что операторы $i\frac{\partial}{\partial x}$, оператор Лапласа $\Delta$ (в одномерном случае $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$) – эрмитовые операторы, а оператор $\frac{d}{dx}$ - не эрмитовый.

Проверим, например, что оператор $\hat{L} = i\frac{d}{dx}$ эрмитовый. Подставляя этот оператор в (3) и производя интегрирование по частям по области определения функции $[a,b]$, получим

$$\int_a^b u_1^* i \frac{du_2}{dx} dx = iu_1^* u_2 \Big|_a^b - i\int_a^b u_2 \frac{du_1^*}{dx} dx = \int_a^b u_2 \left( i\frac{d}{dx} \right)^* u_1^* dx . \quad (4)$$

(Член $iu_1^* u_2 \Big|_a^b = 0$, так как на границах области определения функции $u_1$ и $u_2$ обращаются в нуль).

## §2. Действия над операторами

Суммой операторов $\hat{A} + \hat{B}$ называется оператор $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$, действие которого на функцию $u(x)$ выражается равенством:

$$\hat{C}u(x) = (\hat{A} + \hat{B})u(x) = \hat{A}u(x) + \hat{B}u(x). \quad (5)$$

Например, суммой операторов $\hat{A} = x^2$ и $\hat{B} = \frac{d^2}{dx^2}$ является оператор $x^2 + \frac{d^2}{dx^2}$, действующий на функцию $u(x)$ следующим образом:

$$(\hat{A} + \hat{B})u(x) = x^2 u(x) + \frac{d^2}{dx^2} u(x). \quad (6)$$

Очевидно, что сумма операторов обладает свойством аддитивности:

$$\hat{A}+\hat{B}=\hat{B}+\hat{A}\cdot \tag{7}$$

Произведением операторов $\hat{A}\hat{B}$ называется оператор $\hat{C}=\hat{A}\hat{B}$, действие которого на функцию $u(x)$ определяется равенством

$$\hat{C}u(x)=\hat{A}\left(\hat{B}u(x)\right). \tag{8}$$

Иначе говоря, действие оператора $\hat{C}$ на функцию $u(x)$ заключается в том, что сначала на функцию $u(x)$ действует оператор $\hat{B}$, а затем на полученную в результате действия этого оператора функцию действует оператор $\hat{A}$. Произведение операторов вообще говоря зависит от порядка сомножителей, т.е. результат последовательного действия двух операторов на функцию зависит от того, какой из операторов действует в первую очередь. Рассмотрим, например, произведение оператора умножения $\hat{A}=x^2$ и оператора дифференцирования $\hat{B}=\dfrac{d}{dx}$. Произведение операторов $\hat{A}\hat{B}$ действует на функцию $u(x)$ так:

$$\hat{A}\hat{B}u(x)=x^2\,\frac{du(x)}{dx}. \tag{9а}$$

С другой стороны

$$\hat{B}\hat{A}u(x)=\frac{d}{dx}\left(x^2u(x)\right)=2xu(x)+x^2\,\frac{du(x)}{dx}. \tag{9б}$$

Мы видим, что $\hat{A}\hat{B}u(x)\neq\hat{B}\hat{A}u(x)$, а следовательно и $\hat{A}\hat{B}\neq\hat{B}\hat{A}\cdot$

В то же время существуют пары операторов, произведение которых не зависит от порядка сомножителей: $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$. В этом случае говорят, что операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют. Например, операторы $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$ и $\hat{B} = \frac{\partial}{\partial y}$ при действии на функцию двух переменных $u(x, y)$ коммутируют, поскольку смешанные производные не зависят от порядка дифференцирования.

Суммы операторов можно перемножать также, как перемножаются многочлены, но при этом следует помнить, что произведение операторов вообще говоря, зависит от порядка сомножителей, а потому в полученном произведении операторов нельзя считать подобными члены, отличающиеся порядком входящих в них сомножителей. Например, при перемножении операторов $\hat{A} + \hat{B}$ и $\hat{A} - \hat{B}$ члены $-\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$ взаимно не уничтожаются:

$$\left(\hat{A} + \hat{B}\right) \cdot \left(\hat{A} - \hat{B}\right) = \hat{A}^2 - \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2 . \qquad (10)$$

Оператор $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ называется коммутатором операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ и обозначается $\left[\hat{A}\hat{B}\right]$.

Рассмотрим теперь очень важные для квантовой механики понятия собственных функций и собственных значений линейного самосопряженного оператора.

