Математические основы Квантовой Механики

Непрерывный спектр и обобщённые собственные вектора.

Как мы уже выяснили, конечномерных векторных пространств совершенно недостаточно для описания пространства состояний квантовой механики. Вместо конечномерных пространств мы будем пользоваться сепарабельным Гильбертовым пространством над полем комплексных чисел $\mathbb{C}$. Будем его обозначать $\mathcal{H}(\mathbb{C})$.

Теория линейных операторов в Гильбертовом пространстве существенно богаче и сложнее конечномерного случая.

Основное отличие (и источник проблем) — область определения оператора, которая может не совпадать со всем Гильбертовым пространством $\mathcal{H}(\mathbb{C})$.

Далее мы будем интересоваться операторами A, область определения которых D_A — всюду плотное множество в $\mathcal{H}(\mathbb{C})$: $D_A \subseteq \mathcal{H}(\mathbb{C})$, $\bar{D}_A = \mathcal{H}(\mathbb{C})$.

Замыкание D_A.

Теперь, например, операторы A и B считаются равными, если
$$\mathcal{D}_A = \mathcal{D}_B \text{ и } A|\psi\rangle = B|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{D}_A.$$

В конечномерном случае у всех операторов $\mathcal{D}_A = V$ и для равенства $A=B$ нужно только равенство действий $A|\psi\rangle = B|\psi\rangle \;\forall |\psi\rangle \in V$.

Необходимость следить за областью определения приводит к сложностям в задании произведения операторов (AB имеет смысл если $\operatorname{Im} B \cap \mathcal{D}_A \neq \emptyset$) и даже их суммы. Кроме того, ~~их~~ свойства произведения и суммы могут сильно отличаться от свойств A и B. Например, как мы скоро выясним, операторы координаты $\hat{q}$ и импульса $\hat{p}$ имеют чисто непрерывный спектр и не имеют ни одного нормируемого собственного вектора. Аналогичные свойства у $\hat{q}^2$ и $\hat{p}^2$. А их сумма $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{q}^2}{2}$ (гарм. осциллятор) представляет собой оператор с чисто дискретным спектром и соответствующие собственные вектора образуют базис в $\mathcal{H}(\mathbb{C})$.

Понятие спектра оператора тоже расширяется. Для нас это особенно важно, так как значение спектра самосопряжённого оператора это те числа, которые получаются в процессе измерения соответствующих наблюдаемых.

Напомним предварительно важное определение.

$\boxed{O}$ Оператор $A: \mathcal{D}_A \to \mathcal{H}$ называется ограниченным если $\exists$ константа $\alpha \geq 0$ такая, что $\forall\ |\psi\rangle \in \mathcal{D}_A$:

$$\| A|\psi\rangle \| \leq \alpha \, \| |\psi\rangle \|$$

Связанное с этим (по факту эквивалентное) понятие непрерывного оператора:

$\boxed{O}$ A непрерывный оператор, если для $\forall$ последовательности векторов

$\{|\psi_n\rangle\} \subset \mathcal{D}_A$, сходящейся по норме к нулю: $\| |\psi_n\rangle \| \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0$ последовательность $\{A|\psi_n\rangle\}$ тоже сходится к нулевому вектору:

$$\| A|\psi_n\rangle \| \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0.$$

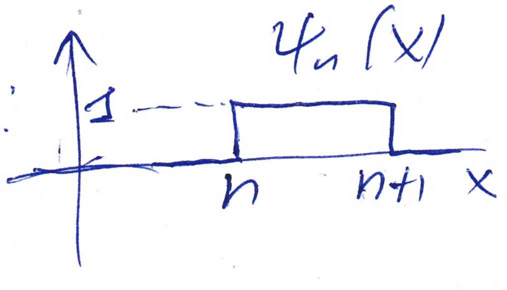
Любой ограниченный оператор непрерывен и обратное тоже верно.

Если оператор с плотной областью определения непрерывен, то его можно по непрерывности доопределить на всё пространство $\mathcal{H}$.

В конечномерном пространстве все линейные операторы ограничены (непрерывны), а в гильбертовом пространстве это не так. В частности, основные наблюдаемые $\hat{q}$ и $\hat{p}$ — не ограниченные операторы.

