# Самосопряженные операторы в гильбертовом пространстве.

## Гильбертово пространство, пространства Шварца и финитных функций.

На простейшем примере одномерного гармонического осциллятора мы убедились в том, что конечномерное пространство $\mathbb{C}^n$ слишком мало, чтобы служить пространством состояний реальных квантовомеханических систем. Обобщением пространства состояний на бесконечномерный случай служит комплексное гильбертово пространство.

**Определение.** *Бесконечномерное линейное пространство над полем комплексных чисел $\mathbb{C}$ называется комплексным гильбертовым пространством $\mathcal{H}$, если выполнены следующие условия:*

1. *В пространстве $\mathcal{H}$ задана положительно определенная полуторалинейная квадратичная форма со свойством $(u, v)^* = (v, u)\ \forall\, u, v \in \mathcal{H}$, где символ $^*$ обозначает комплексное сопряжение (форма $(\ ,\ )$ называется эрмитовым скалярным произведением).*

2. *Пространство $\mathcal{H}$ являтся полным относительно метрики $\rho(u_1, u_2) := \|u_1 - u_2\|$, $\forall\, u_1, u_2 \in \mathcal{H}$, где норма задается скалярным произведением: $\|u\| := \sqrt{(u, u)}$, $\forall\, u \in \mathcal{H}$.*

Гильбертово пространство называется *сепарабельным*, если в нем существует счетное всюду плотное множество, а значит и счетная ортонормированная система базисных векторов. Мы будем рассматривать только сепарабельные гильбертовы пространства.

Все сепарабельные гильбертовы пространства изоморфны пространству $\ell_2$. Вектора этого пространства представляют собой бесконечные последовательности комплексных чисел с конечной суммой квадратов модулей:

$$\ell_2 = \left\{ u = (u_1, u_2, \ldots),\ u_i \in \mathbb{C}, \quad \sum_{i=1}^{\infty} |u_i|^2 < \infty \right\}.$$

Эрмитово скалярное произведение в $\ell_2$ определяется формулой

$$(u, v) := \sum_{i=1}^{\infty} u_i^* v_i.$$

Упомянутый изоморфизм $\mathcal{H} \cong \ell_2$ устанавливается через последовательности коэффициентов разложения произвольного вектора сепарабельного гильбертова пространства $\mathcal{H}$ по его счетному базису.

Для квантовой механики важное значение имеют гильбертовы пространства квадратично интегрируемых (в смысле интеграла Лебега) комплекснозначных функций от вещественных переменных. Это, в частности, пространства $L_2(\mathbb{R}^n)$, $n = 1, 2, 3$. Скалярное произведение в таких пространствах задается формулой

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{\mathbb{R}^n} \psi_1^*(x) \psi_2(x) d^n x.$$

В отличие от конечномерного случая, определение оператора, сопряженного данному линейному оператору $A$, в гильбертовом пространстве связано с некоторыми топологическими тонкостями.

**Определение.** *Линейный оператор $A$, действующий в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ и имеющий область определения $D_A \subseteq \mathcal{H}$, называется симметрическим (эрмитовым) на некотором подпространстве $D \subseteq D_A$, если для любой пары векторов $\psi_1, \psi_2 \in D$ выполнено равенство*

$$(A\psi_1, \psi_2) = (\psi_1, A\psi_2).$$

**Определение.** *Пусть линейный оператор $A$, действующий в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, имеет всюду плотную в $\mathcal{H}$ область определения $D_A \subseteq \mathcal{H}$. Рассмотрим множество $D_{A^\dagger}$ векторов пространства $\mathcal{H}$, обладающих свойством: каждому $\phi \in D_{A^\dagger}$ соответсвует некоторый вектор $\tilde{\phi} \in \mathcal{H}$, такой, что*

$$(A\psi, \phi) = (\psi, \tilde{\phi}), \quad \forall \psi \in D_A. \tag{1}$$

*Тогда множество векторов $D_{A^\dagger}$ называется областью определения сопряженного оператора $A^\dagger$ и его действие по определению задается формулой*

$$A^\dagger \phi = \tilde{\phi}.$$

Таким образом, для любой пары векторов $\psi \in D_A$ и $\phi \in D_{A^\dagger}$

$$(A\psi, \phi) = (\psi, A^\dagger \phi).$$

Очевидно, множество $D_{A^\dagger}$ не пусто (нулевой вектор всегда ему принадлежит) и является алгебраическим линейным подпространством в $\mathcal{H}$. Плотность области определения исходного оператора $A$ гарантирует однозначность образа $\tilde{\phi}$, что, в свою очередь, позволяет трактовать отображение $\phi \mapsto \tilde{\phi}$ как действие линейного оператора $A^\dagger$.

