то действие этого оператора на кет-векторы $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ пространства-произведения определяется формулой

$$A^{(1)}\,|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = |\,v^{(1)}u^{(2)}\rangle, \tag{19}$$

а его действие на произвольный кет-вектор пространства-произведения получается с помощью линейной суперпозиции. Аналогично каждый линейный оператор $A^{(2)}$ пространства $\mathscr{E}^{(2)}$ позволяет определить линейный оператор в пространстве-произведении.

Каждый из операторов $A^{(1)}$ коммутирует с каждым из операторов $A^{(2)}$

$$[A^{(1)},\ A^{(2)}] = 0.$$

Нетрудно проверить, пользуясь самими определениями операторов $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$, что действие коммутатора на всякий вектор $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ дает нуль:

$$A^{(1)}A^{(2)}\,|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = |\,v^{(1)}v^{(2)}\rangle = A^{(2)}A^{(1)}\,|u^{(1)}u^{(2)}\rangle.$$

В пространстве-произведении можно определить соответствие между кет- и бра-векторами, действие линейных операторов на бра-векторы и т. д. Алгебраические правила, указанные выше, остаются справедливыми для всех алгебраических операций в пространстве-произведении. Доказательство этих результатов не составляет труда и будет здесь опущено.

Раздел II. ЭРМИТОВЫ ОПЕРАТОРЫ, ПРОЕКТОРЫ И НАБЛЮДАЕМЫЕ

§ 7. Сопряженные операторы и правила сопряжения

Исходя из взаимооднозначного соответствия между сопряженными бра- и кет-векторами, можно получить аналогичное правило сопряжения между линейными операторами.

Пусть A — линейный оператор. Пусть $|v\rangle$ есть кет-вектор, сопряженный бра-вектору $\langle u|A$. Вектор $|v\rangle$ зависит от бра-вектора $\langle u|$ антилинейно, следовательно, это линейная функция $|u\rangle$. Такое линейное соответствие определяет линейный оператор, который называют оператором, *эрмитово сопряженным* A, или оператором, *присоединенным к* A, и обозначают символом $A^\dagger$:

$$|\,v\rangle = A^\dagger\,|\,u\rangle.$$

Ясно, что $A^\dagger = 0$, если $A = 0$, и наоборот.

Поскольку $A^\dagger|u\rangle$ есть кет-вектор, сопряженный бра-вектору $\langle u|A$, скалярное произведение этого кет-вектора на произвольный бра-вектор $\langle t|$ есть величина, комплексно сопряженная скалярному произведению $|t\rangle$ на $\langle u|A$ (свойство (8)). Отсюда получаем чрезвычайно важное соотношение

$$\langle t\,|\,A^{\dagger}\,|\,u\rangle = \langle u\,|\,A\,|\,t\rangle^{*}. \tag{20}$$

Так как это равенство справедливо, какими бы ни были $|u\rangle$ и $|t\rangle$, кет-вектор, сопряженный $\langle t|A^{\dagger}$, равен $A|t\rangle$. Следовательно, оператор, эрмитово сопряженный оператору $A^{\dagger}$, есть сам оператор A:

$$(A^{\dagger})^{\dagger} = A. \tag{21}$$

Аналогичным образом получаем следующие фундаментальные соотношения:

$$(cA)^{\dagger} = c^{*}A^{\dagger}, \tag{22}$$

$$(A+B)^{\dagger} = A^{\dagger} + B^{\dagger}, \tag{23}$$

$$(AB)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger}. \tag{24}$$

Отметим перемену порядка сомножителей в правой части (24), дающей выражение для оператора, присоединенного к AB. Далее, оператор, присоединенный к оператору $|u\rangle\langle v|$, есть

$$(|u\rangle\langle v|)^{\dagger} = |v\rangle\langle u|. \tag{25}$$

Эрмитово сопряжение для операторов играет ту же роль, что и сопряжение между бра- и кет-векторами и комплексное сопряжение для чисел. Все эти операции сопряжения имеют большое значение в развиваемом формализме. Обозначения Дирака позволяют производить их без труда в любом алгебраическом выражении. Достаточно следовать таким простым правилам: *все числа заменяются на комплексно сопряженные, все бра на сопряженные кет и наоборот, все операторы — на эрмитово сопряженные, а порядок символов в каждом члене меняется на противоположный* (т. е. порядок бра-векторов, кет-векторов и операторов).

Эти правила являются очевидным обобщением соотношений (20), (24) и (25). Дадим несколько примеров. Оператор, эрмитово сопряженный оператору $AB|u\rangle\langle v|C$, есть оператор $C^{\dagger}|v\rangle\langle u|B^{\dagger}A^{\dagger}$; бра-вектор, сопряженный кет-вектору $AB|u\rangle\langle v|C|w\rangle$, есть вектор $\langle w|C^{\dagger}|v\rangle\langle u|B^{\dagger}A^{\dagger}$; величина, комплексно сопряженная $\langle t|AB|u\rangle\langle v|C|w\rangle$, есть

$$\langle w|C^{\dagger}|v\rangle\langle u|B^{\dagger}A^{\dagger}|t\rangle$$

и т. д.

§ 8. Эрмитовы (самосопряженные) операторы, положительно определенные операторы, унитарные операторы

По определению линейный оператор H называется *эрмитовым*, если он является сопряженным самому себе

$$H = H^{\dagger}.$$

Оператор I называется *антиэрмитовым*, если

$$I = -I^{\dagger}.$$

Из этих определений нетрудно получить следующие свойства операторов.

