С другой стороны, соотношение (15,14) можно написать в виде

$$\psi(x) = \int G(x, x')\,\varphi(x')\,dx', \tag{15,15}$$

где функция $G(x, x')$, называемая функцией Грина уравнения (15,13), удовлетворяет соотношению

$$\hat{F}G(x, x') = \delta(x - x'). \tag{15,16}$$

Действительно, если мы подействуем на правую и левую части равенства (15,15) оператором $\hat{F}$, то при условии (15,16) мы опять придем к соотношению (15,13). Сравнивая (15,14) и (15,15), мы видим, что функция Грина $G(x, x')$ является ядром интегрального оператора $\hat{F}^{-1}$. Из уравнения (15,16) функция Грина $G(x, x')$ определяется неоднозначно. Для однозначного определения нужно задать еще некоторые условия типа граничных условий.

Соотношение (15,13) можно рассматривать как некоторое уравнение относительно функции $\psi(x)$ с заданной функцией $\varphi(x)$, решение которого дается формулой (15,15). Следует только иметь в виду, что для получения общего решения мы должны добавить к (15,15) общее решение $\psi_0(x)$ однородного уравнения

$$\hat{F}\psi_0(x) = 0.$$

Тогда имеем

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int G(x, x')\,\varphi(x')\,dx'. \tag{15,17}$$

Найденное соотношение понадобится нам в дальнейшем.

§ 16. Собственные значения и собственные функции операторов

Рассмотрим операторное соотношение

$$\hat{F}\psi = F\psi. \tag{16,1}$$

Соотношение (16,1) означает, что при применении оператора $\hat{F}$ к функции ψ снова получается функция ψ, умноженная на некоторую постоянную F. Совершенно очевидно, что при данном виде оператора $\hat{F}$ соотношению (16,1) может удовлетворять отнюдь не всякая функция ψ. Иными словами, соотношение (16,1) является уравнением. Вид функции ψ может быть получен путем решения уравнения (16,1). Если оператор $\hat{F}$ является линейным дифференциальным оператором, то уравнение (16,1) будет дифференциальным уравнением. Поскольку из вида уравнения сразу ясно, что $\psi = 0$ является его тривиальным решением, (16,1) представляет линейное однородное дифференциальное уравнение. Исследование таких линейных однородных уравнений является важнейшей задачей теории операторов.

В дальнейшем нас будут интересовать не любые операторы $\hat{F}$ и функции ψ, а лишь функции, удовлетворяющие определенным условиям:

1) функция ψ должна существовать во всей области изменения независимых переменных. Например, в случае декартовых координат, в области $-\infty < x < \infty$, $-\infty < y < \infty$, $-\infty < z < \infty$;

2) в области существования функция ψ должна быть конечной и непрерывной, вместе со своей первой производной; за исключением, может быть, особых точек;

3) функция ψ должна быть однозначна.

Совокупность условий 1)—3) мы будем именовать стандартными условиями. Оказывается, что уравнение (16,1), вообще говоря, имеет решения, отличные от тривиального и удовлетворяющие стандартным условиям не при всех значениях параметра F, а лишь при некоторых избранных его значениях. Избранные значения F, при которых существуют нетривиальные решения уравнения (16,1), именуются собственными значениями оператора $\hat{F}$, а соответствующие им решения уравнения (16,1) — собственными функциями оператора $\hat{F}$.

Приведем прежде всего знакомые уже нам задачи о собственных функциях и собственных значениях.

1) При рассмотрении задачи о движении частицы в потенциальной яме мы решали уравнение (16,1) с дифференциальным оператором $\hat{F} = -\frac{d^2}{dx^2}$. Граничные условия приводили к собственным числам (8,5) и собственным функциям (8,7) оператора $\hat{F}$.

2) Если при том же виде оператора мы не требуем обращения ψ в нуль на границах промежутка $(0, l)$, то решения (8,2) будут иметь вид

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Если $k^2 > 0$, то при всех значениях x функция ψ конечна, так что решение удовлетворяет стандартным условиям. При отрицательных k^2

$$\psi = Ae^{-\varkappa x} + Be^{\varkappa x}, \qquad \text{где} \qquad k = i\varkappa,$$

решений, удовлетворяющих стандартным условиям, не существует.

3) В задаче об осцилляторе мы рассматривали решение уравнения (16,1) для оператора (см. (10,3))

$$\hat{F} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2.$$

Задача имела решения при $F = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1$.

Из приведенных примеров ясно, что совокупность собственных значений оператора, которую мы будем именовать его спектром, может быть как дискретной (пример 1 и 3), так и непрерывной (пример 2). В первом случае мы будем именовать спектр дискретным, во втором — непрерывным или сплошным. Можно доказать, что собственные функции, отвечающие дискретному спектру собственных значений, — квадратично интегрируемы, т. е. интеграл $\int |\psi|^2 dV$ сходится. Собственные функции, отвечающие сплошному спектру собственных значений, — квадратично неинтегрируемы. Если каждому собственному значению оператора принадлежит одна и только одна собственная функция ψ, спектр носит название невырожденного. Если, напротив, одному собственному значению F отвечает несколько, например s различных собственных функций, то данное собственное значение называют вырожденным с кратностью вырождения s.

Приведенные примеры важны в том отношении, что они проясняют наш интерес к теории операторов. Задача о нахождении решения уравнения Шредингера представляет частный случай задачи о собственных функциях операторов определенного вида.

Прежде чем от этого эвристического рассуждения перейти к установлению более полной связи между понятиями квантовой механики и теорией линейных операторов, необходимо еще рассмотреть некоторые важные свойства операторов определенного класса.

§ 17. Эрмитовы операторы

Собственные значения F в операторном уравнении (16,1) могут быть, вообще говоря, комплексными. Нас, однако, будут интересовать лишь такие уравнения, которые приводят только к вещественным собственным значениям. Оказывается, что существует класс операторов, которые могут обладать только вещественными собственными значениями. Такие операторы носят название эрмитовых или самосопряженных. Каждому линейному оператору $\hat{F}$ можно сопоставить некоторый другой оператор $\hat{F}^+$, который мы будем называть оператором, сопряженным к данному, или эрмитово сопряженным. Сопряженный оператор