Заметим, что для эрмитового оператора $A$ всегда имеем $D_A \subseteq D_{A^\dagger}$ и $A\psi = A^\dagger\psi$, $\forall\, \psi \in D_A$. Таким образом, для эрмитового оператора $A$ сопряженный оператор $A^\dagger$ является его расширением.

**Определение.** *Линейный оператор $A$ в гильбертовом пространстве называется самосопряженным, если $A = A^\dagger$.*

Напомним, что равенство $A = A^\dagger$ влечет в частности условие $D_A = D_{A^\dagger}$.

В качестве иллюстрации введенных понятий рассмотрим пространство $L_2[0,1]$ квадратично интегрируемых комплекснозначных функций, заданных на отрезке вещественной оси $[0,1] \subset \mathbb{R}$:

$$L_2[0,1] = \left\{ \psi : [0,1] \to \mathbb{C},\ \int_0^1 |\psi(x)|^2 dx < +\infty \right\},$$

со скалярным произведением $(\psi_1, \psi_2) = \int_0^1 \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx$.

В пространстве $L_2[0,1]$ рассмотрим оператор $\mathsf{p} = i\frac{d}{dx}$, область определения которого $D_\mathsf{p}$ состоит из дифференцируемых (почти всюду) функций и является всюду плотной в $L_2[0,1]$. В своей области определения оператор $\mathsf{p}$ не является ни самосопряженным, ни эрмитовым. Действительно, в области определения найдется бесконечно много функций $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$, для которых

$$(\mathsf{p}\psi_1, \psi_2) - (\psi_1, \mathsf{p}\psi_2) = -i\psi_1^*(1)\psi_2(1) + i\psi_1^*(0)\psi_2(0) \neq 0. \tag{2}$$

Приведенное выше равенство получается стандартным приемом перебрасывания производной под знаком интеграла.

Однако мы можем выделить в области определения некоторое всюду плотное подпространство функций, на котором оператор $\mathsf{p}$ будет эрмитовым. Например, можно рассмотреть пространство

$$D_\mathsf{p}^h = \{\psi \in D_\mathsf{p},\ \psi(0) = \psi(1) = 0\}. \tag{3}$$

Пространство $D_\mathsf{p}^h$ возникает, например, как пространство состояний одномерной частицы в прямоугольной потенциальной яме с бесконечными стенками в точках 0 и 1. Благодаря граничным условиям (3) внеинтегральные члены в формуле (2) исчезают и оператор $\mathsf{p}$ является эрмитовым на подпространстве $D^h_{\mathsf{p}}$. Однако он не является самосопряженным оператором, поскольку существуют функции, не принадлежащие $D^h_{\mathsf{p}}$, для которых выполнено равенство (1), и, таким образом, $D^h_{\mathsf{p}} \subset D_{\mathsf{p}^\dagger}$. В качестве такой функции можно взять любую функцию из $D_{\mathsf{p}}$, поскольку для уничтожения внеинтегральных слагаемых в (2) достаточно требовать нулевых граничных условий только на одну из функций $\psi_1$ или $\psi_2$. Свидетельством того, что $\mathsf{p}$ не самосопряжен на подпространстве $D^h_{\mathsf{p}}$, является отсутствие решений у задачи на собственные значения оператора $\mathsf{p}$ в пространстве $D^h_{\mathsf{p}}$. В самом деле, краевая задача

$$i\frac{d\psi}{dx} = \lambda\psi, \quad \psi(0) = \psi(1) = 0$$

имеет только тривиальное решение $\psi(x) \equiv 0$.

Таким образом, граничные условия, выделяющие подпространство $D^h_{\mathsf{p}}$, слишком сильно урезают область определения оператора $\mathsf{p}$ и должны быть ослаблены. Наша цель состоит в том, чтобы найти такое подпространство в $D_{\mathsf{p}}$, на котором оператор $\mathsf{p}$ все еще был бы эрмитовым (занулялись бы внеинтегральные слагаемые в (2)) и которое уже нельзя расширить, то есть область определения сопряженного оператора совпадала бы с областью эрмитовости $\mathsf{p}$. Простой анализ позволяет найти целое семейство таких подпространств $D^\alpha_{\mathsf{p}}$, нумеруемых вещественным параметром $0 \le \alpha < 2\pi$. Каждое подпространство $D^\alpha_{\mathsf{p}}$ выделяется граничными условиями вида

$$D^\alpha_{\mathsf{p}} = \left\{\psi \in D_{\mathsf{p}},\ \psi(1) = e^{i\alpha}\psi(0)\right\}.$$

На любом из пространств $D^\alpha_{\mathsf{p}}$ рассматриваемый оператор самосопряжен $\mathsf{p}^\dagger = \mathsf{p}$, обладает бесконечным дискретным спектром $\{\lambda^\alpha_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$ и полной ортонормированной системой собственных векторов $\{\psi^\alpha_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$:

$$i\frac{d\psi^\alpha_n}{dx} = \lambda^\alpha_n\psi^\alpha_n, \quad \lambda^\alpha_n = 2\pi n + \alpha, \quad \psi^\alpha_n(x) = \exp(i\lambda^\alpha_n x) \in D^\alpha_{\mathsf{p}},\ n \in \mathbb{Z}.$$

Заметим, что $D^h_{\mathsf{p}} \subset D^\alpha_{\mathsf{p}}$ для любого значения параметра $0 \le \alpha < 2\pi$.