Увидеть это просто. Пусть $\psi_n(x) \in L_2(\mathbb{R})$ — функция-ступенька вида:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} 1 & n \le x \le n+1 \\ 0 & x \notin [n, n+1] \end{cases}$$



Очевидно, что $\|\psi_n\| = 1 \ \forall n$,

но $\|\hat{q}|\psi_n\rangle\|^2 = \int_n^{n+1} x^2 |\psi_n(x)|^2 dx =$

$= \left(n^2 + n + \frac{1}{3}\right) \cdot \underbrace{\|\psi_n\|^2}_{1}$

$\Rightarrow$ не $\exists$ константы α, ограничивающей норму $\hat{q}|\psi\rangle$ для $\forall |\psi\rangle \in D_q$.

Для $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ можно взять, например

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \cos(nx) & 0 \le x \le \pi \\ 0 & x \notin [0, \pi] \end{cases}$$

Теперь $\|\psi_n\|^2 = \pi/2 \quad n \neq 0$

$$\hat{p}\psi_n = \begin{cases} -\frac{\hbar}{i} n \sin(nx) & 0 \le x \le \pi \\ 0 \end{cases}$$

$\Rightarrow \|\hat{p}|\psi_n\rangle\|^2 \sim n^2 \to \infty$

Рассмотрим теперь вопрос о спектре оператора. В конечномерном пространстве число λ_0 называется

Собственным значением оператора A если линейное уравнение

$$(A - \lambda_0 E)|\psi\rangle = 0 \quad (E \text{ — тождеств. оператор})$$

имеет ненулевое решение $|\psi\rangle \in V$.

При этом оператор $Q(\lambda) = A - \lambda E$ не обратим в точке $\lambda = \lambda_0$.

В конечномерном случае набор собственных значений представляет собой дискретное множество чисел и называется спектром оператора A.

В ∞ мерном Гильбертовом пространстве $\mathcal{H}(\mathbb{C})$ ситуация сложнее.

$\boxed{10}$ Комплексное число λ_0 принадлежит резольвентному множеству оператора A, если оператор $R_A(\lambda_0) = (A - \lambda_0 E)^{-1}$ определён и ограничен на всём Гильбертовом пространстве $\mathcal{H}(\mathbb{C})$.

Оператор $R_A(\lambda) = (A - \lambda E)^{-1}$ называется резольвентой оператора A.

Точки резольвентного множества называются, также, регулярными значениями оператора A.

$\boxed{O}$ Дополнение резольвентного множества в $\mathbb{C}$ (т.е. множество нерегулярных точек (сингулярных)) называется спектром оператора A.

В результате получается больше возможностей для спектра (надо нарушить $\exists$ и ограниченность резольвенты):

- $\exists\ \lambda_0 \in \mathbb{C}$, такое, что линейное уравнение $(A - \lambda_0 \mathbb{E})|\psi\rangle = 0$ имеет ненулевое решение $|\psi\rangle \in \mathcal{H}(\mathbb{C})$.

В этом случае оператор $R(\lambda_0)$ просто не существует, т.к. $Q(\lambda_0) = A - \lambda_0 \mathbb{E}$ не обратим.

Такое λ_0 называется собственным значением оператора A. Набор собств. значений образует дискретный спектр A.

- Линейное уравнение $(A-\lambda_0 E)|\psi\rangle = 0$ имеет только тривиальное решение $\Rightarrow$ оператор $R(\lambda_0) = (A-\lambda_0 E)^{-1}$ $\exists$, но определён не на всём $\mathcal{H}$, а на <u>плотном множестве</u> в $\mathcal{H}$ и является на нём <u>неограниченным</u> оператором.

$\boxed{\text{Зам.}}$ Требование неограниченности существенно, иначе ~~ее~~ $R(\lambda_0)$ можно было бы доопределить на всё простр. $\mathcal{H}$ по ~~не~~непрерывности и λ_0 было бы регулярным значением.

В этом случае говорят, что λ_0 принадлежит <u>непрерывному</u> спектру оператора A.

- Линейное уравнение $(A-\lambda_0 E)|\psi\rangle = 0$ имеет только тривиальное решение, но область определения резольвенты $R(\lambda_0) = (A-\lambda_0 E)^{-1}$ <u>не плотна</u> в $\mathcal{H}(\cdot)$

Такие λ_0 принадлежат
<u>остаточному спектру</u> оператора A.
Этот случай достаточно экзотический и мы его упомянули лишь для полноты картины. Все наблюдаемые, которые будут встречаться в нашем курсе, остаточного спектра не имеют.

