Покажем, каким образом можно непосредственно доказать взаимную ортогональность собственных функций эрмитова оператора, соответствующих различным собственным значениям. Пусть f_n, f_m — два различных собственных значения вещественной величины f, а Ψ_n, Ψ_m — соответствующие им собственные функции:

$$\hat{f}\Psi_n = f_n\Psi_n, \qquad \hat{f}\Psi_m = f_m\Psi_m.$$

Умножив обе стороны первого из этих равенств на Ψ_m^*, а равенство, комплексно сопряженное второму, — на Ψ_n и, вычтя эти произведения почленно друг из друга, получим

$$\Psi_m^*\hat{f}\Psi_n - \Psi_n\hat{f}^*\Psi_m^* = (f_n - f_m)\Psi_n\Psi_m^*.$$

Проинтегрируем обе части этого равенства по dq. Поскольку $\hat{f}^* = \tilde{\hat{f}}$, то в силу (3,14) интеграл от левой части равенства обращается в нуль, так что получим

$$(f_n - f_m)\int \Psi_n\Psi_m^*\,dq = 0,$$

откуда, ввиду $f_n \neq f_m$, следует искомое свойство ортогональности функций Ψ_n и Ψ_m.

Мы все время говорим здесь только об одной физической величине f, между тем как следовало бы говорить, как было отмечено в начале параграфа, о полной системе одновременно измеримых физических величин. Тогда мы нашли бы, что каждой из этих величин f, g, ... соответствует свой оператор $\hat{f}$, $\hat{g}$, ... Собственные функции Ψ_n соответствуют состояниям, в которых все рассматриваемые величины имеют определенные значения, т. е. соответствуют определенным наборам собственных значений f_n, g_n, ... и являются совместными решениями системы уравнений

$$\hat{f}\Psi = f\Psi, \qquad \hat{g}\Psi = g\Psi, \ \ldots$$

§ 4. Сложение и умножение операторов

Если $\hat{f}$ и $\hat{g}$ — операторы, отвечающие двум физическим величинам f и g, то сумме $f + g$ отвечает оператор $\hat{f} + \hat{g}$. Смысл сложения различных физических величин в квантовой механике, однако, существенно различен в зависимости от того, измеримы ли эти величины одновременно или нет. Если величины f и g одновременно измеримы, то операторы $\hat{f}$ и $\hat{g}$ имеют совместные собственные функции, которые являются в то же время и собственными функциями оператора $\hat{f} + \hat{g}$, а собственные значения последнего оператора равны суммам $f_n + g_n$.

Если же величины f и g не могут иметь одновременно определенных значений, то смысл их суммы $f + g$ более ограничен.

Можно лишь утверждать, что среднее значение этой величины в произвольном состоянии равно сумме средних значений каждого из слагаемых в отдельности:

$$\overline{f+g}=\bar{f}+\bar{g}. \qquad (4,1)$$

Что же касается собственных значений и функций оператора $\hat{f}+\hat{g}$, то здесь они, вообще говоря, не будут иметь никакого отношения к собственным значениям и функциям величин f и g. Очевидно, что если операторы $\hat{f}$ и $\hat{g}$ — эрмитовы, то эрмитовым будет и оператор $\hat{f}+\hat{g}$, так что его собственные значения — вещественны и представляют собой собственные значения определенной таким образом новой величины $f+g$.

Отметим следующую теорему. Пусть f_0, g_0 — наименьшие собственные значения величин f, g, а $(f+g)_0$ — то же для величины $f+g$. Тогда можно утверждать, что

$$(f+g)_0 \geqslant f_0+g_0. \qquad (4,2)$$

Знак равенства имеет место, если величины f и g одновременно измеримы. Доказательство следует из очевидного факта, что среднее значение величины во всяком случае больше или равно ее наименьшему собственному значению. В состоянии, в котором величина $(f+g)$ имеет значение $(f+g)_0$, имеем $\overline{(f+g)}=(f+g)_0$, и поскольку, с другой стороны, $\overline{(f+g)}=\bar{f}+\bar{g}\geqslant f_0+g_0$, мы приходим к неравенству (4,2).

Пусть теперь снова f и g — одновременно измеримые величины. Наряду с их суммой можно ввести понятие и об их произведении как о величине, собственные значения которой равны произведениям собственных значений величин f и g. Легко видеть, что такой величине соответствует оператор, действие которого состоит в последовательном действии на функцию сначала одного, а затем другого оператора. Такой оператор изображается математически как произведение операторов $\hat{f}$ и $\hat{g}$. Действительно, если Ψ_n — общие собственные функции операторов $\hat{f}$ и $\hat{g}$, то имеем

$$\hat{f}\hat{g}\Psi_n=\hat{f}\,(\hat{g}\Psi_n)=\hat{f}g_n\Psi_n=g_n\hat{f}\Psi_n=g_nf_n\Psi_n$$

(символ $\hat{f}\hat{g}$ обозначает оператор, действие которого на функцию Ψ заключается в последовательном действии сначала оператора $\hat{g}$ на функцию Ψ, а затем оператора $\hat{f}$ на функцию $\hat{g}\Psi$). С тем же успехом мы могли бы взять вместо оператора $\hat{f}\hat{g}$ оператор $\hat{g}\hat{f}$, отличающийся от первого порядком множителей. Очевидно, что результат воздействия обоих этих операторов на функции Ψ_n будет одинаковым. Но поскольку всякая волновая функция Ψ может быть представлена в виде линейной комбинации функций Ψ_n, то отсюда следует, что одинаковым будет результат воздействия операторов $\hat{f}\hat{g}$ и $\hat{g}\hat{f}$ и на произвольную функцию. Этот факт может быть записан в виде символического равенства $\hat{f}\hat{g} = \hat{g}\hat{f}$ или

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = 0. \tag{4,3}$$

О таких двух операторах $\hat{f}$ и $\hat{g}$ говорят, как о *коммутативных* друг с другом. Таким образом, мы приходим к важному результату: если две величины f и g могут иметь одновременно определенные значения, то их операторы коммутативны друг с другом.