Рассмотрим теперь подробнее пространство квадратично интегрируемых функций $L_2(\mathbb{R})$ и (изоморфное ему) пространство числовых последовательностей $\ell_2$. Это “большие” пространства, не очень удобные в работе с точки зрения квантовой механики (например, не на всех векторах этих пространств определены даже простейшие операторы координаты и импульса, а если и определены, то могут оказаться неопределенными их степени и т.п.). Поэтому в $L_2(\mathbb{R})$ и $\ell_2$ выделяются подпространство Шварца быстроубывающих функций и пространство финитных функций, для которых не возникает проблем с определением действия операторов основных наблюдаемых (координаты, импульса, энергии (гамильтониана)).

Чтобы проиллюстрировать удобство пространства Шварца и пространства финитных функций, рассмотрим простой пример одномерного квантового гармонического осциллятора, который задается гамильтонианом

$$H(Q,P) = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 Q^2}{2},$$

где операторы координаты $Q$ и импульса $P$ удовлетворяют каноническим перестановочным соотношениям

$$QP - PQ = i\hbar 1.$$

Эта система может быть реализована в гильбертовом пространстве многими способами.

**i. Координатное представление.** В пространстве $L_2(\mathbb{R}_x)$ квадратично интегрируемых функций аргумента $x \in \mathbb{R}$ действие операторов координаты и импульса задается формулами:

$$(Q\psi)(x) = x\psi(x), \qquad (P\psi)(x) = -i\hbar\,\frac{d\psi(x)}{dx}.$$

Гамильтониан превращается в дифференциальный оператор второго порядка

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \tag{4}$$

**ii. Импульсное представление.** В пространстве $L_2(\mathbb{R}_p)$ квадратично интегрируемых функций аргумента $p \in \mathbb{R}$ действие операторов координаты и импульса задается формулами:

$$(Q\psi)(p) = i\hbar\,\frac{d\psi(p)}{dp}, \qquad (P\psi)(p) = p\psi(p).$$

Гамильтониан превращается в дифференциальный оператор второго порядка

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2 m\omega^2}{2}\,\frac{d^2}{dp^2}.$$

**iii. Представление в пространстве Фока.** В пространстве $\ell_2$ выбирается ортонормированный базис $\{\psi_n\}_{n\in\mathbb{Z}_+}$

$$\ell_2 = \left\{\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\psi_n, \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 < +\infty\right\}$$

и пара сопряженных операторов $a$ и $a^\dagger$

$$a\psi_0 = 0, \quad a\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}, \qquad a^\dagger\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}, \quad \forall\, n \in \mathbb{Z}_+.$$

Операторы $Q$ и $P$ реализуются в виде самосопряженных комбинаций

$$Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a), \quad P = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^\dagger - a).$$

Гамильтониан линейным образом зависит от оператора “числа частиц” $N = a^\dagger a$:

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right).$$

Из приведенных выше формул следует, что если мы, например, хотим определить подпространство функций в $L_2(\mathbb{R}_x)$, в котором можно было бы реализовать *всю* алгебру наблюдаемых гармонического осциллятора, то такие функции должны быть бесконечно дифференцируемы (для возможности вводить любые степени оператора $P$) и, кроме того, эти функции и их производные любого порядка должны убывать на бесконечности сильнее любой степени переменной $x$ (для возможности вводить любые степени оператора $Q$). Такое подпространство в $L_2(\mathbb{R}_x)$ и называется пространством Шварца:

$$\mathcal{S} = \left\{\psi \in L_2(\mathbb{R}_x), \ \lim_{|x|\to+\infty} |x|^m \psi^{(n)}(x) = 0, \ \forall\, m, n \in \mathbb{Z}_+\right\}.$$

Подпространство $\mathcal{S}$ является всюду плотным множеством в $L_2(\mathbb{R}_x)$ и, более того, оно содержит счетный базис гильбертова пространства $L_2(\mathbb{R}_x)$, который образован собственными функциями самосопряженного оператора $H$. Как мы уже видели, это функции $\psi_n(x) = h_n(q)e^{-q^2/2}$, где $h_n(q)$ — полином Эрмита $n$-го порядка, а $q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x$.