<u>Пример остаточного спектра</u>

(a) В $\mathcal{H}(\mathbb{C}) = l_2(\mathbb{C})$ зададим оператор $\hat{A}$ действием на $\forall$ последовательности $f = (f_1, f_2, \dots) \in l_2$ следующим правилом:

$$Af = (0, f_1, f_2, \dots)$$

Число $\lambda_0 = 0$ принадлежит остаточному спектру A. Действительно, линейное уравнение

$$(A - \lambda_0)f \Big|_{\lambda_0 = 0} = Af = 0$$

имеет только тривиальное решение $f = 0$.
$\Rightarrow \lambda_0 = 0$ — не является Соб. Зн. A.

Однако $R(0) = (A - 0 \cdot E)^{-1} = A^{-1}$ определён только на <u>подмножестве</u> последовательностей $f \in l_2$, у которых <u>$f_1 = 0$</u>. А такое подмножество не плотно в l_2.

(б) Пример из <u>Банахова</u> пространства.

(Банахово пр-во: линейное нормированное пространство, <u>полное</u> относительно сходимости по своей норме).

Рассм. пространство непрерывных функций на отрезке $[0,1]$: $C[0,1]$.

Норма $\|\psi(x)\| = \sup\limits_{x \in [0,1]} |\psi(x)|$.

Оператор $\hat{q}$ умножения на координату

$$\hat{q}\,\psi(x) = x\,\psi(x).$$

$\boxed{Y}$ Любое вещественное число $\lambda_0 \in [0,1]$ относится к дискретному спектру оператора $\hat{q}$.

Действительно, на пространстве непрерывных функций $C[0,1]$ линейное уравнение

$$(\hat{q}-\lambda_0\mathbb{E})|\psi\rangle=(x-\lambda_0)\psi(x)=0$$

имеет только тривиальное решение $\psi(x)\equiv 0$. При этом оператор $(\hat{q}-\lambda_0\mathbb{E})$ при $\lambda_0\in[0,1]$ обратим только на функциях, как минимум зануляющихся в точке $x=\lambda_0$ (необх. условие). А подмножество таких функций не плотно в $C[0,1]$ относительно нормы $\sup\limits_{x\in[0,1]}|\psi(x)|$.

Здесь верно, кстати, что спектр оператора существенно зависит от топологии (или, точнее, от определения сходимости) на соответствующем пространстве.

Дальше мы ограничимся рассмотрением самых важных для нашего курса операторов $\hat{q}$ и $\hat{p}$. Дополнительные детали общей теории самосопряжённых операторов на $\mathcal{H}(\mathbb{C})$ можно посмотреть в книге B.C. Hall "Quantum theory for mathematicians" (гл. 9-10.)

Поскольку в пространстве $L_2(\mathbb{R})$

$$\hat{q}\,\psi(x) = x\,\psi(x) \qquad \hat{p}\,\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}$$

(одна из возможных реализаций), то, фактически, нас будут интересовать самосопряжённые операторы представляющие собой дифференциальные операторы с полиномиальными коэффициентами.

— и —

Прежде всего, поговорим об области определения операторов $\hat{q}$ и $\hat{p}$. Ясно, что эти операторы не определены на на всем $L_2(\mathbb{R})$:

например $\psi(x) = \frac{1}{1+|x|} \notin \mathcal{D}_{\hat{q}}$,

а $\psi(x) = e^{-x^2}\sin(e^{2x^2}) \notin \mathcal{D}_{\hat{p}}$.

$\boxed{!}$ Напомним, что область определения $\hat{q}$ и $\hat{p}$ следует выбирать так, чтобы $\hat{q}$ и $\hat{p}$ оказались самосопряженными операторами.

$\boxed{У}$ Области определения $\mathcal{D}_{\hat{q}}$ и $\mathcal{D}_{\hat{p}}$ задаются подпространствами $\mathcal{H}(\mathbb{C})$ вида:

$$\mathcal{D}_{\hat{q}} = \{ \psi(x) \in L_2(\mathbb{R}) : \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi|^2 dx < \infty \}$$

$$\mathcal{D}_{\hat{p}} = \{ \psi(x) \in L_2(\mathbb{R}),\ \psi(x) - \text{абсолютно непрерывная функция} \}$$

$\mathcal{D}_{\hat{q}}$ и $\mathcal{D}_{\hat{p}}$ - всюду плотные множества в $L_2(\mathbb{R})$, и операторы $\hat{q}$ и $\hat{p}$ - самосопряженные $\hat{q}^{+} = \hat{q}$ $\hat{p}^{+} = \hat{p}$.

