представлении. Действительно, согласно (46,15) и (45,22)

$$D' = S^+DS, \qquad (D')^+ = S^+D^+(S^+)^+ = S^+D^+S.$$

Так как $D^+ = D$, получаем, что $D' = D'^+$. Унитарное преобразование сохраняет также вид матричных уравнений. Пусть например, имеем уравнения

$$F + D = R; \quad PL = T.$$

Умножая уравнения слева на S^+, а справа на S, соответственно получим, пользуясь (45,9), (46,9)

$$S^+FS + S^+DS = S^+RS, \qquad S^+PSS^+LS = S^+TS.$$

Воспользовавшись (46,15), перепишем эти уравнения в новом представлении

$$F' + D' = R', \qquad P'L' = T'.$$

Как видим, вид уравнений не изменился. Покажем, что при унитарном преобразовании не изменяется также и шпур матрицы

$$\operatorname{Sp} F' = \sum_n F'_{nn} = \sum_{n,\,l,\,k} (S^+)_{nl} F_{lk} S_{kn} =$$
$$= \sum_{l,\,k} F_{lk} \sum_n S_{kn} (S^+)_{nl} = \sum_{l,\,k} F_{lk}\delta_{kl} = \operatorname{Sp} F. \qquad (46,16)$$

При этом мы воспользовались (46,9).

Унитарное преобразование сохраняет также детерминант матрицы. Действительно, поскольку детерминант произведения матриц равен произведению детерминантов $\det FDR = \det F \det D \det R$, то имеем

$$\det F' = \det S^+ \det F \det S = \det F \det(S^+S) = \det F. \qquad (46,17)$$

Детерминант конечной унитарной матрицы по модулю равен единице. Покажем это:

$$|\det S|^2 = (\det S)(\det S)^*,$$

но $(\det S)^* = \det S^+$, так как при транспонировании матрицы детерминант не меняется. Следовательно, получаем:

$$|\det S|^2 = \det S \det S^+ = \det(SS^+) = 1. \qquad (46,18)$$

§ 47. Собственные функции и собственные значения оператора, заданного в матричной форме

Предположим, что оператор $\hat{D}$ в F-представлении задан в виде матрицы D. Посмотрим, как можно найти собственные функции и собственные значения этого оператора. Уравнение для собственных функций и собственных значений в F-представлении имеет вид

$$\sum_k D_{mk} c_k^{(n)} = D_n c_m^{(n)}. \tag{47,1}$$

Здесь D_n n-е собственное значение матрицы D; совокупность амплитуд $c_1^{(n)}$, $c_2^{(n)}$, ... — собственная функция оператора D в F-представлении, отвечающая n-му собственному значению. Если собственную функцию написать в виде матрицы $c^{(n)}$ с одним столбцом, то уравнение (47,1) можно переписать в виде

$$Dc^{(n)} = D_n c^{(n)}. \tag{47,2}$$

Легко видеть, что величины собственных значений не зависят от выбора представления. Действительно, уравнение (47,1) в другом представлении запишется, согласно (46,15) и (46,11), как

$$D' c'^{(n)} = D'_n c'^{(n)}, \tag{47,3}$$

где $D' = S^+DS$, $c' = S^+C$. Подставляя эти значения в (47,3), получим

$$S^+DSS^+c^{(n)} = D'_n S^+ c^{(n)}.$$

Умножая слева на S, мы опять придем к уравнению (47,2), откуда и видно, что $D'_n = D_n$.

Задача нахождения собственных значений матрицы D сводится, таким образом, к нахождению такого унитарного преобразования, которое бы привело матрицу D к диагональному виду. Диагональные элементы такой матрицы, как мы знаем (см. § 44), и являются ее собственными значениями. Итак, если S — искомое унитарное преобразование, то

$$S^+DS = D' \tag{47,4}$$

или, умножая слева на S,

$$DS = SD'.$$

Учитывая, что $(D')_{mn} = D_n \delta_{mn}$, получаем

$$\sum_k D_{mk} S_{kn} = D_n S_{mn} \tag{47,5}$$

или

$$\sum_k (D_{mk} - D_n \delta_{km}) S_{kn} = 0. \tag{47,6}$$

В этих уравнениях неизвестны как матричные элементы S_{kn}, так и собственные значения D_n. Если D — квадратная матрица, имеющая N столбцов и столько же строк, то мы имеем для каждого D_n систему из N уравнений (при $m = 1, 2, \ldots, N$). Поскольку система состоит из однородных линейных уравнений, она имеет нетривиальное решение при условии, что ее детерминант обращается в нуль:

$$\begin{vmatrix} D_{11}-D_a & D_{12} & \dots & D_{1N} \\ D_{21} & D_{22}-D_n & \dots & D_{2N} \\ \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ D_{N1} & D_{N2} & \dots & D_{NN}-D_n \end{vmatrix} = 0. \qquad (47,7)$$