Рассмотрение для $L_2(\mathbb{R}_p)$ совершенно аналогично, а для пространства Фока соответствующее подпространство Шварца выделяется условием

$$\mathcal{S} = \left\{ \psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n, \quad \sum_{n=0}^{\infty} n^k |c_n|^2 < +\infty, \quad \forall\, k = 0, 1, 2, \dots \right\}.$$

И, наконец, пространство финитных функций есть подпространство пространства Шварца, состоящее из функций с компактным носителем — то есть таких, которые тождественно равны нулю вне некоторого конечного интервала (своего для каждой функции). В пространстве Фока это эквивалентно выбору только *конечных* линейных комбинаций базисных векторов $\psi_n$.

Пространства Шварца и финитных функций являются плотными множествами в соответствующих гильбертовых пространствах. Это означает, что любую функцию из пространства $L_2(\mathbb{R})$ можно приблизить с любой заданной точностью $\varepsilon$ (по норме пространства) *конечной* линейной комбинацией функций из пространства Шварца или финитных функций.

ЗАМЕЧАНИЕ. Обсуждаемые вопросы относятся к поведению функций на пространственной бесконечности (или к сходимости ряда бесконечного числа коэффициентов $c_n$ в случае пространства $\ell_2$). Эти особенности никогда не могут быть проверены на опыте, поскольку размеры области эксперимента всегда ограничены (экспериментальной установкой или, в конце концов, стенами лаборатории). Все измерения всегда выполняются с конечной точностью $\varepsilon$ (это принципиальный момент, не устранимый никаким техническим прогрессом) и на опыте никогда не может быть измерено бесконечное число параметров (коэффициентов $c_n$ разложения вектора $\psi \in \ell_2$ по базису $\{\psi_n\}$. Таким образом, для квантовой механики как *физической теории*, то есть теории, призванной давать предсказания, проверяемые в реальных экспериментах, вполне достаточно пространства Шварца и даже пространства финитных функций. Как было замечено выше, любую волновую функцию, задающую состояние квантовомеханической системы, можно приблизить с погрешностью $\varepsilon$, допускаемой экспериментальным оборудованием, конечной комбинацией финитных функций. Поэтому далее мы будем обосновывать все утверждения (про обобщенные собственные вектора и спектральные разложения неограниченных самосопряженных операторов) только для пространства Шварца. Спектральная же теория неограниченных самосопряженных операторов в $L_2(\mathbb{R})$ занчима для квантовой механики как раздела функционального анализа. Это большая и довольно сложная теория, которой мы не будем касаться по указанной выше физической причине.

**Непрерывный спектр и обобщенные собственные вектора самосопряженных операторов.**

Пусть $A$ самосопряженный оператор в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Рассмотрим оператор $R(\lambda) = (\lambda\,\mathrm{id} - A)^{-1}$, параметризованный числовым параметром $\lambda \in \mathbb{C}$.

**Определение.** Множество значений параметра $\lambda$, при которых оператор $R(\lambda)$ существует и ограничен на всем пространстве $\mathcal{H}$, называется резольвентным множеством оператора $A$. Теоретико-множественное дополнение резольвентного множества в $\mathbb{C}$ называется *спектром* оператора $A$.

**Утверждение.** Спектр самосопряженного оператора есть подмножество вещественной оси в $\mathbb{C}$. Спектральные значения могут представлять собой изолированные точки вещественной оси (дискретный спектр) и могут составлять конечный или бесконечный интервал (непрерывный спектр).

Если непрерывный спектр отсутствует, то говорят, что оператор $A$ имеет чисто дискретный спектр, как, например, для гамильтониана одномерного гармонического осциллятора. Эта ситуация не сильно отличается от конечномерного случая. А именно, собственные вектора $\phi_n$ дискретного спектра оператора $A$ (для простоты считаем собственные значения невырожденными)

$$A\phi_n = a_n\phi_n$$

образуют базис (полную ортонормированную систему векторов) в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Произвольный вектор $\psi \in \mathcal{H}$ разлагается в ряд по этим векторам

$$\psi = \sum_{\mathrm{Spec}\,A} c_n\phi_n, \quad c_n = (\phi_n, \psi), \tag{5}$$

где суммирование ведется по спектральным значениям $A$ (обычно это суммирование записывается как сумма по $n$). Коэффициенты разложения $c_n$ интерпретируются как амплитуды вероятности (то есть, $|c_n|^2$ дает вероятность) получить в эксперименте значение наблюдаемой $A$ равное $a_n$ при условии, что система находится в состоянии $\psi$. При этом справедливо равенство Парсеваля

$$\|\psi\|^2 := (\psi, \psi) = \sum_{\mathrm{Spec}\,A} |c_n|^2 = \sum_{\mathrm{Spec}\,A} (\psi, \phi_n)(\phi_n, \psi).$$

Разложение (5) позволяет записать действие оператора на произвольный вектор гильбертова пространства в виде

$$A\psi = \sum_{\mathrm{Spec}\,A} a_n\phi_n(\phi_n, \psi),$$

или, опуская произвольный вектор $\psi$,

$$A = \sum_{\mathrm{Spec}\,A} a_n P_{\phi_n},$$

где $P_{\phi_n}$ — проектор на собственный вектор $\phi_n$. Последние две формулы носят название спектральной теоремы для самосопряженного оператора в этом простом случае.