Напоминание об абсолютно непрерывных функциях.

$\boxed{О}$ $f(x)$ <u>абсолютно непрерывна</u> на $[a,b] \subset \mathbb{R}$ (возможно $a=\infty$ или $b=\infty$ или оба конца $\to \infty$) если $\forall \varepsilon > 0$ $\exists \delta > 0$ такое, что для любого конечного набора попарно не пересекающихся интервалов $(x_i; y_i) \subset [a,b]$ со свойством
$$\sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i| < \delta \Rightarrow \sum_{i=1}^{n} |f(x_i) - f(y_i)| < \varepsilon.$$

$\boxed{СЛ}$ Если $f(x)$ <u>абсолютно непрерывна</u> на $[a,b]$, то она <u>равномерно непрерывна</u> на $[a,b]$. Достаточно взять $n=1$ в определении.

Важные свойства абсолютно непрерывных функций.

(1) Если $f(x)$ абсолютно непрерывна на $[a,b]$ то она <u>дифференцируема</u> почти всюду на $[a,b]$ (т.е. <u>не</u> дифф. на множестве меры 0), её производная $f'(x)$ – интегрируема по Лебегу и
$$f(x) - f(a) = \int_a^x f'(x)\,dx.$$

(2) Если f и g – абсолютно непрерывны, то справедлива формула $\int$-я по частям:

$$\int_a^b f'g\,dx = f(b)g(b) - f(a)g(a) - \int_a^b fg'\,dx.$$

Рассмотрим вопрос о спектре операторов $\hat{q}$ и $\hat{p}$. Спектр $\hat{q}$ и $\hat{p}$ — чисто непрерывный и заполняет всю веществ. ось. Рассмотрим для $\hat{q}$.

$\boxed{1}$ $\forall$ комплексное число $\lambda = a + ib$ с $b \neq 0$ принадлежит резольвентному множеству $\hat{q}$ и $\hat{p}$.

Действительно $R_{\hat{q}}(\lambda) = (\hat{q} - \lambda E)^{-1}$ определено для $\underline{\forall \psi(x) \in L_2}(\mathbb{R})$ если $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$:

$$R_{\hat{q}}(\lambda)\psi = \frac{\psi(x)}{x-\lambda} \Rightarrow \|R_{\hat{q}}\psi\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\psi(x)|^2}{|x-\lambda|^2}dx =$$

$$= \int \frac{|\psi(x)|^2}{(x-a)^2+b^2}dx \leqslant \frac{1}{b^2}\int |\psi(x)|^2 dx < \infty,$$

т. к. $\psi(x) \in L_2(\mathbb{R})$.

Ограниченность $R_{\hat{q}}(\lambda)$ тоже следует отсюда:

$$\|R_{\hat{q}}\psi\| \leqslant \underbrace{\frac{1}{|b|}}\|\psi\| \quad \forall \psi \in L_2$$

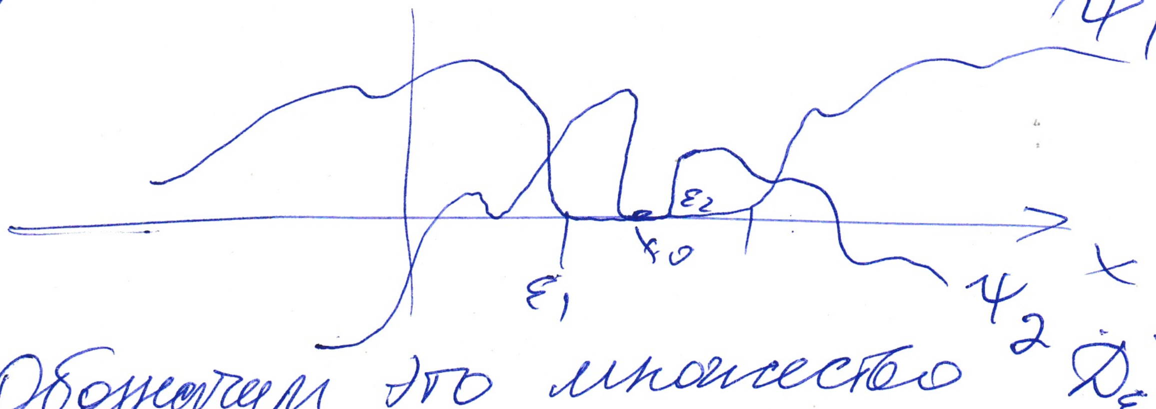
общая Const для $\forall \psi(x)$.