Всякий линейный оператор может быть представлен (и единственным образом) в виде суммы двух операторов, одного эрмитового, а другого антиэрмитового

$$A = H_A + I_A, \tag{26}$$

причем

$$H_A = \frac{A + A^{\dagger}}{2}, \quad I_A = \frac{A - A^{\dagger}}{2}. \tag{27}$$

Всякая линейная комбинация эрмитовых операторов с *вещественными* коэффициентами есть эрмитов оператор. Произведение HK двух эрмитовых операторов H и K не обязательно эрмитово, ибо, согласно (24),

$$(HK)^{\dagger} = KH. \tag{28}$$

Оператор HK эрмитов только при условии, что H и K коммутируют. Впрочем, коммутатор $[H, K]$ есть антиэрмитов оператор, и разложение (26) произведения HK записывается в виде

$$HK = \frac{HK + KH}{2} + \frac{1}{2}[H, K]. \tag{29}$$

Оператор $|a\rangle\langle a|$ является эрмитовым оператором. С помощью двух различных кет-векторов можно образовать два эрмитовых оператора $|a\rangle\langle a|$ и $|b\rangle\langle b|$, но произведение этих двух операторов $|a\rangle\langle a|b\rangle\langle b|$ пропорционально оператору $|a\rangle\langle b|$, который не является эрмитовым; таким образом, это произведение не эрмитов оператор (кроме случая, когда $|a\rangle$ и $|b\rangle$ ортогональны друг другу, но в этом случае произведение равно нулю).

Говорят, что эрмитов оператор H является *положительно определенным*, если

$$\langle u | H | u \rangle \geqslant 0, \text{ каким бы ни был } |u\rangle.$$

Оператор $|a\rangle\langle a|$ есть положительно определенный эрмитов оператор.

Операторы этого типа обладают замечательными свойствами (см. задачи 7 и 8). В частности, если H — положительно определенный эрмитов оператор, имеет место обобщенное неравенство Шварца

$$|\langle u | H | v\rangle|^2 \leqslant \langle u | H | u\rangle \langle v | H | v\rangle$$

при любых $|u\rangle$ и $|v\rangle$; равенство реализуется в том и только в том случае, когда $H|u\rangle$ и $H|v\rangle$ пропорциональны друг другу. Кроме того, из равенства

$$\langle u | H | u\rangle = 0$$

необходимо следует $H|u\rangle = 0$.

Оператор U называется *унитарным*, если он является обратным к своему сопряженному:

$$UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = 1.$$

Произведение $W = UV$ двух унитарных операторов U, V есть унитарный оператор. Действительно (свойства (15) и (24)),

$$W^{-1} = V^{-1}U^{-1} = V^{\dagger}U^{\dagger} = W^{\dagger}.$$

§ 9. Проблема собственных значений и наблюдаемые

Пусть A — линейный оператор. Тогда, по определению, комплексное число a есть собственное значение A, а кет-вектор $|u\rangle$ есть собственный кет-вектор, принадлежащий a, если

$$A|u\rangle = a|u\rangle.$$

Аналогично $\langle u'|$ есть собственный бра-вектор, принадлежащий a', если

$$\langle u' | A = a' \langle u' |.$$

Если $|u\rangle$ — собственный кет-вектор A, то любой вектор типа $c|u\rangle$ также есть собственный кет-вектор, принадлежащий тому же собственному значению; если существует несколько линейно независимых векторов, относящихся к одному собственному значению, то всякая линейная комбинация этих кет-векторов также принадлежит тому же собственному значению. Иными словами, множество собственных кет-векторов, принадлежащих одному данному собственному значению, образует векторное пространство; будем называть его *подпространством, относящимся к собственному значению a*. Если это подпространство одномерно, говорят, что собственное значение простое, или невырожденное. В противном случае имеет место *вырож-*

дение, причем порядок вырождения по определению равен числу измерений соответствующего подпространства; может случиться, что вырождение имеет и бесконечный порядок.

Те же замечания относятся к собственным бра-векторам. Если A — произвольный линейный оператор, то никакой простой связи между проблемой собственных значений для кет-векторов и проблемой собственных значений для бра-векторов не существует. Однако в практически важном случае эрмитового оператора A эти проблемы тесно связаны между собой.

Если A эрмитов оператор, то:

1) оба спектра собственных значений идентичны;

2) все собственные значения вещественны;

3) всякий бра-вектор, сопряженный собственному кет-вектору оператора A, является собственным бра-вектором, относящимся к тому же собственному значению, и наоборот; иными словами, подпространство собственных бра-векторов, относящееся к данному собственному значению, дуально подпространству собственных кет-векторов, относящемуся к тому же собственному значению.

Доказательство свойства 2) с точностью до обозначений совпадает с приведенным в § V.5. Если $A = A^{+}$ и $A|u\rangle = a|u\rangle$, то

$$\langle u|A|u\rangle = a\langle u|u\rangle$$

и, поскольку,

$$\langle u|A|u\rangle^{*} = \langle u|A^{+}|u\rangle = \langle u|A|u\rangle,$$

$\langle u|A|u\rangle$ вещественно вместе с $\langle u|u\rangle$, поэтому a вещественно. То же доказательство можно провести для собственного значения, относящегося к бра-вектору.

Кроме того, поскольку всякое собственное значение вещественно, равенство $A|u\rangle = a|u\rangle$ влечет за собой $\langle u|A = a\langle u|$ и обратно; отсюда без труда получаются свойства 1) и 3).

Другим важным свойством собственных векторов, принадлежащих различным собственным значениям, является свойство их *ортогональности*. Доказательство не отличается от приведенного в § V.5. Если $|u\rangle$ и $|v\rangle$ — собственные кет-векторы, принадлежащие различным собственным значениям a и b:

$$A|u\rangle = a|u\rangle, \quad \langle v|A = b\langle v|,$$

то, умножая первое уравнение скалярно слева на $\langle v|$, а второе — справа на $|u\rangle$ и вычитая одно из другого, получим

$$0 = (a - b)\langle v|u\rangle.$$

Поэтому, если $a \neq b$, то

$$\langle v \mid u \rangle = 0.$$

Во всех этих рассуждениях молчаливо предполагается, что собственные векторы принадлежат пространству Гильберта. Но такая постановка проблемы собственных значений оказывается слишком ограниченной и не может удовлетворить всем потребностям квантовой теории. В качестве допустимых собственных решений мы должны рассматривать также и векторы с бесконечной нормой, удовлетворяющие условиям, упомянутым в конце § 4. Эти векторы принадлежат собственным значениям из *непрерывного спектра.*

Трудности, возникающие при исследовании непрерывного спектра, подробно обсуждались в гл. V и мы не будем возвращаться к ним здесь. Основные результаты могут быть без труда выражены в наших новых обозначениях. Свойства 1), 2) и 3) остаются справедливыми в случае непрерывного спектра. Что же касается свойства ортогональности, то его удобно записывать с помощью δ-функции Дирака.

