Раздел II. ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА

§ 5. Собственные значения и собственные функции эрмитового оператора

Рассмотрим уравнение на собственные значения

$$A\psi_a = a\psi_a. \tag{9}$$

В этом разделе мы будем рассматривать только собственные функции ψ_a, *принадлежащие пространству Гильберта*. Следовательно, всюду подразумевается только дискретный спектр собственных значений. Общее исследование, включающее и непрерывный спектр (если он существует), будет проведено в разделе III.

Поскольку A есть линейный оператор, то:

1. Если ψ_a есть собственная функция, то $c\psi_a$, где c — произвольная постоянная, также есть собственная функция, принадлежащая тому же собственному значению. Чтобы фиксировать эту постоянную, обычно собственные функции *нормируют* на единицу:

$$\langle\psi_a, \psi_a\rangle = 1.$$

После этого функция ψ_a определена с точностью до произвольной постоянной фазы.

2. Если две линейно независимые функции $\psi_a^{(1)}, \psi_a^{(2)}$ [5]) принадлежат одному и тому же собственному значению, то то же самое имеет место для любой линейной комбинации этих функций. Говорят, что в этом случае имеется *вырождение*. Максимальное число линейно независимых собственных функций, принадлежащих одному собственному значению, называется *порядком* (или кратностью) вырождения данного собственного значения (мы уже встречали примеры вырождения второго порядка в гл. III при изучении непрерывного спектра).

Из определения эрмитовости и свойства (8) получаем два фундаментальных результата.

1°. *Все собственные значения вещественны.* В самом деле, умножая скалярно обе стороны уравнения (9) слева на функцию ψ_a, обнаруживаем, что a равно среднему значению A в динамическом состоянии ψ_a

$$a = \frac{\langle\psi_a, A\psi_a\rangle}{\langle\psi_a, \psi_a\rangle},$$

а эта величина, по определению эрмитовости, вещественна.

---

[5]) Две функции ψ_1 и ψ_2 линейно независимы, если не существует отличных от нуля постоянных λ_1, λ_2 таких, что $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 = 0$.

2°. *Две собственные функции, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны друг другу* (см. § III. 13). *Пусть*

$$A\psi_1 = a_1\psi_1, \quad A\psi_2 = a_2\psi_2.$$

Умножая первое уравнение слева на ψ_2, а второе уравнение — справа на ψ_1 и вычитая, получаем, учитывая свойство (8),

$$0 = \langle\psi_2, A\psi_1\rangle - \langle A\psi_2, \psi_1\rangle = (a_1 - a_2)\langle\psi_2, \psi_1\rangle.$$

Следовательно, если $a_1 \neq a_2$, то

$$\langle\psi_2, \psi_1\rangle = 0.$$

Таким образом, *две собственные функции* ψ_1, ψ_2, *принадлежащие различным собственным значениям*, линейно независимы. Действительно, предположим, что можно найти два числа λ_1 и λ_2 таких, что

$$\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 = 0.$$

Умножая каждый член левой части уравнения слева на ψ_1, получаем, учитывая свойство ортогональности,

$$\lambda_1\langle\psi_1, \psi_1\rangle = 0$$

и следовательно λ_1 равно нулю. Аналогично показываем, что $\lambda_2 = 0$.

Если собственное значение a вырождено и кратность вырождения равна n, то каждая собственная функция, соответствующая этому собственному значению, может быть представлена в виде линейной комбинации n линейно независимых собственных функций $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \ldots, \psi^{(n)}$ какого-либо частного выбора. Существует большой произвол в выборе этих базисных собственных функций. Однако всегда можно добиться, чтобы они были нормированы на единицу и были ортогональны друг другу. Для этого, исходя из произвольной совокупности линейно независимых функций $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \ldots, \psi^{(n)}$, можно, например, провести следующие операции (*процесс ортогонализации Шмидта*): определяем $\varphi^{(1)}$ равенством

$$c_1\varphi^{(1)} = \psi^{(1)},$$

находим постоянную c_1 из условия $\langle\varphi^{(1)}, \varphi^{(1)}\rangle = 1$, так что

$$|c_1|^2 = \langle\psi^{(1)}, \psi^{(1)}\rangle.$$

Определяем $\varphi^{(2)}$ равенством

$$c_2\varphi^{(2)} = \psi^{(2)} - \varphi^{(1)}\langle\varphi^{(1)}, \psi^{(2)}\rangle.$$