Это уравнение N-й степени относительно неизвестного D_n. Решая его, найдем N корней, которые и будут собственными значениями матрицы D. В частности, некоторые значения могут совпадать между собой, тогда имеет место вырождение. Все собственные значения эрмитовой матрицы D будут вещественными. Действительно, матрица D' также эрмитова (см. § 46), а следовательно, $(D')_{nn}=(D')^*_{nn}$ или $D_n=D^*_n$. Подставляя значение D_1, D_2 ... D_N в систему (47,6), мы для каждого D_n определяем совокупность матричных элементов $S_{kn}(S_{1n}, S_{2n} \dots)$, т. е. в конечном счете определяем матрицу унитарного преобразования S.

Сравнивая (47,5) с (47,1), мы видим, что каждый столбец $\begin{Bmatrix} S_{1n} \\ S_{2n} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ S_{Nn} \end{Bmatrix}$ матрицы S является собственной функцией оператора $\hat{D}$ в F-представлении, отвечающей данному собственному значению D_n. Зная матрицу S, мы можем найти совокупность собственных функций оператора $\hat{D}$ и в x-представлении. Действительно, если в первоначальном F-представлении базисными функциями была совокупность $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ ... собственных функций оператора $\hat{F}$, то в новом представлении, в котором диагональна матрица D (D-представлении) базисными будут собственные функции $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ ... оператора $\hat{D}$. Связь между ними дается формулой (46,5), которая и определяет функции $\varphi_k(x)$

$$\varphi_k(x) = \sum_l S_{lk}\psi_l(x). \qquad (47,8)$$

Если мы имеем две матрицы F и D, то с помощью одного и того же унитарного преобразования S их можно одновременно привести к диагональному виду только в том случае, если они коммутируют, т. е. если $FD = DF$. Действительно, предположим, что F и D приведены к диагональному виду, соответственно F'

и D'. Образуем матрицу $F'D'$:

$$(F'D')_{mn} = \sum_k F'_{mk}D'_{kn} = F'_{mm}D'_{mn}\delta_{mn} = (D'F')_{mn}. \qquad (47,9)$$

Следовательно,

$$F'D' = D'F'.$$

Поскольку при унитарном преобразовании вид матричного уравнения не меняется (см. § 46), то в исходном представлении имеем $FD = DF$.

Мы доказали, таким образом, что коммутация матриц необходима для того, чтобы их можно было привести одновременно к диагональному виду. Легко показать, что это условие является также и достаточным.

В этом параграфе мы всюду предполагали, что имеем дело с конечными матрицами. Если, однако, число строк и столбцов N стремится к бесконечности, то математически вопрос существенно усложняется. Система (47,6) будет теперь системой из бесконечно большого числа уравнений. Бесконечно высокой степени будет и уравнение (47,7). Можно показать, однако, что и в этом случае произвольная эрмитова матрица с помощью некоторого унитарного преобразования приводится к диагональному виду с действительными собственными значениями. Мы не будем останавливаться на доказательстве этого положения.

§ 48. Непрерывные матрицы. Обозначения Дирака

До сих пор при обсуждении свойств матриц мы считали, что переменные пробегают дискретный ряд значений. Ясно, однако, что предыдущие результаты должны быть обобщены на случай переменных, изменяющихся непрерывно.

Оказывается, что это обобщение можно провести непосредственно. Все полученные выше формулы остаются справедливыми, если в них все суммы заменены на соответствующие интегралы. Например, формула (45,6) для матричного элемента от произведения двух матриц теперь будет иметь вид

$$L = FD,$$

$$L_{\alpha\beta} = \int F_{\alpha\gamma}D_{\gamma\beta}\,d\gamma. \qquad (48,1)$$

Интегрирование проводится по всей области изменения соответствующей переменной. Единичная матрица I определяется теперь равенством

$$(1)_{\alpha\beta} = \delta(\alpha - \beta), \qquad (48,2)$$