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:

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

Так как по предположению $F_m \neq F_n$, то мы получаем

$$\int \psi_m^* \psi_n \, dV = 0, \tag{18,5}$$

что и доказывает наше утверждение.

Так как собственные функции удовлетворяют однородному линейному уравнению, то они определены с точностью до произвольной постоянной.

Имея в виду дальнейшее, мы будем нормировать собственные функции дискретного спектра условием

$$\int \psi_n^* \psi_n \, dV = 1. \tag{18,6}$$

Собственные функции, удовлетворяющие соотношению (18,6), мы будем именовать нормированными на единицу. Формулы (18,1) и (18,6) объединим в одну

$$\int \psi_m^* \psi_n \, dV = \delta_{nm}, \tag{18,7}$$

где δ_{nm} — символ Кронекера:

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n = m, \\ 0 & n \neq m. \end{cases}$$

Рассмотрим теперь случай вырожденных состояний, когда одному и тому же собственному значению F_n принадлежит несколько собственных функций $\psi_{n1}, \psi_{n2}, \ldots, \psi_{ns}$, где s — кратность вырождения.

В качестве решения уравнения (18,2), отвечающего собственному значению F_n, можно взять произвольные линейные комбинации этих функций

$$\psi'_{nk} = \sum_{r=1}^{s} a_{kr} \psi_{nr}. \tag{18,8}$$

Соответствующим подбором коэффициентов a_{kr} можно добиться взаимной ортогональности собственных функций ψ'_{nk}, принадлежащих одному и тому же собственному значению F_n. Накладывая также условие нормировки, получаем

$$\int \psi'^*_{nk} \psi'_{nl} \, dV = \delta_{kl}. \tag{18,9}$$

Условие (18,9) еще не определяет полностью значения коэффициентов a_{kr}. Действительно, если функции ψ_{nk} уже ортогональны между собой и мы произвели преобразование (18,8), то ортогональность сохранится, если

$$\sum_{r=1}^{s} a_{kr}^* a_{lr} = \delta_{kl}. \tag{18,10}$$

Таким образом, в выборе коэффициентов a_{kl} остается еще известный произвол.

Рассмотрим, наконец, волновые функции сплошного спектра. Для волновых функций сплошного спектра $\psi_F(x)$ условие ортогональности доказывается аналогично (18,3)—(18,5):

$$\int \psi_F^*(x)\,\psi_{F'}(x)\,dV = 0. \tag{18,11}$$

С другой стороны, условие нормировки уже не может быть записано в виде (18,6), так как волновые функции сплошного спектра квадратично не интегрируемы. Интеграл $\int |\psi_F|^2 dV$ для них расходится. Эта расходимость связана с тем, что собственные функции сплошного спектра не обращаются в нуль на бесконечности. Собственные функции сплошного спектра удобно нормировать на δ-функцию Дирака (см. приложение III), так что условия ортогональности и нормировки могут быть выражены аналогично (18,7)

$$\int \psi_F^*(x)\,\psi_{F'}(x)\,dV = \delta(F - F'). \tag{18,12}$$

Нормировка на δ-функцию, конечно, не является единственно возможной. Ниже мы встретимся и с другими способами нормировки собственных функций сплошного спектра (см., например, § 26).

§ 19. Разложение по собственным функциям

В предыдущем параграфе мы доказали, что система собственных функций произвольного линейного самосопряженного оператора является системой ортогональных функций. Оказывается, что такая система функций является полной. Произвольную непрерывную функцию, определенную в той же области изменения независимых переменных и удовлетворяющую широкому классу условий, можно разложить по этой системе собственных функций[1]).

Мы приведем здесь сперва условия полноты системы собственных функций для случая оператора F, обладающего дискретным спектром. Напишем разложение функции ψ в ряд по собственным функциям ψ_n, предполагая последние нормированными на единицу, в виде

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x). \tag{19,1}$$

---

[1]) В. А. Смирнов, Курс высшей математики, Физматгиз, 1958, т. IV, стр. 133.