Вернемся в качестве примера к эрмитовому оператору из § V. 9, спектр собственных значений которого содержит ряд дискретных значений a_n и непрерывную часть $a(\nu)$. Собственные функции $\varphi_n^{(r)}$, относящиеся к собственному значению a_n, представляют ортонормированные кет-векторы, которые мы обозначаем символом $|nr\rangle$. Аналогично собственные функции $\varphi^{(r)}(\nu, \rho)$ представляют кет-векторы $|\nu\rho r\rangle$. Соотношения ортонормированности между различными кет-векторами записываются в виде (уравнение (V. 38)):

$$\langle nr \mid n'r' \rangle = \delta_{nn'}\delta_{rr'}, \tag{30а}$$

$$\langle nr \mid \nu'\rho'r' \rangle = 0, \tag{30б}$$

$$\langle \nu\rho r \mid \nu'\rho'r' \rangle = \delta(\nu - \nu')\,\delta(\rho - \rho')\,\delta_{rr'}. \tag{30в}$$

Если множество собственных векторов растягивает все пространство, иначе говоря, если всякий вектор с конечной нормой может быть разложен в ряд (или интеграл) по этим собственным векторам, то говорят, что они образуют *полную* систему и что эрмитов оператор является *наблюдаемой.* Среди эрмитовых операторов пространства $\mathscr{E}$ только наблюдаемые допускают физическую интерпретацию.

Выяснение вопроса о том, является ли заданный эрмитов оператор наблюдаемой, часто является сложной математической задачей. Однако существует очень важный класс операторов, для которых эта задача решается просто — это операторы проектирования.

§ 10. Проекторы (или операторы проектирования)

Пусть S — подпространство пространства Гильберта $\mathscr{E}$, а $S^{\times}$ — его дополнение. Всякий кет-вектор $|u\rangle$ обладает проекцией на подпространство S и проекцией на подпространство $S^{\times}$; эти два вектора $|u_S\rangle$ и $|u_S^{\times}\rangle$ определяются единственным образом, так что

$$|u\rangle = |u_S\rangle + |u_S^{\times}\rangle. \tag{31}$$

Каждому кет-вектору $|u\rangle$ соответствует, таким образом, один и только один кет-вектор $|u_s\rangle$. Легко видеть, что это соответствие линейно. Оно определяет некоторый линейный оператор P_S, который называется *оператором проектирования* на подпространство S (или *проектором* на S):

$$P_S|u\rangle = |u_S\rangle.$$

Это эрмитов оператор. Действительно, каким бы ни был $|v\rangle$,

$$\langle u|P_S|v\rangle = \langle u|v_S\rangle = \langle u_S|v_S\rangle = \langle u_S|v\rangle,$$

следовательно,

$$\langle u|P_S = \langle u_S|.$$

Очевидно, что P_S является наблюдаемой с двумя собственными значениями 0 и 1, подпространствами которых являются, соответственно, $S^{\times}$ и S.

Кроме того, поскольку при любом $|u\rangle$,

$$P_S^2|u\rangle = P_S(P_S|u\rangle) = P_S|u_S\rangle = |u_S\rangle = P_S|u\rangle,$$

P_S удовлетворяет операторному уравнению

$$P_S^2 = P_S.$$

Обратно, можно утверждать, что всякий эрмитов оператор P, удовлетворяющий уравнению

$$P^2 = P, \tag{32}$$

является проектором. Подпространство S, на которое он проектирует, является подпространством, принадлежащим его собственному значению 1.

Действительно, если p есть собственное значение этого оператора, а $|p\rangle$ — один из соответствующих собственных векторов

$$P|p\rangle = p|p\rangle,$$

то, согласно уравнению (32),

$$0 = (P^2 - P)|p\rangle = (p^2 - p)|p\rangle,$$

и, поскольку кет-вектор $|p\rangle$ не равен нулю, $p^2 - p = 0$. Иначе говоря, возможными собственными значениями являются только 0 и 1.

Оператор P есть наблюдаемая, так как всякий вектор $|u\rangle$ может быть представлен в виде суммы собственных векторов оператора P. Действительно, можно написать

$$|u\rangle = P\,|u\rangle + (1 - P)\,|u\rangle. \tag{33}$$

Вектор $P|u\rangle$ есть собственный кет-вектор оператора P, принадлежащий собственному значению 1, так как по уравнению (32)

$$P^2\,|u\rangle \equiv P\,(P\,|u\rangle) = P\,|u\rangle.$$

Вектор же $(1-P)|u\rangle$ есть собственный вектор, принадлежащий собственному значению 0, ибо

$$P\,(1 - P)\,|u\rangle = (P - P^2)\,|u\rangle = 0.$$

Нетрудно проверить, что векторы $P|u\rangle$ и $(1-P)|u\rangle$ ортогональны друг другу, а поэтому сумма их норм равна норме вектора $|u\rangle$. Таким образом, это векторы с конечной нормой, они принадлежат пространству Гильберта.

Пусть S есть подпространство собственных векторов P, относящихся к собственному значению 1. Дополнительное к S подпространство $S^\times$ есть подпространство векторов, ортогональных векторам подпространства S; оно образовано множеством собственных векторов P, принадлежащих собственному значению 0. Согласно разложению (33), действие P на произвольный вектор $|u\rangle$ сводится к проектированию этого вектора на S. Поэтому оператор P и называется оператором проектирования на S. Тогда ясно, что оператор $(1-P)$ есть оператор проектирования на $S^\times$.