Может быть доказана и обратная теорема (см. § 11): если операторы $\hat{f}$ и $\hat{g}$ коммутативны, то у них все собственные функции можно выбрать общими, что физически означает одновременную измеримость соответствующих физических величин. Таким образом, коммутативность операторов является необходимым и достаточным условием одновременной измеримости физических величин.

Частным случаем произведения операторов является оператор, возведенный в некоторую степень. На основании сказанного мы можем заключить, что собственные значения оператора $\hat{f}^p$ (p — целое число) равны собственным значениям оператора $\hat{f}$, возведенным в ту же p-ю степень. Вообще, можно определить любую функцию оператора $\varphi(\hat{f})$ как оператор, собственные значения которого равны такой же функции $\varphi(f)$ собственных значений оператора $\hat{f}$. Если функция $\varphi(f)$ разложима в ряд Тэйлора, то таким разложением действие оператора $\varphi(\hat{f})$ сводится к действию различных степеней $\hat{f}^p$.

В частности, оператор $\hat{f}^{-1}$ называется *обратным* оператору $\hat{f}$. Очевидно, что в результате последовательного воздействия операторов $\hat{f}$ и $\hat{f}^{-1}$ на произвольную функцию последняя остается неизменной, т. е. $\hat{f}\hat{f}^{-1} = \hat{f}^{-1}\hat{f} = 1$.

Если же величины f и g не измеримы одновременно, то понятие их произведения не имеет указанного выше прямого смысла. Это проявляется уже в том, что оператор $\hat{f}\hat{g}$ в этом случае не будет эрмитовым, а поэтому не может соответствовать вещественной физической величине. Действительно, по определению транспонированного оператора, пишем

$$\int \Psi \hat{f}\hat{g}\Phi \, dq = \int \Psi \hat{f}(\hat{g}\Phi)\, dq = \int (\hat{g}\Phi)(\tilde{\hat{f}}\Psi)\, dq.$$

Здесь оператор $\tilde{\hat{f}}$ действует только на функцию Ψ, а оператор $\hat{g}$ на Φ, так что под интегралом стоит просто произведение двух функций: $\hat{g}\Phi$ и $\tilde{\hat{f}}\Psi$. Применив еще раз определение транспонированного оператора, пишем

$$\int \Psi \hat{f}\hat{g}\Phi \, dq = \int (\tilde{\hat{f}}\Psi)(\hat{g}\Phi)\, dq = \int \Phi \tilde{\hat{g}}\tilde{\hat{f}}\Psi \, dq.$$

Таким образом, мы получили интеграл, в котором по сравнению с первоначальным функции Ψ и Φ поменялись местами. Другими словами, оператор $\tilde{\hat g}\tilde{\hat f}$ есть оператор, транспонированный с $\hat f\hat g$, и мы можем написать

$$\widetilde{\hat f\hat g} = \tilde{\hat g}\tilde{\hat f}, \tag{4,4}$$

— оператор, транспонированный с произведением $\hat f\hat g$, есть произведение транспонированных множителей, написанных в обратном порядке. Взяв комплексно сопряженное от обеих сторон равенства (4,4), найдем, что

$$(\hat f\hat g)^+ = \hat g^+\hat f^+. \tag{4,5}$$

Если каждый из операторов $\hat f$ и $\hat g$ — эрмитов, то $(\hat f\hat g)^+ = \hat g\hat f$. Отсюда следует, что оператор $\hat f\hat g$ будет эрмитовым, только если множители $\hat f$ и $\hat g$ — коммутативны.

Отметим, что из произведений $\hat f\hat g$ и $\hat g\hat f$ двух некоммутативных эрмитовых операторов можно составить эрмитов же оператор — их *симметризованное произведение*

$$\frac{1}{2}(\hat f\hat g + \hat g\hat f). \tag{4,6}$$

Легко также убедиться в том, что разность $\hat f\hat g - \hat g\hat f$ есть «антиэрмитов» оператор (т. е. такой, для которого транспонированный оператор равен взятому с обратным знаком комплексно сопряженному). Он может быть сделан эрмитовым умножением на i; таким образом,

$$i(\hat f\hat g - \hat g\hat f) \tag{4,7}$$

есть тоже эрмитов оператор.

В дальнейшем мы будем иногда пользоваться для краткости обозначением

$$\{\hat f, \hat g\} = \hat f\hat g - \hat g\hat f \tag{4,8}$$

для так называемого *коммутатора* операторов. Легко убедиться в том, что имеет место соотношение

$$\{\hat f\hat g, \hat h\} = \{\hat f, \hat h\}\hat g + \hat f\{\hat g, \hat h\}. \tag{4,9}$$

Заметим, что если $\{\hat f, \hat h\} = 0$ и $\{\hat g, \hat h\} = 0$, то отсюда, вообще говоря, отнюдь не следует, что и $\hat f$ и $\hat g$ коммутативны.

§ 5. Непрерывный спектр

Все выведенные в § 3, 4 соотношения, описывающие свойства собственных функций дискретного спектра, без труда могут быть обобщены на случай непрерывного спектра собственных значений.