$\mathsf{H}\psi_i = E_i\psi_i$ 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).

Рассмотрим теперь преобразование некоторого базисного вектора $\mathbf{e}_i$ в векторном пространстве конечной размерности s. Обозначим преобразованный вектор через $\mathbf{e}'_i$:

$$\mathsf{T}\mathbf{e}_i = \mathbf{e}'_i. \tag{3.17}$$

Но поскольку векторы $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_s$ образуют базис, вектор $\mathbf{e}'_i$ можно разложить по этому базису:

$$\mathbf{e}'_i = \sum_{j=1}^{s} T_j \mathbf{e}_j.$$

Таким образом, в силу (3.17) имеем

$$\mathsf{T}\mathbf{e}_i = \sum_{j=1}^{s} T_j \mathbf{e}_j,$$

но коэффициенты T_j, очевидно, зависят также от индекса i исходного вектора, а потому было бы желательно ввести этот индекс в коэффициент T_j, записав его как T_{ji}, и тогда

$$\mathbf{e}'_i = \mathsf{T}\mathbf{e}_i = \sum_{j=1}^{s} T_{ji} \mathbf{e}_j. \tag{3.18}$$

Таким образом, преобразование всего базиса полностью задается набором s^2 коэффициентов T_{ji}. Зная эти коэффициенты, можно найти преобразование $\mathsf{T}\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ для произвольного вектора $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{s} r_i \mathbf{e}_i$:

$$\mathbf{r}' = \mathsf{T}\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{s} r_i \mathsf{T}\mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^{s} r_i \sum_{j=1}^{s} T_{ji} \mathbf{e}_j = \sum_{j=1}^{s} \left\{ \sum_{i=1}^{s} T_{ji} r_i \right\} \mathbf{e}_j. \tag{3.19}$$

Вводя компоненты r'_j вектора $\mathbf{r}'$,

$$\mathbf{r}' = \sum_{j=1}^{s} r'_j \mathbf{e}_j,$$

и сравнивая с равенством (3.19), мы видим, что они связаны с компонентами r_i вектора $\mathbf{r}$ соотношением

$$r'_j = \sum_{i=1}^{s} T_{ji} r_i. \tag{3.20}$$

Коэффициенты преобразования T_{ji} входят как в формулу (3.18), так и в формулу (3.20), но эти две формулы не

одно и то же. Первая из них связывает преобразованные базисные векторы с исходным базисом, а вторая — компоненты любого преобразованного вектора с его первоначальными компонентами, причем те и другие компоненты относятся к исходному базису. Отметим, однако, что в формуле (3.18) суммирование проводится по первому индексу j компонент T_{ji}, а в формуле (3.20) — по второму индексу i.

Коэффициенты T_{ji} на самом деле образуют некую матрицу $\mathbf{T}$, так что T_{ji} — матричный элемент, стоящий на пересечении j-й строки с i-м столбцом. Если представить базисный вектор $\mathbf{e}_i$ в виде матрицы-столбца, элементы всех строк которой, кроме i-й, равны 0, а элемент i-й строки равен 1, то мы получим

$$\mathbf{T}\mathbf{e}_i = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \dots & T_{1s} \\ T_{21} & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ T_{s1} & \cdot & \dots & T_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \cdot \\ 1 \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{1i} \\ T_{2i} \\ \cdot \\ \cdot \\ T_{si} \end{pmatrix} = T_{1i} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix} +$$

$$+ T_{2i} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + T_{si} \begin{pmatrix} 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 1 \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{s} T_{ji}\mathbf{e}_j,$$

т. е. просто формулу (3.18), записанную в другой форме.

Произвольный вектор $\mathbf{r}$ можно представить аналогичным образом в виде

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ r_s \end{pmatrix}, \text{ причем } \mathbf{T}\mathbf{r} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \dots & T_{1s} \\ T_{21} & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ \cdot & & & \cdot \\ T_{s1} & \cdot & \dots & T_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ r_s \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{s} T_{1i} r_i \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \sum_{i=1}^{s} T_{si} r_i \end{pmatrix}.$$

Если базис $\mathbf{e}_i$ ортонормированный, то возможна еще одна интерпретация матричных элементов T_{ji}. Вычисляя скалярное произведение $\mathbf{e}_j$ на $\mathbf{e}'_i$, получаем

$$(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}'_j) = (\mathbf{e}_j, \mathsf{T}\mathbf{e}_i) = \sum_k T_{ki} (\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k) = \sum_k T_{ki}\delta_{jk} = T_{ji}. \quad (3.21)$$

Таким образом, матричный элемент T_{ji} — это просто скалярное произведение $(\mathbf{e}_j, \mathsf{T}\mathbf{e}_i)$, в котором оператор T «вложен» между двумя базисными векторами $\mathbf{e}_j$ и $\mathbf{e}_i$. В квантовой механике часто встречается выражение «матричный элемент оператора», понимаемый именно как такое скалярное произведение.

§ 4. УМНОЖЕНИЕ И ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ОПЕРАТОРОВ, ОБРАТНЫЙ ОПЕРАТОР

Произведением TS двух операторов T и S в векторном пространстве L называется результат действия сначала оператора S, а затем оператора T.

Если

$$\mathsf{S}\mathbf{e}_i = \sum_j S_{ji}\mathbf{e}_j, \quad \mathsf{T}\mathbf{e}_j = \sum_k T_{kj}\mathbf{e}_k,$$

то

$$\mathsf{TS}\mathbf{e}_i = \sum_j S_{ji}\mathsf{T}\mathbf{e}_j = \sum_j \sum_k S_{ji}T_{kj}\mathbf{e}_k = \sum_k \left\{\sum_j T_{kj}S_{ji}\right\} \mathbf{e}_k,$$

так что матричные элементы произведения TS имеют вид

$$(\mathsf{TS})_{ki} = \sum_j T_{kj}S_{ji}. \quad (3.22)$$

Отсюда понятно, что матрица произведения операторов TS есть обычное произведение матриц T и S в указанном порядке. Заметим, что операторы, как и матрицы, в общем случае не «коммутируют», т. е. порядок умножения влияет на результат. Разность $\mathsf{TS}-\mathsf{ST}$ двух разных произведений операторов T и S называется их коммутатором. Коммутатор, обозначаемый символом $[\mathsf{T}, \mathsf{S}]$, сам является оператором. Отметим также, что, по принятому соглашению, оператор действует на вектор, находящийся справа от него. Следовательно, можно считать, что в произведении TS сначала действует оператор S, а затем оператор T.