Ситуация для непрерывного спектра существенно другая. Спектральным значениям из непрерывного спектра не отвечает никакой нормируемый собственный вектор из пространства $\mathcal{H}$. Действительно, допустим обратное — пусть оператор $A$ обладает нормируемыми собственными вектрами $\xi_\lambda$ для любого спектрального значения $\lambda \in [a, b] \subset \mathbb{R}$: $A\xi_\lambda = \lambda\xi_\lambda$, и пусть эти вектора образуют ортонормированный базис в пространстве $\mathcal{H}$. Для простоты мы предполагаем, что дискретный спектр отсутствует. Тогда разложение произвольного $\psi \in \mathcal{H}$ в ряд по базису векторов $\xi_\lambda$ имело бы вид

$$\psi = \int_{\mathrm{Spec}\,A} c_\lambda\xi_\lambda d\lambda, \qquad c_\lambda = (\xi_\lambda, \psi).$$

Вычислим скалярное произведение обеих частей этого равенства с некоторым собственным вектором $\xi_{\lambda'}$:

$$(\xi_{\lambda'}, \psi) := c_{\lambda'} = \int_{\mathrm{Spec}\,A} c_\lambda(\xi_{\lambda'}, \xi_\lambda)d\lambda$$

Из этой формулы следует, что скалярное произведение векторов непрерывного спектра должно быть пропорционально обобщенной функции Дирака:

$$(\xi_{\lambda'}, \xi_\lambda) \sim \delta(\lambda' - \lambda). \tag{6}$$

К такому же заключению можно придти, если потребовать выполнения равенства Парсеваля

$$\|\psi\|^2 = \int_{\mathrm{Spec}\, A} |c_\lambda|^2 d\lambda.$$

Практически важный пример такой ситуации возникает в координатном (или импульсном) представлении для операторов $Q$ и $P$. Пусть $\zeta_{x'}(x)$ и $\xi_p(x)$ — собственные функции операторов $Q$ и $P$ с собственными значениями $x' \in \mathbb{R}$ и $p \in \mathbb{R}$ соответственно (подчеркнем, что $x'$ и $p$ какие-то *фиксированные* вещественные числа). Тогда задачи на собственные значения для этих операторов с учетом явного вида их действия в пространстве $L_2(\mathbb{R})$ сводятся к уравнениям

$$x\zeta_{x'}(x) = x'\zeta_{x'}(x) \;\Leftrightarrow\; (x - x')\zeta_{x'}(x) = 0, \qquad -i\hbar\frac{d\xi_p(x)}{dx} = p\xi_p(x), \tag{7}$$

где в левой части стоит результат действия соответствующего оператора, а справа записано условие того, что функции $\zeta_{x'}(x)$ и $\xi_p(x)$ являются собственными функциями с собственными значениями $x'$ и $p$. Эти уравнения легко решаются (в множестве обычных комплекснозначных функций на вещественной оси): $\zeta_{x'}(x) \equiv 0$, $\xi_p(x) = C\exp(\frac{ipx}{\hbar})$. Оба эти решения неудовлетворительны, так как собственная функция не должна быть тождественным нулем, а решения в виде плоских волн $\xi_p(x) = \exp(\frac{ipx}{\hbar})$ не являются квадратично интегрируемыми и, следовательно, не принадлежат $L_2(\mathbb{R})$.

Заметим, однако, что в пространстве линейных функционалов (обобщенных функций) над пространством Шварца $\mathcal{S} \subset L_2(\mathbb{R})$ уравнение для $\zeta_{x'}(x)$ имеет ненулевое решение — $\delta$-функцию Дирака

$$\zeta_{x'}(x) = C\delta(x - x'),$$

которая является ядром функционала, сопоставляющего каждой функции $\psi(x) \in \mathcal{S}$ ее значение $\psi(x')$:

$$\psi \;\mapsto\; \psi(x') = \int_{\mathbb{R}} \psi(x)\delta(x - x')dx.$$

Собственная функция импульса $\xi_p(x)$ тоже является ядром линейного функционала — любой $\psi(x) \in \mathcal{S}$ этот функционал ставит в соответствие значение ее фурье-образа в данной точке $p$ (при подходящем выборе нормировочной константы $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$):

$$\psi \;\mapsto\; \tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \psi(x)\, e^{\frac{ipx}{\hbar}}\, dx.$$