Если при действии оператора $\hat{L}$ на функцию $u(x)$ получается та же функция, умноженная на некоторый множитель $\lambda$, т.е.

$$\hat{L}u(x) = \lambda u(x), \qquad (11)$$

то функция $u(x)$ называется собственной функцией оператора $\hat{L}$, а множитель $\lambda$ собственным значением данного оператора. Например, функция $\cos 3x$ является собственной функцией оператора $\frac{d^2}{dx^2}$ при собственном значении $\lambda = -9$, так как

$$\frac{d^2}{dx^2}(\cos 3x) = -9\cos 3x. \qquad (12)$$

Уравнение вида (11) является обычно дифференциальным (иногда интегральным) уравнением относительно функции $u(x)$. На собственные функции накладываются некоторые дополнительные условия непрерывности, однозначности, обращения в нуль на границе области определения или на бесконечности. Может быть наложено условие существования интеграла $\int |u(x)|^2 dx$, где интегрирование производится по области определения функции $u(x)$. Оказывается, что решения уравнения (11), удовлетворяющие указанным дополнительным условиям, существуют не при всех значениях $\lambda$, а лишь при значениях из некоторого множества. Это множество значений $\lambda$ называется спектром собственных значений оператора $\hat{L}$. Спектр собственных значений может быть дискретным, непрерывным и смешанным. В случае дискретного спектра множество значений $\lambda$ является счётным, то есть собственные значения могут быть пронумерованы. В случае непрерывного спектра любое значение $\lambda$ из некоторой области является собственным. Смешанный спектр состоит из непрерывного спектра и дискретных значений, не принадлежащих к области непрерывного спектра.

Если функция $u(x)$ является собственной функцией оператора $\hat{L}$, то в виду линейности оператора, функции $cu(x)$, где $c$ - константа, так же является собственной функцией оператора $\hat{L}$ при том же собственном значении $\lambda$. Если функции $u_1$ и $u_2$ - собственные функции оператора $\hat{L}$ при некотором собственном значении, то их линейная комбинация $c_1u_1 + c_2u_2$ так же есть собственная функция при собственном значении $\lambda$. Следовательно, умножая собственные функции на константы и образуя их линейные комбинации всегда можно получить бесконечное число собственных функций, относящихся к данному собственному значению. Можно, однако, поставить вопрос: сколько линейно независимых собственных существует для данного собственного значения? Напомним, что функции $u_1, u_2, ..., u_n$ называются линейно независимыми, если тождество

$$c_1 u_1 + c_2 u_2 + ... + c_n u_n \equiv 0 \qquad (13)$$

имеет место тогда и только тогда, когда все коэффициенты $c_i$ равны нулю. Общий ответ на поставленный вопрос в рамках данного курса дать нельзя, так как для этого требуется знание теории групп. Обычно каждому собственному значению соответствует либо одна, либо несколько линейно независимых функций. Собственное значение, которому соответствует одна линейно независимая функция, называется простым. Если же собственному значению соответствуют $n$ линейно независимых собственных функций, то такое собственное значение называется кратным или вырожденным, а число $n$ называется кратностью или степенью вырождения собственного значения.

Докажем теперь два важных свойства собственных функций и собственных значений самосопряженных операторов.

**Свойство I**. Собственные значения самосопряженных операторов вещественны.

Доказательство. Напишем равенство, комплексно-сопряженное равенству (11):

$$\hat{L}^* u^*(x) = \lambda^* u^*(x). \qquad (14)$$

Умножим слева равенство (11) на $u^*$, а равенство (14) на $u$.

$$u^*(x)\hat{L}u(x) = u^*(x)\lambda u(x),$$

$$u(x)\hat{L}^* u^*(x) = u(x)\lambda^* u^*(x).$$

Вычтем из первого полученного равенства второе и проинтегрируем по области определения функции $u$:

$$\int\left(u^*(x)\hat{L}u(x)-u(x)L^*u^*(x)\right)dx=\left(\lambda-\lambda^*\right)\int u(x)u^*(x)dx\,. \quad (15)$$

Согласно определению эрмитовости (3) (где надо положить $u_1=u_2=u$) левая часть равенства (15) обращается в нуль. В правой части (15) $\int uu^*dx$ может быть равен нулю только если $u\equiv 0$, так как $uu^*=|u|^2\geq 0$. Этот тривиальный случай не представляет для нас интереса, поэтому будем считать, что $\int uu^*dx>0$. Тогда равенство (15) выполняется, если $\lambda=\lambda^*$, т.е. если $\lambda$ вещественная величина, что и требовалось доказать.

Прежде чем рассмотреть второе свойство дадим следующее определение.

Функции $u_1$ и $u_2$ - называются ортогональными, если выполняется равенство

$$\int u_1^*(x)u_2(x)dx=0\,, \quad (16)$$

где интегрирование выполняется по всей области определения функций.

При этом интеграл $\int u_1^*(x)u_2(x)dx$ называется скалярным произведением функций. По аналогии со скалярным произведением векторов этот интеграл записывается в виде $(u_1,u_2)$.

**Свойство II**. Собственные функции оператора $\hat{L}$, относящиеся к различным собственным значениям, ортогональны друг к другу.