Левая часть не равна нулю, поскольку $\psi^{(1)}$ и $\psi^{(2)}$ линейно независимы. Ясно, что $\langle\varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}\rangle = 0$. Выбираем c_2 из условия

$\langle\varphi^{(2)}, \varphi^{(2)}\rangle = 1$. Далее, определяем $\varphi^{(3)}$ равенством

$$c_3\varphi^{(3)} = \psi^{(3)} - \varphi^{(1)}\langle\varphi^{(1)}, \psi^{(3)}\rangle - \varphi^{(2)}\langle\varphi^{(2)}, \psi^{(3)}\rangle.$$

Эта функция, очевидно, не равна нулю, ортогональна к $\varphi^{(1)}$ и $\varphi^{(2)}$ и может быть нормирована соответствующим выбором c_3. И так далее. Полученные таким образом n функций $\varphi^{(1)}, \ldots, \varphi^{(n)}$ удовлетворяют $n(n+1)/2$ соотношениям

$$\langle\varphi^{(l)}, \varphi^{(m)}\rangle = \delta_{lm} \qquad (l, m = 1, 2, \ldots, n),$$

где δ_{lm} — символ Кронекера:

$$\delta_{lm} = \begin{cases} 1, & \text{если } l = m, \\ 0, & \text{если } l \neq m. \end{cases}$$

Говорят, что эти функции образуют совокупность *ортонормированных функций.*

Изучение вырожденных собственных значений должно быть дополнено следующим утверждением, которое мы примем без доказательства [3]). Если кратность вырождения бесконечна, т. е. если можно найти произвольно большое число линейно независимых собственных функций, принадлежащих этому собственному значению, то всегда можно построить последовательность (бесконечную счетную) $\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \ldots, \varphi^{(r)}, \ldots$ ортонормированных собственных функций, такую, что всякая собственная функция, принадлежащая данному собственному значению, может быть разложена в ряд по этим функциям.

Можно также показать [3]), что собственные значения образуют *дискретную* последовательность (конечную или бесконечную счетную) $a_1, a_2, \ldots, a_p, \ldots$ Это свойство является характерным для собственных значений, собственные функции которых *принадлежат пространству Гильберта.*

§ 6. Разложение волновой функции в ряд по ортонормированным собственным функциям

Как мы видели, каждому собственному значению a_p оператора A соответствует последовательность *ортонормированных собственных функций*

$$\varphi_p^{(1)}, \varphi_p^{(2)}, \ldots, \varphi_p^{(r)}, \ldots,$$

содержащая один элемент, конечное число элементов или бесконечное число элементов, если собственное значение является соответственно невырожденным, вырожденным с конечной кратностью или вырожденным с бесконечной кратностью. Обозначим символом $\{\varphi_p^{(r)}\}$ множество, образованное всеми этими функциями. Всякая функция из этого множества удовлетворяет соотношениям:

$$A\varphi_p^{(r)} = a_p \varphi_p^{(r)}, \tag{12}$$

$$\left\langle \varphi_p^{(r)}, \varphi_q^{(s)} \right\rangle = \delta_{pq}\delta_{rs}. \tag{13}$$

Возникает вопрос о возможности представления произвольной волновой функции ψ из пространства Гильберта в виде функционального ряда по функциям системы $\{\varphi_p^{(r)}\}$. Это, очевидно, возможно, если ψ есть собственная функция оператора A, и в этом случае единственно отличными от нуля членами ряда будут члены, соответствующие функциям, принадлежащим тому же собственному значению. Если это возможно для произвольной функции ψ, говорят, что $\{\varphi_p^{(r)}\}$ есть *полная система.*

Укажем без доказательства [3]) некоторые свойства разложений в ряд по ортонормированным системам функций.

Пусть $u_1, u_2, \ldots, u_n, \ldots$ последовательность ортонормированных функций.

1) Если ψ разлагается в ряд по этим функциям

$$\psi = \sum_n c_n u_n,$$

то коэффициенты разложения определяются формулой

$$c_n = \langle u_n, \psi \rangle$$

и удовлетворяют *равенству Парсеваля*

$$\sum_n |c_n|^2 = \langle \psi, \psi \rangle.$$

2) Обратно, если числовой ряд $\sum\limits_n |c_n|^2$ сходится к числу N, то разложение $\sum\limits_n c_n u_n$ сходится (в смысле среднего квадратичного) к функции ψ с нормой N.