Свойство, касающееся нормы $P|u\rangle$, упомянутое выше, может быть переписано в виде

$$0 \leqslant \langle u\,|P|\,u\rangle \leqslant \langle u\,|\,u\rangle. \tag{34}$$

Если $\langle u|P|u\rangle = 0$, то вектор $|u\rangle$ содержится целиком в $S^\times$.

Если $\langle u|P|u\rangle = \langle u|u\rangle$, то вектор $|u\rangle$ содержится целиком в S.

Заслуживают упоминания два предельных случая. Когда подпространство S совпадает с самим пространством $\mathscr{E}$, всякий кет-вектор $|u\rangle$ является своей собственной проекцией: имеем $\langle u|P|u\rangle = \langle u|u\rangle$ при любых $|u\rangle$; подпространство $S^\times$ пусто. Это случай $P = 1$.

Другой крайний случай реализуется тогда, когда подпространство S пусто (дополнительное подпространство $S^\times$ совпадает с самим пространством $\mathscr{E}$): $\langle u|P|u\rangle = 0$ при любом $|u\rangle$. Это случай $P = 0$.

Приведем несколько типичных примеров операторов проектирования.

Пусть кет-вектор $|a\rangle$ нормирован на единицу. Он растягивает одномерное подпространство. Обозначим символом $|u_a\rangle$ проекцию произвольного вектора $|u\rangle$ на это подпространство

$$|u\rangle = |u_a\rangle + |u_a^\times\rangle. \tag{35}$$

Согласно предположению

$$\langle a\,|\,u_a^\times\rangle = 0, \quad |u_a\rangle = c\,|a\rangle.$$

Умножая слева обе стороны уравнения (35) на $\langle a|$, получаем $c = \langle a|u\rangle$. Следовательно

$$|u_a\rangle = |a\rangle\langle a|u\rangle.$$

Таким образом, оператором проектирования на $|a\rangle$ является оператор

$$P_a \equiv |a\rangle\langle a| \qquad (\langle a|a\rangle = 1), \tag{36}$$

Операторы проектирования этого типа мы будем называть *элементарными проекторами.*

Рассмотрим теперь последовательность ортонормированных векторов $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |N\rangle$

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn} \qquad (m, n = 1, 2, \ldots, N).$$

На эти векторы натягивается некоторое подпространство $\mathscr{E}_1$ (с числом измерений N) того пространства, которому принадлежат указанные векторы. Нетрудно показать, что оператор

$$P_1 \equiv \sum_{m=1}^{N} |m\rangle\langle m| \tag{37}$$

является оператором проектирования на $\mathscr{E}_1$.

До сих пор рассматривались только векторы с конечной нормой. Но как мы знаем, можно рассматривать и последовательности кет-векторов $|\xi\rangle$, зависящих от непрерывного индекса, изменяющегося в некоторой области (ξ_1, ξ_2). Предположим, что собственные дифференциалы, образованные из этих кет-векторов, имеют конечную норму и принадлежат исследуемому пространству Гильберта. Поэтому, как было выяснено ранее, любая линейная комбинация этих векторов также принадлежит пространству Гильберта, а множество линейных комбинаций образует подпространство полного пространства Гильберта; это подпространство $\mathscr{E}_2$ натянуто на кет-векторы $|\xi\rangle$. Предположим, далее, что векторы $|\xi\rangle$ удовлетворяют условию «ортонормированности»

$$\langle\xi'|\xi\rangle = \delta(\xi' - \xi). \tag{38}$$

Очевидно, что оператор

$$P_2 \equiv \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\xi\rangle\, d\xi\, \langle\xi| \tag{39}$$

есть оператор проектирования на $\mathscr{E}_2$. На самом деле, вектор

$$P_2|u\rangle \equiv \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\xi\rangle\, d\xi\, \langle\xi|u\rangle,$$

получаемый при действии оператора P_2 на произвольный вектор $|u\rangle$, несомненно принадлежит $\mathscr{E}_2$, ибо выражается в виде линейной комбинации векторов $|\xi\rangle$; напротив, разность $(1-P_2)|u\rangle$ ортогональна каждому вектору последовательности $|\xi\rangle$:

$$\langle\xi'|(1-P_2)|u\rangle=$$

$$=\langle\xi'|u\rangle-\int_{\xi_1}^{\xi_2}\langle\xi'|\xi\rangle\,d\xi\,\langle\xi|u\rangle=\langle\xi'|u\rangle-\int_{\xi_1}^{\xi_2}\delta(\xi'-\xi)\,d\xi\,\langle\xi|u\rangle=0$$

и, следовательно, ортогональна $\mathscr{E}_2$.

§ 11. Алгебра проекторов

Проекторы, действующие в пространстве Гильберта, имеют простой геометрический смысл и поэтому представляют большой интерес[5]. Приведем здесь основные положения алгебры этих операторов. Ввиду того, что доказательства в большинстве случаев вполне элементарны, мы ограничимся указанием только принципа, оставляя читателю возможность провести рассуждения до конца.

Пусть P_i, P_j — операторы проектирования на подпространства $\mathscr{E}_i$, $\mathscr{E}_j$ пространства Гильберта $\mathscr{E}$. Чтобы *произведение*

$$P_{[ij]}\equiv P_iP_j$$

также было оператором проектирования необходимо и достаточно, чтобы P_i и P_j коммутировали.

Условие это необходимо, ибо без него $P_{[ij]}$ не был бы эрмитовым оператором. Но оно и достаточно, так как в этом случае $P_{[ij]}$ эрмитов оператор, причем

$$P_{[ij]}^2=P_iP_jP_iP_j=P_i^2P_j^2=P_iP_j=P_{[ij]}.$$

Соответствующее подпространство $\mathscr{E}_{[ij]}$ есть *пересечение* подпространств $\mathscr{E}_i$ и $\mathscr{E}_j$, т. е. подпространство векторов, общих для $\mathscr{E}_i$ и $\mathscr{E}_j$. Здесь возможны два крайних случая: тот, когда $\mathscr{E}_{[ij]}$ идентично одному из двух указанных подпространств, и тот, когда $\mathscr{E}_{[ij]}$ пусто. В первом случае, например, $\mathscr{E}_j$ является подпространством $\mathscr{E}_i$, во втором — подпространства $\mathscr{E}_i$ и $\mathscr{E}_j$ ортогональны.