Поэтому согласно определению, спектр $\hat{q}$ лежит на вещественной оси (дополнение в $\mathbb{C}$ множества комплексных λ с $\operatorname{Im}\lambda \neq 0$).

Убедимся, что $\forall x_0 \in \mathbb{R}$ принадлежит непрерывному спектру $\hat{q}$.

Линейное уравнение $(\hat{q} - x_0 \mathbb{E})|\psi\rangle = (x - x_0)\psi(x) = 0$

имеет в $L_2(x)$ решение, эквивалентное тождественному нулю. $\Rightarrow$ дискретного спектра нет и оператор $R_{\hat{q}}(x_0) = (\hat{q} - x_0 \mathbb{E})^{-1}$ $\exists$. Однако $R_{\hat{q}}(x_0)$ определён не на всём $L_2(\mathbb{R})$, а только на функциях эквивалентных тождественному нулю в некоторой окрестности x_0 (эта окрестность своя для каждой ф-ции из области определения).

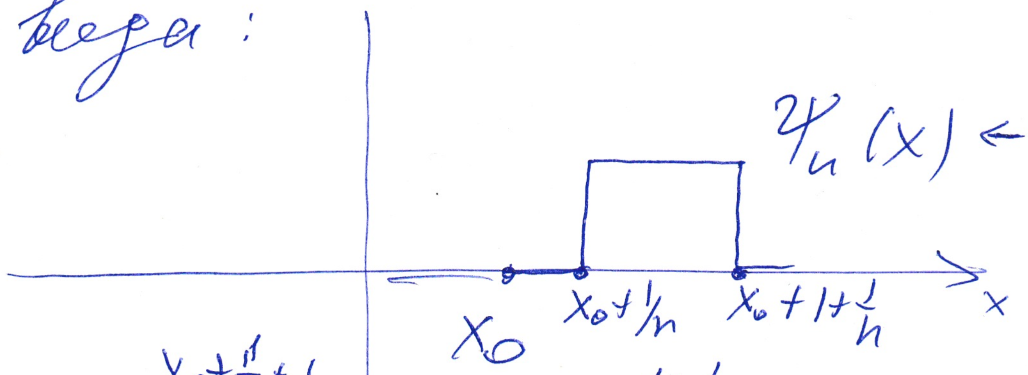


Обозначим это множество $\mathcal{D}_\varepsilon(x_0)$

Очевидно, для таких функций

$$\|R_{\hat q}(x_0)\psi\|^2 = \int_{-\infty}^{x_0-\varepsilon} \frac{|\psi(x)|^2 dx}{|x-x_0|^2} + \int_{x_0+\varepsilon}^{\infty} \frac{|\psi(x)|^2}{|x-x_0|^2}dx < \infty.$$

При этом легко видеть, что $R_{\hat q}(x_0)$ <u>не ограничен</u> на этой области определения: рассмотрим последовательность $\psi_n(x)$ вида:

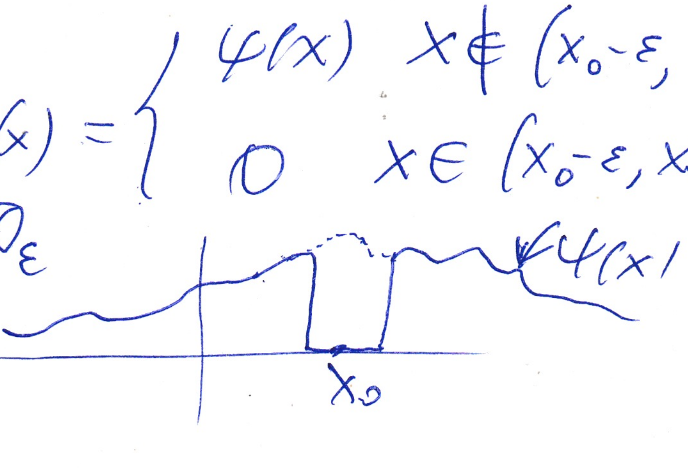


$\psi_n(x) \leftarrow \|\psi_n\| = 1 \ \forall n$

$$\|R_{\hat q}\psi_n\|^2 = \int_{x_0+\frac{1}{n}}^{x_0+\frac{1}{n}+1} \frac{dx}{(x-x_0)^2} = \int_{\frac{1}{n}}^{1+\frac{1}{n}} \frac{dy}{y^2} = n - \frac{n}{n+1} \to \infty, \quad n\to\infty$$

И очевидно, что $D_\varepsilon(x_0)$ плотно в L_2: $\forall\, \psi(x)\in L_2$ можно сколь угодно точно по норме L_2 приблизить ф-цией из $D_\varepsilon(x_0)$:

$$\underset{\in L_2}{\psi(x)} \longrightarrow \underset{\in D_\varepsilon}{\varphi(x)} = \begin{cases} \psi(x) & x\notin(x_0-\varepsilon,\ x_0+\varepsilon) \\ 0 & x\in(x_0-\varepsilon,\ x_0+\varepsilon) \end{cases}$$



Заметим теперь что работать с полной областью определения $\mathcal{D}_{\hat{q}}$ и $\mathcal{D}_{\hat{p}}$ неудобно. Мы хотим найти плотное в $L_2(\mathbb{R})$ подмножество, на котором определены любые степени $\hat{q}$, $\hat{p}$ и их произведения, т.е. определена вся алгебра дифф. операторов с полиномиальными коэффициентами.

Такое подпространство в $L_2(\mathbb{R})$ есть: это пространство $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ быстроубывающих функций (пространство Шварца)

$\boxed{D}$ $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ состоит из ∞ дифференцируемых функций веществ. аргумента, убывающих вместе с $\forall$ своими производными быстрее $\forall$ степени $\frac{1}{x}$ при $|x| \to \infty$:

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) = \{\varphi(x) \in C^\infty(\mathbb{R}), \quad \lim_{|x|\to\infty} x^n \frac{d^m\varphi}{dx^m} = 0 \quad \forall\, m, n \geq 0,$$

Внутри $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ есть плотное подмножество $\mathcal{D}(\mathbb{R})$ — ∞ дифференцируемых финитных функций.

В реальности все вектора состояния могут считаться принадлежащими пространству $\mathcal{D}(\mathbb{R})$, но $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ немного удобнее математически, в частности, $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ инвариантно относительно преобразования Фурье.

Обобщённые собств. вектора.

Мы уже убедились, что наличие базиса собственных векторов у самосопряжённого оператора в конечномерном пространстве или у оператора с чисто дискретным спектром в Гильбертовом пространстве (на примере Гармонического осциллятора) является крайне удобным фактом. В частности, это позволяет придать смысл понятию функции от неограниченного оператора.

Если $\hat{A} = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \underbrace{|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|}_{\hat{P}_{\alpha_n}}$ — спектральное разложение $\hat{A}$ (α_n — с. значение $\hat{A}|\varphi_n\rangle = \alpha_n|\varphi_n\rangle$)

то $f(\hat{A}) \overset{\text{def}}{=} \sum_{n=1}^{\infty} f(\alpha_n)\,|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$. ($\bigstar$)

Дело в том, что для неограниченных операторов часто невозможно пользоваться разложением функции f в ряд Тейлора (как это всегда можно делать в конечномерном случае) в силу расходимости соответствующего операторного ряда.
А определение ($\bigstar$) требует только чтобы имели смысл числа $f(\alpha_n)$ – значения $f(x)$ на спектре $\hat{A}$.