3) Если функциональные ряды $\sum\limits_n c_n u_n$ и $\sum\limits_n d_n u_n$ сходятся соответственно к ψ и φ, то ряд $\sum\limits_n d_n^* c_n$ сходится к скалярному произведению φ на ψ

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \sum_n d_n^* c_n.$$

4) Какой бы ни была квадратично интегрируемая функция ψ, ряд

$$\hat{\psi} = \sum_n u_n \langle u_n, \psi \rangle$$

сходится всегда; разность $\psi - \hat{\psi}$ ортогональна ко всем функциям u_n, а норма ее равна $\langle\psi, \psi\rangle - \langle\hat{\psi}, \hat{\psi}\rangle$. Таким образом, всегда

$$\langle\psi, \psi\rangle \geqslant \langle\hat{\psi}, \hat{\psi}\rangle;$$

если реализуется равенство, то $\psi = \hat{\psi}$.

Все эти свойства сохраняются при нумерации функции u несколькими дискретными индексами. Следовательно, они выполняются и для системы $\{\varphi_p^{(r)}\}$. В частности, если система $\{\varphi_p^{(r)}\}$ полна, то любая волновая функция Ψ может быть представлена рядом

$$\Psi = \sum_{p,\, r} c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}, \tag{14}$$

коэффициенты которого равны

$$c_p^{(r)} = \langle\varphi_p^{(r)}, \Psi\rangle \tag{15}$$

и удовлетворяют равенству Парсеваля

$$\sum_{p,\, r} |c_p^{(r)}|^2 = \langle\Psi, \Psi\rangle. \tag{16}$$

Кроме того скалярное произведение двух волновых функций Ψ_1, Ψ_2 может быть представлено в виде

$$\langle\Psi_1, \Psi_2\rangle = \sum_{p,\, r} \langle\Psi_1, \varphi_p^{(r)}\rangle \langle\varphi_p^{(r)}, \Psi_2\rangle. \tag{17}$$

Если не преследовать целей математической строгости, то уравнения (15) и (16) легко получаются, если подставить (14) в правые части этих уравнений и воспользоваться соотношениями ортонормированности (13). Равенство (17) получается аналогичным образом.

Бросается в глаза аналогия с обычным комплексным векторным пространством. Полная ортонормированная система функций играет роль базисной системы ортогональных друг другу векторов единичной длины. Функция Ψ есть вектор в этом пространстве (с бесконечным числом измерений), коэффициенты $\langle c_p^{(r)}, \Psi\rangle$ суть компоненты по направлениям базисных векторов (уравнение (15)), а норма этого вектора равна сумме квадратов модулей составляющих (уравнение (16)). Скалярное произведение Ψ_2 на Ψ_1 равно сумме произведений каждой компоненты Ψ_2 на величину, комплексно сопряженную соответствующей компоненте Ψ_1.

§ 7. Статистическое распределение результатов измерений величины, оператор которой обладает полной системой собственных функций с конечной нормой

Возможность представить всякую волновую функцию Ψ разложением типа (14) существенно облегчает изучение всех проблем, касающихся оператора A. Предположим, что оператор A обладает полной системой ортонормированных собственных функций (примером может служить гамильтониан гармонического осциллятора, рассмотренный далее в гл. XII). Выбор такой системы несомненно не является единственным, всегда можно изменить фазы функций или, например, заменить ортонормированные функции, принадлежащие одному собственному значению, ортонормированными линейными комбинациями этих функций. Однако результаты, которые будут получены ниже, не зависят от конкретного выбора системы.

A priori функция $A\Psi$ не обязана быть квадратично интегрируемой. Однако, согласно (14),

$$A\Psi = \sum_{p,\, r} c_p^{(r)} A \varphi_p^{(r)} = \sum_{p,\, r} a_p c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}.$$

Этот ряд сходится (§ 6, свойства 1) и 2)) в том и только в том случае, если сходится ряд $\sum\limits_{p,\, r} a_p^2 \left| c_p^{(r)} \right|^2$, и тогда сумма числового ряда равна норме $A\Psi$. Мы получаем критерий принадлежности $A\Psi$ пространству Гильберта.

Аналогичные выводы можно сделать относительно функции $A^2\Psi$. В самом общем случае, исходя из функции $F(x)$ и основываясь на разложении (14) при условии его сходимости, можно определить оператор $F(A)$ как функцию оператора A. Его действие на функцию Ψ определяется равенством

$$F(A)\Psi = \sum_{p,\, r} F(a_p)\, c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}.$$

Оператор вполне определен, если данный функциональный ряд сходится, т. е. определен для всех тех функций Ψ, для которых сходится числовой ряд

$$\sum_{p,\, r} \left| F(a_p) \right|^2 \left| c_p^{(r)} \right|^2.$$

Читатель легко проверит, что определенная таким образом функция $F(A)\Psi$ не зависит от конкретного выбора системы $\{\varphi_p^{(r)}\}$.