Нетрудно, далее, доказать следующие два положения.

---

[5]) Рассмотрение проблемы непрерывного спектра методом фон Неймана основано на систематическом изучении свойств проекторов в пространстве Гильберта; этот метод дает возможность преодолеть все трудности непрерывного спектра, не выходя из пространства Гильберта (см. книги, цитированные в сноске V.[3]).

Чтобы $\mathscr{E}_j$ было подпространстом $\mathscr{E}_i$ (т. е. чтобы каждый вектор подпространства $\mathscr{E}_j$ был вектором подпространства $\mathscr{E}_i$) необходимо и достаточно, чтобы

$$P_i P_j = P_j.$$

Чтобы $\mathscr{E}_i$ и $\mathscr{E}_j$ были ортогональны, необходимо и достаточно выполнение равенства

$$P_i P_j = 0. \tag{40}$$

В этом случае говорят, что *проекторы ортогональны.*

Что касается *суммы проекторов*, то здесь мы имеем важную теорему:

Пусть P_i, P_j, P_k, ... операторы проектирования на подпространства $\mathscr{E}_i$, $\mathscr{E}_j$, $\mathscr{E}_k$, ... соответственно. Чтобы их сумма $P_i + P_j + P_k + \ldots$ также была оператором проектирования, необходимо и достаточно чтобы эти операторы были попарно ортогональны. Подпространство, на которое осуществляется проекция, есть в этом случае *прямая сумма*, или *объединение* подпространств $\mathscr{E}_i$, $\mathscr{E}_j$, $\mathscr{E}_k$, ... (т. е. множество векторов, получаемое линейной суперпозицией векторов, принадлежащих каждому из этих подпространств).

Условие ортогональности, очевидно, достаточно. Чтобы доказать его необходимость, достаточно доказать его для случая сумм двух операторов $S = P_i + P_j$. Оператор S, очевидно, эрмитов. Чтобы выполнялось условие $S^2 = S$, необходимо, чтобы $P_i P_j + P_j P_i = 0$. Умножная это уравнение на P_i сначала слева, а потом справа, получаем

$$P_i P_j + P_i P_j P_i = P_i P_j P_i + P_j P_i = 0,$$

откуда

$$P_i P_j = P_j P_i = \frac{1}{2}(P_i P_j + P_j P_i) = 0.$$

Оператор P_1 из уравнения (37) является примером суммы ортогональных проекторов. Операторы проектирования $|m\rangle\langle m|$, фигурирующие в этой сумме, являются элементарными проекторами. Ясно, что пространство $\mathscr{E}_1$, на которое осуществляется проектирование, является объединением пространств, на которые проектируют отдельные операторы, входящие в сумму. Будучи объединением N одномерных пространств, пространство $\mathscr{E}_1$ имеет N измерений, а оператор P_1 является суммой N элементарных ортогональных проекторов.

Если $N \neq 1$, то P_1 представляется в этой форме бесчисленным числом способов. Действительно, обозначим символом $\{n\}$ последовательность $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |N\rangle$ из N ортонормированных векторов, принадлежащих $\mathscr{E}_1$. Последовательность $\{n\}$ образует базисную систему векторов в $\mathscr{E}_1$ в том смысле, что каждый вектор из $\mathscr{E}_1$ может быть линейно выражен через эти N векторов; условимся считать тождественными базисные системы, векторы которых отличаются только фазовыми множителями или порядком расположения в последовательности. При этом очевидно, что

$$P_{\mathrm{I}} = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n|$$

и существует столько выражений для P_{I}, сколько существует различных базисных систем.

Эти рассуждения без труда обобщаются на случай, когда подпространство S, на которое осуществляется проектирование, обладает бесконечным числом измерений. В теории пространства Гильберта доказывается, что всегда можно сделать выбор в $\mathscr{E}$ (и бесчисленным числом способов) базисной системы $\{n\} \equiv \equiv |1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle, \ldots$, содержащей бесконечную счетную последовательность ортонормированных векторов. Проектор P на S может быть представлен в виде *ряда из элементарных ортогональных проекторов*

$$P = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n|.$$

Однако в S можно построить и базисную систему, содержащую кет-векторы, зависящие от непрерывного индекса. Предположим, например, что существует множество (бесконечное континуальное) векторов $|\xi\rangle$ с бесконечной нормой, зависящих от непрерывно изменяющегося индекса и удовлетворяющих условиям «ортонормированности» (38), и предположим также, что подпространство S образовано множеством векторов с конечной нормой, образованных путем линейной суперпозиции кет-векторов $|\xi\rangle$ из некоторой области (ξ_1, ξ_2). В этом случае P можно также представить в виде (39):

$$P = \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\xi\rangle\, d\xi\, \langle\xi|.$$

В этой форме P все еще можно рассматривать как сумму ортогональных проекторов. Разделим область интегрирования (ξ_1, ξ_2) на некоторое число частичных областей. Тогда P есть сумма проекторов, полученных при интегрировании $|\xi\rangle d\xi\langle\xi|$ по каждой из этих частичных областей. Эти подобласти могут быть выбраны сколь угодно малыми. Обозначим символом δP оператор, полученный интегрированием по бесконечно малому интервалу $(\xi, \xi + d\xi)$:

$$\delta P = \int_{\xi}^{\xi+\delta\xi} |\xi'\rangle\, d\xi'\, \langle\xi'|,$$

тогда P есть сумма бесконечно большого числа операторов δP. Мы будем называть операторы типа δP *дифференциальными проекторами*; пространство проекции, соответствующее оператору этого типа, имеет бесконечное число измерений.