При этом формальные скалярные произведения “собственных” функций $\zeta_{x'}$ и $\xi_p(x)$ действительно удовлетворяют соотношению (6)

$$(\zeta_{x'}, \zeta_{x''}) = \int_{\mathbb{R}} \zeta^*_{x'}(x)\zeta_{x''}(x)\, dx = \delta(x' - x''), \qquad (\xi_{p'}, \xi_{p''}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{i(p''-p')x}{\hbar}} dx = \delta(p' - p'').$$

Таким образом, возникает идея как-то расширить исходное пространство $L_2(\mathbb{R})$, так, чтобы собственные вектора самосопряженных операторов лежали бы в этом расширенном пространстве и образовывали бы базис для пространства Шварца $\mathcal{S} \in L_2(\mathbb{R})$.

Для того, чтобы строго определить, какому пространству должны принадлежать собственные вектора непрерывного спектра $\xi_\lambda$ и какой смысл можно придать разложению векторов пространства Шварца в их линейную комбинацию используется конструкция оснащения (расширения) исходного гильбертова пространства $L_2(\mathbb{R})$.

Прежде всего, давайте выясним, что, в сущности, нам требуется от собственных функций $\xi_\lambda$ любой наблюдаемой $A$ (для просторы считаем что $A$ имеет только непрерывный спектр)? Основное их свойство, на которое опирается статистическая интерпретация результатов измерений наблюдаемой $A$ в произвольном чистом состоянии $\psi$, это возможность вычислять скалярные произведения собственных функций $\xi_\lambda$ с *нормируемой* функцией состояния $\psi$ и эти скалярные произведения должны обеспечивать выполнение равенства Парсеваля для нормы

$$1 = \|\psi\|^2 = \int_{\mathrm{Spec}\,A} |(\psi, \xi_\lambda)|^2 d\lambda.$$

Отметим, что квадрат модуля величины, стоящей под знаком интеграла, для непрерывного спектра трактуется как *плотность* вероятности получить в эксперименте значение $A$ равное $\lambda$. То есть, величина $|(\psi, \xi_\lambda)|^2 d\lambda$ равна вероятности получить в эксперименте значение наблюдаемой $A$, лежащее в малой окрестности $d\lambda$ вокруг данного $\lambda$.

Таким образом, вектора непрерывного спектра $\xi_\lambda$ должны быть некоторыми антилинейными функционалами на функциях гильбертова пространства $L_2(\mathbb{R})$:

$$\xi_\lambda : \ \psi \ \mapsto \ (\psi, \xi_\lambda) \in \mathbb{C}.$$

Такая точка зрения может быть распространена и на обычные функции из $L_2(\mathbb{R})$ — согласно теореме Рисса, пространство антилинейных *непрерывных* функционалов $\Phi$ на $L_2(\mathbb{R})$ находится во взаимно-однозначном с функциями $L_2(\mathbb{R})$:

$$\Phi : \ L_2(\mathbb{R}) \ \to \ \mathbb{C} \quad \Leftrightarrow \quad \exists\, \phi \in L_2(\mathbb{R}) : \ \Phi[\psi] = (\psi, \phi), \quad \forall\, \psi \in L_2(\mathbb{R}).$$

Итак, нам надо получить расширение пространства непрерывных антилинейных функционалов на $L_2(\mathbb{R})$. Мы опишем конструкцию расширения (оснащения) с помощью так называемой тройки Гельфанда вложенных пространств $\mathcal{F} \subset \mathcal{H} = \mathcal{H}^\times \subset \mathcal{F}^\times$. Здесь в общем случае $\mathcal{H}$ — гильбертово пространство, подлежащее расширению, $\mathcal{H}^\times$ — пространство антилинейных непрерывных функционалов на $\mathcal{H}$, а $\mathcal{F}$ — некоторое топологическое пространство, плотно вложенное в $\mathcal{H}$. Выбор этого пространства (и, следовательно, вся схема расширения) связан с некоторым оператором или алгеброй операторов. Подробно с этой схемой можно ознакомиться в курсах функционального анализа, мы же ограничимся рассмотрением частного, но практически самого важного случая $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R})$, а в качестве $\mathcal{F}$ выберем пространство Шварца в $L_2(\mathbb{R})$. Этот выбор, напомним, связан с требованием, чтобы операторы $Q$ и $P$ и вся порождаемая ими алгебра были бы определены на $\mathcal{F}$.