Доказательство. Пусть $u_1$ и $u_2$ - собственные функции, относящиеся к собственным значениям $\lambda_1$ и $\lambda_2$ оператора $\hat{L}$:

$$\hat{L}u_1=\lambda_1 u_1\,, \quad (17а)$$

$$\hat{L}u_2=\lambda_2 u_2\,. \quad (17б)$$

Запишем равенство, комплексно сопряженное равенству (17а), умножив его на $u_2$

$$u_2\hat{L}^* u_1^* = u_2\lambda_1^* u_1^*,,$$

затем (17б) умножим на $u_1^*$

$$u_1^*\hat{L}u_2 = u_1^*\lambda_2 u_2 .$$

Вычтем полученные равенства и проинтегрируем их разность по области определения функций $u_1$ и $u_2$:

$$\int u_2\hat{L}^* u_1^* dx - \int u_1^*\hat{L}u_2 dx = (\lambda_1^* - \lambda)\int u_1^* u_2 dx . \qquad (18)$$

Левая часть по определению (3) равна нулю. В правой части по условию $\lambda_1^* - \lambda_2 = \lambda_1 - \lambda_2 \neq 0$.

Поэтому получаем

$$\int u_1^* u_2 dx = 0 , \qquad (19)$$

что и требовалось доказать.

Собственные функции, относящиеся к одному и тому же собственному значению оператора $\hat{L}$, вообще говоря не являются ортогональными. Мы отмечали выше, что любая линейная комбинация собственных функций, относящихся к одному и тому же собственному значению, так же является собственной функцией. Поэтому вместо $n$ исходных линейно-независимых собственных функций можно построить $n$ других, так же линейно-независимых собственных функций. Можно доказать, что всегда можно выбрать взаимно-ортогональные линейные комбинации собственных функций. Таким образом, собственные функции, относящиеся к разным собственным значениям ортогональны автоматически, а собственные функции, относящиеся к одному и тому собственному значению могут быть выбраны ортогональными. Следовательно, все собственные функции эрмитового оператора могут быть выбраны ортогональными. Каждая собственная функция может быть умножена на такой множитель, чтобы выполнялось условие

$$\int |u_i|^2 dx = 1, \tag{20}$$

где интегрирование ведётся по области определения функций. Функции, удовлетворяющие условию (20) называются нормированными, а система взаимно-ортогональных и нормированных функций называется ортонормированной. При наличии вырожденных собственных значений собственные функции удобно нумеровать двумя индексами: первый индекс указывает номер собственного значения, а второй - номер собственной функции, относящийся к данному собственному значению. Тогда ортонормированность системы функций запишется в виде:

$$\int u_{kl}^* u_{mn} dV = \delta_{km}\delta_{\ln}, \tag{21}$$

где $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, \text{ если } i = j \\ 0, \text{ если } i \neq j \end{cases}$ символ Кронекера. Ради простоты записи формул мы будем ниже нумеровать функции одним символом.

Условие ортонормированности функций непрерывного спектра имеет несколько другой вид, который мы рассматривать не будем.

В математике доказывается, что если система собственных функций эрмитовых операторов является не только ортогональной, но и полной, что значит, что любую функцию $\Psi(x)$, удовлетворяющую тем же граничным условиям, что и собственные функции $u_i(x)$, можно представить в виде ряда по этим функциям:

$$\Psi(x) = \sum_n c_n u_n(x). \tag{22}$$

Напомним, что в математическом анализе изучаются ряды Фурье по ортонормированным функциям

$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos 2x$, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin 2x$, ... на отрезке $[-\pi, \pi]$:

$$u(x)=\frac{a_1}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n\cos nx+b_n\sin nx\right). \qquad (23)$$

Ряд (22) является обобщением ряда Фурье (23) по тригонометрическим функциям. Чтобы найти коэффициенты ряда (22) умножим его на одну из функций $u_k^*(x)$ и проинтегрируем почленно по области определения функций $u_k(x)$:

$$\int u_k^*(x)\Psi(x)dx=\sum_n c_n\int u_k^*(x)u_k(x)dx. \qquad (24)$$

в силу свойства ортонормированности в правой части только член с $n=k$ отличен от нуля, поэтому:

$$c_k=\int u_k^*(x)\Psi(x)dx. \qquad (25)$$

Разложение (22) можно сравнить с разложением вектора по единичным ортогональным векторам. Функции $u_k(x)$ играют роль ортов векторного пространства, а коэффициенты $c_k$ аналогичны проекциям вектора на орты.

## §3. Средние значения динамических переменных. Изображение динамических переменных операторами

Из статистического толкования волн де Бройля следует, что состояние элементарной частицы в данный момент времени, в отличие от классической материальной точки, нельзя характеризовать определёнными значениями координат и проекций импульса. Заранее невозможно предсказать каков будет результат измерения указанных величин. Можно лишь указать какова вероятность того, что частица окажется в заданном элементе объёма и будет иметь координаты и проекции импульсов в заданных промежутках. Значения других динамических переменных, являю-