§ 12. Наблюдаемые, обладающие только дискретным спектром

Пусть A — эрмитов оператор. В этом параграфе мы рассмотрим проблему собственных значений, ограничиваясь случаем, когда собственные векторы принадлежат пространству Гильберта. Собственные значения образуют дискретную последовательность $a_1, a_2, \ldots, a_n, \ldots$. Пусть $\mathscr{E}_n$ есть подпространство, принадлежащее собственному значению a_n, P_n — проектор на это подпространство. Если собственное значение a_n невырождено, то $\mathscr{E}_n$ имеет одно измерение и P_n — элементарный проектор. В противном случае всегда можно сделать выбор (и бесчисленным числом способов) базисной системы в $\mathscr{E}_n$: $|n1\rangle, |n2\rangle, \ldots, |nr\rangle, \ldots$, так, что

$$P_n = \sum_r |nr\rangle\langle nr|. \tag{41}$$

Подпространства, принадлежащие различным собственным значениям a_n, a'_n, ортогональны, следовательно

$$P_n P_{n'} = 0 \qquad (n \neq n'). \tag{42}$$

Суммируя проекторы, принадлежащие всем собственным значениям дискретного спектра, получаем проектор

$$P_A \equiv \sum_n P_n, \tag{43}$$

подпространство проекции которого $\mathscr{E}_A$ есть объединение всех $\mathscr{E}_n$; $\mathscr{E}_A$ есть пространство векторов, образованных линейной суперпозицией собственных кет-векторов A, принадлежащих пространству Гильберта.

Если A — наблюдаемая, имеющая только дискретный спектр, то $\mathscr{E}_A$, по определению, совпадает с полным пространством $\mathscr{E}$, иначе говоря

$$P_A \equiv \sum_n P_n = 1. \tag{44}$$

Иногда левую часть этого равенства называют *разложением единицы* по отношению к собственным значениям оператора A. Ясно, что это разложение единственно, т. е. что всякий кет-вектор $|u\rangle$ единственным образом может быть представлен в виде суммы собственных кет-векторов $|u_n\rangle$, каждый из которых принадлежит одному определенному собственному значению. Чтобы написать эту сумму, достаточно применить к $|u\rangle$ каждый член равенства (44):

$$|u\rangle = \sum_n P_n |u\rangle. \tag{45}$$

Согласно определению P_n вектор $P_n|u\rangle$ либо равен нулю, либо есть собственный кет-вектор A, принадлежащий собственному значению a_n, причем это имеет место для любого кет-вектора $|u\rangle$; поэтому имеем

$$(A - a_n) P_n = 0. \tag{46}$$

Умножая почленно уравнение (44) на A, получим, принимая во внимание (46):

$$A = \sum_n a_n P_n. \tag{47}$$

Из этого равенства следует, что наблюдаемая A полностью определяется заданием ее собственных значений и соответствующих подпространств. Выражение (47) для оператора A показывает, кроме того, что оператор A коммутирует со всеми проекторами P_n.

Соотношения (44), (45), (47) характерны для наблюдаемых, обладающих только дискретным спектром, при этом число собственных значений может быть как конечным, так и бесконечным. Мы не будем исследовать здесь вопроса о сходимости соответствующих рядов, эта сходимость всегда имеется.

Особенно удобные выражения получаются, если всюду вместо P_n подставить выражение (41). Так, левая часть уравнения (44) выражается в виде суммы элементарных проекторов и мы получаем *соотношение замкнутости*

$$P_A \equiv \sum_{n,\,r} |nr\rangle\langle nr| = 1. \tag{48}$$

Вместе с соотношениями ортонормированности

$$\langle nr | n'r'\rangle = \delta_{nn'}\delta_{rr'} \tag{49}$$

это условие выражает тот факт, что множество кет-векторов $|nr\rangle$ образует полную ортонормированную систему.

Применяя оператор из (48) к некоторому вектору, получаем разложение

$$|u\rangle = \sum_{n,\,r} |nr\rangle\langle nr|u\rangle \tag{50}$$

в ряд по собственным векторам $|nr\rangle$. Коэффициенты разложения равны скалярным произведениям $\langle nr|u\rangle$ (ср. уравнения

(V.(14—15)). Кроме того

$$\langle u | u\rangle = \langle u | P_A | u\rangle = \sum_{n,\,r} \langle u | nr\rangle \langle nr | u\rangle = \sum_{n,\,r} |\langle nr | u\rangle|^2. \qquad (51)$$

Норма $|u\rangle$ равна сумме квадратов модулей коэффициентов разложения: это есть равенство Парсеваля (ср. уравнение (V.16)).

Наблюдаемая A может быть представлена в виде ряда ортогональных элементарных проекторов. Производя те же операции, которые привели к уравнению (47), получаем

$$A = AP_A = \sum_{n,\,r} | nr\rangle a_n \langle nr |. \qquad (52)$$

§ 13. Наблюдаемые в общем случае и обобщенное соотношение замкнутости

Эрмитов оператор A является наблюдаемой, если векторное пространство $\mathscr{E}_A$ с ограниченной нормой, образованное суперпозицией собственных векторов A, совпадает с полным пространством Гильберта $\mathscr{E}$ или, что то же самое, если оператор P_A проектирования на $\mathscr{E}_A$ равен единице.

Когда спектр полностью дискретен, оператор P_A может быть представлен в виде разложения по элементарным ортогональным проекторам, полученным с помощью собственных векторов A, и условие того, что A есть наблюдаемая, удобно записывать в форме соотношения замкнутости (48). Распространение этого соотношения на общий случай требует введения дифференциальных проекторов — они в случае непрерывного спектра играют ту же роль, что элементарные проекторы при дискретном спектре.

