) и (3.12) мы узнаем разложение в синусоидальный ряд Фурье и формулу для его коэффициентов.

Г. Пространство функций с конечным числом измерений

В качестве примера рассмотрим шестимерное пространство L функций вида $\psi(\mathbf{r}) = c_1x^2 + c_2y^2 + c_3z^2 + c_4yz + c_5zx + c_6xy$, зависящих от координат x, y, z частицы, где

функция $\psi(\mathbf{r})$ задается набором шести комплексных параметров c_i. Определим скалярное произведение двух функций $\psi(\mathbf{r})$ и $\psi'(\mathbf{r})$ как интеграл

$$(\psi', \psi) = \iiint\limits_V \psi'^*(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,dV \qquad (3.13)$$

по единичной сфере V. Следует не упускать из виду отличие таких скалярных произведений от скалярного произведения векторов в обычном трехмерном пространстве. Чтобы избежать путаницы, мы будем обозначать скалярное произведение в обычном трехмерном пространстве символом $\mathbf{r}'\cdot\mathbf{r}$, а для функций оставим обозначение (ψ', ψ). В качестве базиса L мы можем выбрать шесть функций $\psi_1=x^2$, $\psi_2=y^2$, $\psi_3=z^2$, $\psi_4=yz$, $\psi_5=zx$; $\psi_6=xy$, обозначив их через радиус-вектор $\mathbf{r}$:

$$\psi_1=(\mathbf{e}_x\cdot\mathbf{r})^2, \quad \psi_4=(\mathbf{e}_y\cdot\mathbf{r})(\mathbf{e}_z\cdot\mathbf{r}) \text{ и т. д.} \qquad (3.14)$$

Этот простой базис не является ортонормированным, но линейная независимость составляющих его векторов очевидна.

Д. Волновые функции

В квантовой механике свойства системы из N частиц в некотором определенном состоянии описывает волновая функция $\psi(\mathbf{r})=\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$, являющаяся функцией координат частиц $\mathbf{r}_i$. Волновые функции удовлетворяют определенным граничным условиям (зависящим от вида системы); совокупность волновых функций, описывающих все возможные состояния системы, образует векторное пространство. Скалярное произведение определяется как

$$(\psi', \psi) = \int \psi'^*\psi\,dV,$$

где интеграл берется по всем координатам, а элемент объема $dV=d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \ldots d\mathbf{r}_N$ есть произведение элементов объема, соответствующих каждой частице в отдельности. Предполагается, что функция ψ обладает конечной нормой (ψ, ψ). Если гамильтониан системы H, определяющий ее свойства, эрмитов, то можно показать, что собственные функции ψ_i', удовлетворяющие уравнению Шредингера

$\mathsf{H}\psi_i = E_i\psi_i$ и описывающие стационарные состояния системы ψ_i, будут взаимно ортогональны в смысле соотношения $(\psi_i, \psi_j) = \int \psi_i^* \psi_j dV = \delta_{ij}$. Следовательно, они образуют базис в векторном пространстве. Если же при некоторой энергии E система становится вырожденной, т. е. имеется набор s линейно независимых ортонормированных собственных функций ψ_i, соответствующих этой энергии, то набор этих функций ψ_i ($i=1, 2, \ldots, s$) образует базис s-мерного подпространства, каждый вектор в котором есть собственная функция гамильтониана H с энергией E.

§ 3. ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

Изложив основные сведения о векторном пространстве L, перейдем теперь к самому важному понятию всей книги — понятию преобразования (отображения), переводящего каждый вектор пространства L в другой вектор того же пространства. Пусть некоторый произвольный вектор $\mathbf{r}$ переводится в вектор $\mathbf{r}'$; определим оператор T равенством

$$\mathsf{T}\mathbf{r} = \mathbf{r}'. \tag{3.15}$$

Оператор T называется линейным оператором, если для любых векторов $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ и $\mathbf{r}$ выполняются соотношения

$$\mathsf{T}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) = \mathsf{T}\mathbf{r}_1 + \mathsf{T}\mathbf{r}_2, \tag{3.16а}$$

$$\mathsf{T}c\mathbf{r} = c\mathsf{T}\mathbf{r}, \tag{3.16б}$$

где c — любое комплексное число.

Поскольку даже конечномерное векторное пространство содержит бесконечное множество векторов, на первый взгляд может показаться, что определить T равенством (3.15) можно лишь с использованием бесконечного набора параметров. Но ограничившись лишь линейными операторами [формулы (3.16)], мы чрезвычайно упрощаем задачу: задавая преобразование базисных векторов, мы тем самым задаем преобразование произвольного вектора. На практике все операторы в этой книге, представляющие интерес с точки зрения изучения симметрии, являются линейными — за одним небольшим исключением (т. 2, гл. 15, § 7, п. Г).