Мы будем строить пространство $\mathcal{F}^\times$ антилинейных непрерывных функционалов на $\mathcal{F}$ таким образом, чтобы $\mathcal{H}^\times \subset \mathcal{F}^\times$. Понятие непрерывности функционала тесно связано с понятием сходимости последовательности векторов пространства, на котором действует функционал. В $L_2(\mathbb{R})$ последовательность функций $\{\psi_n\}$ сходится при $n \to \infty$ к некоторой функции $\psi \in L_2(\mathbb{R})$ если числовая последовательность $\|\psi_n - \psi\|$ (норма в смысле пространства $L_2(\mathbb{R})$) стремится к нулю. Мы будем записывать этот факт следующим образом

$$\psi_n \xrightarrow{\mathcal{H}} \psi \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{n\to\infty} \|\psi_n - \psi\| = 0. \tag{8}$$

Зададим в пространстве Шварца $\mathcal{S}$ новое, более сильное определение сходимости последовательности функций (для пространства Шварца с этим новым определением сходимости мы пользуемся новой буквой $\mathcal{F}$ вместо $\mathcal{S}$). А именно, будем говорить что последовательность быстроубывающих функций $\{\psi_n\}$ из пространства Шварца сходится к функции $\psi$ в смысле пространства $\mathcal{F}$, если выполнены следующие условия

$$\psi_n \xrightarrow{\mathcal{F}} \psi \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{n\to\infty} \|H^p(\psi_n - \psi)\| = 0, \quad \forall\, p \in \mathbb{Z}_+, \tag{9}$$

где оператор $H$ представляет собой гамильтониан гармонического осциллятора (4).

Заметим, что относительно сходимости по норме пространства $L_2(\mathbb{R})$ (8) пространство Шварца не является полным а операторы $P$ и $Q$ не являются непрерывными. Можно показать, что определенная в (9) сходимость в смысле $\mathcal{F}$ является наиболее слабым типом сходимости, при котором $\mathcal{F}$ становится полным пространством и все операторы алгебры, порожденной $P$ и $Q$ — непрерывны.

Обозначим символом $\mathcal{F}^\times$ пространство непрерывных функционалов на $\mathcal{F}$. По определению, любой функционал $\Phi \in \mathcal{F}^\times$ есть линейное отображение $\Phi : \mathcal{F} \to \mathbb{C}$ со следующим свойством:

$$\forall\, \{\psi_n\} :\ \psi_n \xrightarrow{\mathcal{F}} \psi \quad \Rightarrow \quad \Phi[\psi_n] \xrightarrow{\mathbb{C}} \Phi[\psi].$$

Очевидно, что всякая последовательность функций, сходящаяся в смысле пространства $\mathcal{F}$ сходится и в смысле пространства Ł$_2(\mathbb{R})$, поэтому любой непрерывный функционал на пространстве $L_2(\mathbb{R})$ является таковым и на пространстве $\mathcal{F}$:

$$\mathcal{H}^\times \subset \mathcal{F}^\times.$$

Поскольку по теореме Рисса $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\times$ мы получаем три вложенных пространства (тройка Гельфанда) вида $\mathcal{F} \subset \mathcal{H} = \mathcal{H}^\times \subset \mathcal{F}^\times$.

Теперь мы расширим понятие скалярного произведения, определив его для $\psi \in \mathcal{F}$ и $\Phi \in \mathcal{F}^\times$ следующим образом

$$(\psi, \Phi) := \Phi[\psi], \quad (\Phi, \psi) := (\psi, \Phi)^*,$$

а также для любого самосопряженного оператора $A$ на пространстве $\mathcal{F}$ распространим его действие на функционалы $\Phi \in \mathcal{F}^\times$ по правилу:

$$(\psi, A\Phi) = (A\psi, \Phi) := \Phi[A\psi].$$

**Определение.** Обобщенным собственным вектором самосопряженного оператора $A$ с собственным значением $\lambda$ называется функционал $\Phi \in \mathcal{F}^\times$, для которого выполнено условие

$$(A\psi, \Phi) = \lambda(\psi, \Phi), \quad \forall\, \psi \in \mathcal{F}. \tag{10}$$

Важный результат функционального анализа состоит в следующем утверждении.

**Утверждение.** Любой самосопряженный оператор $A$ на пространстве $\mathcal{F}$ имеет полный базис собственных векторов в пространстве $\mathcal{F}^\times$ и любая функция $\psi \in \mathcal{F}$ разлагается в линейную комбинацию этих векторов с выполнением равенства Парсеваля:

$$\psi = \sum_{d.SpecA} (\phi_n, \psi)\phi_n + \int_{c.SpecA} (\xi_\lambda, \psi)\xi_\lambda \, d\lambda,$$

$$\|\psi\|^2 = \sum_{d.SpecA} |(\phi_n, \psi)|^2 + \int_{c.SpecA} |(\xi_\lambda, \psi)|^2 \, d\lambda,$$

где суммирвание и интегрирование ведется соответственно по дискретному и непрерывному спектру оператора $A$.