В частности, оператор $e^{i\xi A}$, где ξ некоторый заданный параметр, определен для всех функций, принадлежащих пространству

Гильберта. Действительно,

$$e^{i\xi A}\Psi = \sum_{p,\,r} e^{i\xi a_p} c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}, \tag{18}$$

причем критерий сходимости функционального ряда сводится к сходимости числового ряда $\sum_{p,\,r} |c_p^{(r)}|^2$, что всегда имеет место, если Ψ принадлежит пространству Гильберта.

Теперь мы уже можем определить статистическое распределение величины $\mathscr{A}$ для любого динамического состояния физической системы. Действительно, характеристическая функция $f(\xi)$ этого распределения[6]), знание которой позволяет полностью описать распределение, есть, по определению, среднее значение величины $e^{i\xi A}$ в этом состоянии. Воспользовавшись постулатом б) из § 3, мы определим это среднее значение выражением

$$f(\xi) = \frac{\langle \Psi, e^{i\xi A}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}$$

(которое всегда имеет смысл, даже если среднее значение A не определено).

Пусть теперь Ψ есть волновая функция, представляющая рассматриваемое динамическое состояние. Пользуясь разложениями (14) и (18), а также выражением (17) для скалярного произведения, находим

$$f(\xi) = \sum_p w_p e^{i\xi a_p},$$

---

[6]) С точностью до постоянного множителя $f(\xi)$ является образом Фурье искомого распределения. Пусть X — случайная величина, принимающая все значения в интервале $(-\infty, +\infty)$, а $P(x)$ — вероятность обнаружить X в интервале $(x, x+dx)$. Тогда характеристическая функция $f(\xi)$ статистического распределения этой случайной величины есть среднее значение $\exp i\xi X$:

$$f(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi x} P(x)\, dx.$$

Если же X может принимать только некоторые дискретные значения $x_1, \ldots, x_n, \ldots$ с вероятностями $w_1, \ldots, w_n, \ldots$, то

$$f(\xi) = \sum_n w_n e^{i\xi x_n}.$$

В более общей форме: если $F(x)$ есть вероятность того, что $X \leqslant x$, то имеем

$$f(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi x}\, dF(x),$$

где интеграл следует понимать в смысле Стильтьеса.

где мы ввели обозначение

$$w_p = \frac{\sum_r |c_p^{(r)}|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \frac{\sum_r |\langle \varphi_p^{(r)}, \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}.$$

Полученное выражение для характеристической функции распределения приводит нас к заключению, что:

1. Величина $\mathscr{A}$ может принимать только значения $a_1, a_2, \ldots$ $\ldots, a_p, \ldots$, т. е. собственные значения сопоставленного ей оператора.

2. Вероятность того, что $\mathscr{A}$ примет значение a_p, есть w_p.

Нетрудно установить, что $\sum_p w_p = 1$ (равенство Парсеваля) и что среднее значение $\mathscr{A}$ дается выражением

$$\langle A \rangle = \sum_p w_p a_p$$

при условии сходимости этого ряда и что в общем случае среднее значение функции $f(A)$, если оно существует, выражается формулой

$$\langle f(A) \rangle = \sum_p w_p f(a_p). \tag{19}$$

В частности, для того чтобы $\mathscr{A}$ с достоверностью принимало какое-либо заданное значение, необходимо и достаточно, чтобы Ψ являлась собственной функцией, принадлежащей этому собственному значению, в согласии с выводами § 4.

Полученные результаты можно представить в форме, которая делает еще более наглядным тот факт, что они не зависят от выбора системы функций $\{\varphi_p^{(r)}\}$. Действительно, функция Ψ_p, определенная равенством

$$\Psi_p = \sum_r \varphi_p^{(r)} \langle \varphi_p^{(r)}, \Psi \rangle,$$

очевидно не зависит от этого выбора (см. задачу 4). Тогда разложение (14) может быть представлено в форме

$$\Psi = \sum_p \Psi_p. \tag{20}$$

Иначе говоря, можно (и это уже единственным образом) представить Ψ в виде суперпозиции собственных функций оператора A, принадлежащих различным собственным значениям. Тогда вероятность w_p найти значение a_p равна отношению норм Ψ_p и Ψ:

$$w_p = \frac{\langle \Psi_p, \Psi_p \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \tag{21}$$