Рассмотрим сначала случай, когда спектр A невырожден. Предполагаем, что спектр содержит непрерывную область, обозначаемую непрерывно изменяющимся индексом ν, и дискретную область с дискретным индексом n. Таким образом, a_n есть собственное значение из дискретной части спектра, $a(\nu)$ — собственное значение из непрерывной части; $a(\nu)$ есть монотонная функция ν, принимающая все промежуточные значения в некотором интервале $(a(\nu_1), a(\nu_2))$. Обозначим с помощью $|n\rangle$ и $|\nu\rangle$ собственные кет-векторы, принадлежащие собственным значениям a_n и $a(\nu)$. Эти кет-векторы ортонормированы, в частности

$$\langle \nu | \nu'\rangle = \delta(\nu - \nu').$$

Оператор

$$\delta P = \int_{\nu}^{\nu+\delta\nu} | \nu'\rangle\, d\nu' \langle \nu' |$$

является оператором проектирования на подпространство, натянутое на кет-векторы $|\nu'\rangle$ из интервала $(\nu, \nu + d\nu)$. Складывая проекторы этого типа, образуем проектор

$$P_c = \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle \, d\nu \, \langle\nu|,$$

который проектирует на подпространство $\mathscr{E}_c$, натянутое на собственные кет-векторы, принадлежащие непрерывному спектру. Это подпространство ортогонально подпространству $\mathscr{E}_d$, натянутому на собственные кет-векторы дискретного спектра, причем проектор на это подпространство равен

$$P_d = \sum_n |n\rangle\langle n|.$$

Условие того, что A есть наблюдаемая, записывается в виде

$$P_A \equiv P_c + P_d = 1$$

или подробнее

$$P_A \equiv \sum_n |n\rangle\langle n| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle \, d\nu \, \langle\nu| = 1. \tag{53}$$

Выполнение соотношения замкнутости (53) является необходимым и достаточным условием того, что множество ортонормированных векторов $|n\rangle$, $|\nu\rangle$ образует полную систему.

Распространение этого результата на случай, когда весь спектр или часть спектра A оказываются вырожденными, не вызывает трудностей. Возьмем в качестве примера случай, рассмотренный в конце § 9. Собственные кет-векторы $|nr\rangle$, $|\nu\rho r\rangle$ удовлетворяют условиям ортонормированности (30). Если кроме того A есть наблюдаемая, т. е. собственные кет-векторы этого оператора составляют полную систему, то они удовлетворяют *условию замкнутости*

$$P_A \equiv \sum_{n,\, r} |nr\rangle\langle nr| + \sum_r \iint |\nu\rho r\rangle \, d\nu \, d\rho \, \langle\nu\rho r| = 1. \tag{54}$$

Как и в случае полностью дискретного спектра удобно использовать соотношение замкнутости при разложении произвольного вектора $|u\rangle$ пространства Гильберта в ряд по базисным кет-векторам наблюдаемой A. Для сокращения записи примем, что спектр A невырожден (соотношение (53)). Тогда

$$|u\rangle = P_A |u\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|u\rangle + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle \, d\nu \, \langle\nu|u\rangle. \tag{55}$$

Аналогично находим обобщенное равенство Парсеваля

$$\langle u | u \rangle = \langle u | P_A | u \rangle = \sum_n |\langle n | u \rangle|^2 + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\langle \nu | u \rangle|^2 d\nu \tag{56}$$

и разложение A в ряд по проекторам

$$A = AP_A = \sum_n | n \rangle a_n \langle n | + \int_{\nu_1}^{\nu_2} | \nu \rangle a(\nu)\, d\nu \langle \nu |. \tag{57}$$

В заключение укажем, что часто бывает удобно заменить условие ортонормированности собственных векторов непрерывного спектра на более общее условие

$$\langle \nu | \nu' \rangle = f(\nu)\, \delta(\nu - \nu'),$$

где $f(\nu)$ — вещественная положительная функция ν. Это эквивалентно умножению каждого вектора на постоянную с модулем $\sqrt{f}$. В этом случае все предшествующее остается справедливым, но только во всех формулах $|\nu\rangle\, d\nu \langle\nu|$ следует заменить на $|\nu\rangle \dfrac{d\nu}{f(\nu)} \langle \nu|$. Аналогично, если условие нормировки (30в) заменить на

$$\langle \nu\rho r | \nu'\rho' r' \rangle = F_r(\nu, \rho)\, \delta(\nu - \nu')\, \delta(\rho - \rho')\, \delta_{rr'},$$

то выражение для P_A в соотношении замкнутости (54) получается путем деления подынтегрального выражения на $F_r(\nu, \rho)$.

§ 14. Функции наблюдаемых

Линейный оператор полностью определен, если известно его действие на векторы, составляющие полную ортонормированную систему собственных векторов; тогда его действие на любую линейную суперпозицию этих векторов получается непосредственно, если, конечно, выполняется условие сходимости в случае бесконечного ряда (условия сходимости уже рассматривались в гл. V). В частности, всякая функция $f(a)$ собственных значений наблюдаемой A позволяет определить линейный оператор $f(A)$ как функцию этой наблюдаемой. Действие $f(A)$ на собственный вектор $|a\rangle$ оператора A, принадлежащий значению a, по определению, есть

$$f(A)\, | a \rangle = f(a)\, | a \rangle. \tag{58}$$

Когда функция f выражается полиномом, это определение получается непосредственным применением правил алгебры операторов, но оно справедливо и в более общих случаях.

Из самого определения следует, что всякий собственный вектор A является собственным вектором $f(A)$. Обратно, если всякий собственный вектор наблюдаемой A есть также собственный вектор линейного оператора F, то этот оператор есть операторная функция A.

Это вполне очевидно, если все собственные значения оператора A невырождены. Поэтому рассмотрим некоторое вырожденное собственное значение и пусть $|a1\rangle$, $|a2\rangle$ суть два линейно независимых собственных вектора, принадлежащих этому собственному значению. По предположению они являются также собственными векторами F:

$$F\,|\,a1\rangle = f_a^{(1)}\,|\,a1\rangle, \qquad F\,|\,a2\rangle = f_a^{(2)}\,|\,a2\rangle.$$

Всякая линейная комбинация данных двух векторов также является собственным вектором F

$$F\,(\lambda_1\,|\,a1\rangle + \lambda_2\,|\,a2\rangle) = f_a^{(\lambda)}\,(\lambda_1\,|\,a1\rangle + \lambda_2\,|\,a2\rangle),$$

следовательно,

$$\lambda_1\left(f_a^{(\lambda)} - f_a^{(1)}\right)|\,a1\rangle + \lambda_2\left(f_a^{(\lambda)} - f_a^{(2)}\right)|\,a2\rangle = 0$$

и поскольку $|a1\rangle$ и $|a2\rangle$ линейно независимы,

$$f_a^{(1)} = f_a^{(\lambda)} = f_a^{(2)}.$$

Таким образом, все собственные функции A, принадлежащие одному собственному значению a, являются собственными функциями F, принадлежащими одному собственному значению f: последнее есть некоторая функция a, т. е. $f(a)$; следовательно. действительно $F = f(A)$.