Отметим, что обобщенные собственные вектора $\xi_\lambda$ в вышеприведенных формулах являются *ядрами* функционалов $\Phi_\lambda$ — обобщенных собственных векторов в смысле определения (10).

ЗАМЕЧАНИЕ. Физическим следствием ненормируемости $\xi_\lambda$ является тот факт, что такие состояния нельзя реализовать в природе. Иными словами, система не может находиться в чистом состоянии, отвечающем точному собственному значению некоторой наблюдаемой из ее непрерывного спектра. Состояния непрерывного спектра всегда реализуются в виде *волновых пакетов*, то есть линейных комбинаций вида

$$\psi = \int_{\mathrm{Spec}\,A} \tilde{\psi}(\lambda)\xi_\lambda d\lambda \tag{11}$$

где значение функции $\tilde{\psi}(\lambda)$ в точке $\lambda_0 \in \mathrm{Spec}A$ дает коэффициент, с которым вектор $\xi_{\lambda_0}$ входит в линейную комбинацию волнового пакета. Функция $\tilde{\psi}(\lambda)$ выбирается так, чтобы волновой пакет (11) принадлежал гильбертову пространству $\mathcal{H}$. Если $\tilde{\psi}(\lambda)$ имеет резкий максимум при некотором значении параметра $\lambda_0$ и быстро зануляется вне малой окрестности $\lambda_0$, то такой пакет реализует “почти чистое состояние” $\xi_{\lambda_0}$ непрерывного спектра.

В качестве иллюстрации приведенных выше понятий рассмотрим операторы координаты $Q$ и импульса $P$ в координатном и импульсном представлении.

**Утверждение.** В координатном представлении обобщенным собственным вектором оператора Q является функционал Дирака (ядро которого представляется $\delta$-функцией), а обобщенным собственным вектором оператора импульса $P$ является функционал Фурье (из пространства $\mathcal{F}_x$ функций вещественной переменной $x$ в значения фурье-образов функций в точках, отвечающих собственным значениям импульса $p$).

В импульсном представлении обобщенным собственным вектором оператора импульса является функционал Дирака, а обобщенным собственным вектором $Q$ — функционал обратного преобразования Фурье.

Действительно, проверим выполнение определения (10) для обобщенных собственных функций $Q$ $\zeta_{x'}(x)$

$$(Q\psi, \zeta_{x'}) = \int_{\mathbb{R}} (x\psi)^* \delta(x' - x)\, dx = x'\psi(x') = x'(\psi, \zeta_{x'}).$$

Разложение по обобщенным собственным векторам оператора $Q$ в координатном представлении:

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} (\zeta_{x'}, \psi)\zeta_{x'}(x)\, dx.$$

Квадрат модуля коэффициента $|(\zeta_{x'}, \psi)|^2$ есть плотность вероятности получить в измерении значение координаты $Q$ равное собственному значению $x'$. Учитывая явный вид $\zeta_{x'}(x)$ мы получаем

$$|(\zeta_{x'}, \psi)|^2 = |\psi(x')|^2,$$

что дает статистическцю интерпретацию волновой функции в координатном представлении: квадрат ее модуля, вычисленный в данной точке $x_0$ определяет плотность вероятности найти квантовую систему в этой точке.

Подстановка обобщенных собственных векторов $\xi_p(x) = C\exp(\frac{ipx}{\hbar})$ оператора импульса $P$ в определение (10) дает:

$$(P\psi, \xi_p) = \int_{\mathbb{R}} \left(-i\hbar\frac{d\psi}{dx}\right)^* Ce^{\frac{ipx}{\hbar}} = \int_{\mathbb{R}} \psi^* \left(-i\hbar\frac{d}{dx}Ce^{\frac{ipx}{\hbar}}\right)\, dx = p(\psi, \xi_p),$$

где

$$(\xi_p, \psi) = C^* \int_{\mathbb{R}} \psi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\, dx$$

есть преобразование Фурье функции $\psi$. Константа $C$ выбирается равной $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ требованием выполнения равенства Парсеваля:

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2\, dx = \int_{\mathbb{R}} |(\psi, \xi_p)|^2\, dp.$$

Разложение по собственным векторам импульса

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} (\xi_p, \psi)\xi_p(x)\, dp$$

дает статистическую интерпретацию фурье-образа волновой функции в координатном представлении: квадрат модуля фурье-образа $|\tilde{\psi}(p)|^2$, вычисленный в некоторой точке $p$, где

$$(\xi_p, \psi) = \tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \psi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\, dx$$

есть плотность вероятности обнаружить значение импульса квантовой системы равным данному $p$.