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 определяется условием

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dV = \int \psi_2 \left(\hat{F}^+ \psi_1\right)^* dV. \tag{17,1}$$

Здесь, как всегда, звездочкой обозначены комплексно сопряженные величины. Интегрирование в (17,1) ведется по всей области изменения независимых переменных. Через dV мы обозначили элемент объема этой области.

Функции ψ_1, ψ_2 должны удовлетворять необходимым требованиям для сходимости интегралов в (17,1). Кроме того, они должны удовлетворять некоторым граничным условиям, которые обычно сводятся к требованию, чтобы функции ψ_1 и ψ_2 обращались в нуль на бесконечности. В остальном же функции ψ_1 и ψ_2 достаточно произвольны. Если оператор $\hat{F}$ совпадает со своим сопряженным оператором $F^+ = \hat{F}$, то такой оператор называют эрмитовым или самосопряженным.

Соотношение (17,1) в этом случае имеет вид

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dV = \int \psi_2 \hat{F}^* \psi_1^* \, dV. \tag{17,2}$$

Здесь мы через $\hat{F}^*$ обозначили оператор, определяемый соотношением

$$\hat{F}^* \psi^* = (\hat{F} \psi)^*.$$

В качестве примера найдем оператор, сопряженный к оператору дифференцирования $\hat{F} = \frac{d}{dx}$. Полагая, что функции ψ_1, ψ_2 обращаются в нуль на бесконечности, получаем, производя в (17,1) интегрирование по частям:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{d}{dx} \psi_2 \, dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \frac{d\psi_1^*}{dx} \, dx.$$

Сравнивая с (17,1), находим оператор $\hat{F}^+$:

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

Мы видим, что оператор $\hat{F}^+$ в данном случае не совпадает с оператором $\hat{F}$, т. е. оператор дифференцирования не является самосопряженным. Если, однако, в качестве оператора $\hat{F}$ взять оператор $i \frac{d}{dx}$, то легко видеть, что такой оператор уже будет эрмитовым. Действительно, в этом случае имеем, интегрируя по частям:

$$i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{d}{dx} \psi_2 \, dx = - i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* \frac{d}{dx} \psi_1^* \, dx,$$

и соотношение (17,2) теперь выполняется. Отсюда следует, что оператор $\hat{F} = i\frac{d}{dx}$ эрмитов.

Определим еще оператор $\tilde{\hat{F}}$, который называется оператором, транспонированным с исходным оператором $\hat{F}$:

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 \, dV = \int \psi_2 \tilde{\hat{F}} \psi_1^* \, dV. \qquad (17,3)$$

Сравнивая (17,3) с (17,1), получаем

$$\hat{F}^+ = \tilde{\hat{F}}^*.$$

Найдем далее оператор $\hat{L}^+$, сопряженный оператору $\hat{L}$, являющемуся произведением двух операторов $\hat{L} = \hat{F}\hat{R}$. Из определения (17,1) имеем

$$\int \psi_1^* \hat{F} \left(\hat{R}\psi_2\right) dV = \int \left(\hat{R}\psi_2\right)\left(\hat{F}^+\psi_1\right)^* dV.$$

Поменяем функции $(\hat{R}\psi_2)$ и $(\hat{F}^+\psi_1)$ местами. Тогда получим

$$\int \psi_1^* \hat{F}\hat{R}\psi_2 \, dV = \int \left(\hat{F}^+\psi_1\right)^* \hat{R}\psi_2 \, dV.$$

Используем, далее, опять соотношение (17,1)

$$\int \psi_1^* \hat{F}\hat{R}\psi_2 \, dV = \int \psi_2 \left(\hat{R}^+ \left(\hat{F}^+\psi_1\right)\right)^* dV.$$

Из этого выражения получаем оператор $\hat{L}^+ = (\hat{F}\hat{R})^+$

$$(\hat{F}\hat{R})^+ = R^+ F^+. \qquad (17,4)$$

Мы видим, что оператор, сопряженный произведению, равен произведению сопряженных операторов, взятых, однако, в обратном порядке. Таким образом, если операторы $\hat{F}$ и $\hat{R}$ самосопряженные, т. е. $\hat{F}^+ = \hat{F}$, $\hat{R}^+ = \hat{R}$, то их произведение будет самосопряженным оператором только в том случае, если они коммутируют. Действительно, при этих условиях имеем

$$(\hat{F}\hat{R})^+ = \hat{R}\hat{F} = \hat{F}\hat{R}. \qquad (17,5)$$

Так как каждый оператор заведомо коммутирует сам с собой, то из (17,5) следует, что если оператор $\hat{F}$ эрмитов, то эрмитовым будет и оператор $\hat{F}^2 = \hat{F}\hat{F}$, а также вообще оператор $\hat{F}^n = \underbrace{\hat{F}\cdot\hat{F}\ \ldots\ \hat{F}}_{n}$, где n — целое положительное число.

Перейдем теперь к доказательству основной теоремы о вещественности собственных значений эрмитовых операторов.

Для этого перепишем еще раз уравнение (16,1), предположив для конкретности, что оператор $\hat{F}$ обладает дискретным спектром

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n.$$

Умножив уравнение слева на ψ_n^* и интегрируя, получаем

$$F_n = \frac{\int \psi_n^* \hat{F}\psi_n \, dV}{\int |\psi_n|^2 \, dV}.$$

Если оператор $\hat{F}$ эрмитов, то легко видеть, что собственные значения F_n, определенные в (16,1), вещественны. Действительно, учитывая условия эрмитовости (17,2), находим

$$F_n^* = \frac{\int \psi_n \hat{F}\psi_n^* \, dV}{\int |\psi_n|^2 \, dV} = F_n.$$

Таким образом, мы доказали, что эрмитовы (самосопряженные) операторы имеют только действительные собственные значения.

§ 18. Ортогональность и нормировка собственных функций эрмитовых операторов

Собственные функции линейного эрмитового оператора $\hat{F}$, отвечающие различным собственным значениям F_n и F_m, взаимно ортогональны, т. е. удовлетворяют соотношению

$$\int \psi_m^* \psi_n \, dV = 0 \qquad (\text{при } m \neq n). \tag{18,1}$$

Действительно, функции ψ_n и ψ_m^* удовлетворяют уравнениям (16,1)

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n, \qquad \hat{F}^*\psi_m^* = F_m\psi_m^*. \tag{18,2}$$

Поскольку оператор $\hat{F}$ эрмитов, имеем

$$\int \psi_m^* \hat{F}\psi_n \, dV = \int \psi_n \hat{F}^* \psi_m^* \, dV. \tag{18,3}$$

Используя уравнения (18,2), перепишем равенство (18,3) в виде

$$F_n \int \psi_m^* \psi_n \, dV = F_m \int \psi_m^* \psi_n \, dV.$$

Отсюда следует:

$$(F_m - F_n) \int \psi_m^* \psi_n \, dV = 0. \tag{18,4}$$