Всякая функция $f(A)$ наблюдаемой A может быть выражена, как и сама наблюдаемая A, в форме линейной комбинации элементарных или дифференциальных проекторов. Предположим для определенности, что A удовлетворяет уравнению (57). Тогда

$$f(A) = f(A)\,P_A = \sum_n |\,n\rangle\, f(a_n)\,\langle n\,| + \int_{\nu}^{\nu_2} |\,\nu\rangle\, f[a(\nu)]\,d\nu\,\langle\nu\,|. \qquad (59)$$

В качестве примеров функций наблюдаемой A укажем проектор на подпространство некоторого собственного значения, проектор на пространство, натянутое на собственные вектора, принадлежащие собственным значениям, лежащим в некоторой области и т. п. Укажем также экспоненциальный оператор $e^{i\xi A}$ (ξ — заданная постоянная) и обратный оператор A^{-1}. Функция $e^{i\xi A}$ определена всегда, обратный оператор A^{-1} определен только, если среди собственных значений оператора A нет нулевого.

§ 15. Операторы, коммутирующие с наблюдаемой. Коммутирующие наблюдаемые

Операторные функции наблюдаемой A принадлежат, вообще говоря, к более широкому классу операторов, а именно *операторов, коммутирующих* с A. Действие таких операторов на собственные векторы A особенно просто. Действительно, если $|a\rangle$ есть собственный вектор

$$A\,|\,a\rangle = a\,|\,a\rangle$$

и если

$$[A,\ X] = 0,$$

то

$$0 = (AX - XA)\,|\,a\rangle = (A - a)\,X\,|\,a\rangle.$$

Таким образом $X|a\rangle$ *есть собственный вектор* A, *принадлежащий тому же собственному значению* (если только вектор не равен нулю).

Обратно, для того чтобы оператор X коммутировал с наблюдаемой A, достаточно, чтобы его действие на каждый вектор полной ортонормированной системы собственных векторов A давало вектор, также являющийся собственным вектором A, принадлежащим тому же собственному значению.

На самом деле если выполняется сказанное, то действие коммутатора $[A, X]$ на каждый вектор этой полной системы дает нуль, поэтому выполняется операторное равенство $[A, X] = 0$.

Все это применимо, конечно, и к *коммутирующим наблюдаемым*. Кроме того, все сказанное в гл. V (§§ 14, 15) относительно коммутирующих наблюдаемых, можно повторить здесь с некоторым изменением терминологии. Приведем еще раз основные результаты.

Базисной системой наблюдаемой мы называем всякую полную ортонормированную систему собственных векторов этой наблюдаемой, причем считаем тождественными системы, отличающиеся только фазовыми множителями при собственных векторах, порядком расположения векторов дискретного спектра и выбором непрерывных индексов в случае непрерывного спектра.

Имеем следующую важную теорему:

Если две наблюдаемые A и B коммутируют, то они обладают по крайней мере одной общей базисной системой, и обратно, если две наблюдаемые A и B обладают общей базисной системой, то они коммутируют.

Всякая функция $f(a, b)$ собственных значений двух коммутирующих наблюдаемых A и B позволяет определить линейный оператор $f(A, B)$ — функцию этих двух наблюдаемых с помощью естественного обобщения понятия операторной функции одной наблюдаемой. Легко показать, что если каждый общий собственный вектор наблюдаемых A и B есть собственный вектор линейного оператора F, то последний есть некоторая операторная функция A и B.

Все это без труда обобщается на случай любого числа коммутирующих между собой наблюдаемых.

Наконец, говорят, что последовательность $A, B, C, \ldots$ наблюдаемых составляет *полный набор коммутирующих наблюдаемых*, если эти наблюдаемые все коммутируют между собой и если их общая базисная система определяется единственным образом. Каждому множеству собственных значений $a, b, c, \ldots$ соответствует один и только один общий собственный вектор (определенный с точностью до постоянного множителя). Этот вектор может рассматриваться как функция собственных значений $a, b, c, \ldots$. Его обычно обозначают символом $|abc \ldots\rangle$.

Раздел III. ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

§ 16. Общее понятие о конечных матрицах

По определению матрица A типа $M \times N$ есть совокупность MN элементов A_{mn} ($m = 1, 2, \ldots, M$; $n = 1, 2, \ldots, N$), которые обычно располагают в виде прямоугольной таблицы с M строками и N столбцами

$$(A) \equiv \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \ldots & A_{1N} \\ A_{21} & \ldots & & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ A_{M1} & \ldots & & A_{MN} \end{pmatrix};$$

A_{mn} есть элемент матрицы, расположенный на пересечении m-й строки и n-го столбца.

Если $M = N$, то мы имеем *квадратную матрицу*, число ее строк и столбцов дает число измерений, или порядок матрицы. Если одно из двух целых чисел M или N равно 1, то элементы матрицы могут рассматриваться как компоненты вектора. Мы будем называть *правым вектором* матрицу с одним столбцом ($M =$ размерности вектора, $N = 1$) и *левым вектором* — матрицу с одной строкой ($M = 1$, $N =$ размерности вектора). Тогда *скаляр* есть матрица с $M = N = 1$.

Из матрицы A типа $M \times N$ можно получить новые матрицы с помощью некоторых *операций сопряжения*, именно:

а) *комплексно сопряженную матрицу* A^* — это матрица типа $M \times N$, элементы которой суть величины, комплексно сопряженные элементам матрицы A: $(A^*)_{kl} = A^*_{kl}$;