Чтобы понять, как выйти из этого затруднения для оператора с непрерывным спектром, посмотрим снова на уравнение для собственного вектора $\hat{q}$:

$$(x - x_0)\,\psi(x) = 0.$$

В пространстве обычных (например, непрерывных функций или функций из $\mathcal{S}(\mathbb{R}^1)$) решение только нулевое.
Но это уравнение имеет нетривиальное решение в пространстве

"обобщённых функций" или линейных непрерывных функционалов на $\mathcal{S}(\mathbb{R})$. Это решение — хорошо известная δ-функция Дирака, т.е. функционал $\delta_{x_0}: \mathcal{S}(\mathbb{R}) \to \mathbb{C}$ действующий по правилу:

$$\delta_{x_0}[\varphi] = \varphi(x_0) \quad \forall \varphi(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}).$$

Такое решение позволяет выдвинуть следующую идею. Фактически, нам необходимо уметь вычислять "скалярные произведения" собственных векторов и векторов, представляющих состояние системы, чтобы, например, получать амплитуды вероятности результатов измерений. Что мы имеем в случае чисто дискретного спектра:

$\hat{A}|\varphi_n\rangle = \alpha_n|\varphi_n\rangle$ — базис с. векторов самосопряжённого оператора. Тогда для $\forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H}(\mathbb{C})$:

$$|\psi\rangle = \sum c_n |\varphi_n\rangle, \quad c_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle$$ — амплитуда вероятности.

$$\hat{A} = \sum_n \alpha_n \hat{P}_n = \sum \alpha_n \underbrace{|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|}_{\hat{P}_n}$$

проектор на собств. подпространство (для простоты считаем спектр невырожденным

$\hat{\mathbb{I}} = \sum_n \hat{P}_n$ – полнота набора собств. векторов.

Итак: $\bar{c}_n = \langle\psi|\varphi_n\rangle$ – $\forall$ собственный вектор $|\varphi_n\rangle$ задаёт антилинейный непрерывный (из-за свойств скал. произведения) функционал на $\mathcal{H}$.

По т. Рисса верно и обратное: $\forall$ непрерывному антилинейному функционалу однозначно сопоставляется вектор из $\mathcal{H}$, такой, что действие функционала даётся соответствующим скалярным произведением.

Обозначим $\mathcal{H}^\times$ пространство (анти)линейных непрерывных функционалов на $\mathcal{H}$. По т. Рисса, следовательно, можно считать $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\times$.

Давайте предположим, что оператор $\hat{q}$ обладает "обобщёнными" собственными векторами, которые будут антилинейными непрерывными функционалами на пространстве $\underline{\mathcal{S}(\mathbb{R})}$.

Определим на $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ более сильную сходимость, чем сходимость по норме $L_2(\mathbb{R})$:

$\boxed{\text{О}}$ Последовательность $\{\varphi_n(x)\} \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ сходится к нулю, если $\forall\, k \geq 0$ и $p \geq 0$ $\lim\limits_{n\to\infty} \sup\limits_{x\in\mathbb{R}} \left| x^k \frac{d^p \varphi_n}{dx^p} \right| = 0$.

Обозначение: $\varphi_n \xrightarrow[n\to\infty]{\mathcal{S}} 0$

$\boxed{\text{Замечание}}$ Очевидно, если $\varphi_n \xrightarrow{\mathcal{S}} 0$, то $\|\varphi_n\|_{L_2} \xrightarrow[n\to\infty]{} 0$.

Можно показать, что определённая в $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ сходимость — метризуемо

-24-

возможная сходимость, относительно которой пространство $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ становится <u>полным</u> и операторы $\hat{q}$ и $\hat{p}$ (а также все дифф. операторы с полиномиальными коэффициентами) <u>непрерывны</u> на $\mathcal{S}(\mathbb{R})$.

Здесь непрерывность оператора понимается в смысле сходимости в $\mathcal{S}(\mathbb{R})$: $\hat{A}: \mathcal{S}(\mathbb{R}) \to \mathcal{S}(\mathbb{R})$ непрерывен, если $\forall\ \varphi_n \xrightarrow{\mathcal{S}} \varphi \Rightarrow \hat{A}\varphi_n \xrightarrow{\mathcal{S}} A\varphi$.

Понятия <u>ограниченности</u> тут <u>нет</u>, т.к. сходимость $\xrightarrow{\mathcal{S}}$ не связана с нормой.

$\boxed{\text{О}}$ Множество непрерывных антилинейных функционалов на $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ обозначим $\mathcal{S}^\times$: $F \in \mathcal{S}^\times \Leftrightarrow \forall\ \varphi_n \xrightarrow[n\to\infty]{\mathcal{S}} \varphi \Rightarrow F(\varphi_n) \xrightarrow[n\to\infty]{\mathbb{C}} F(\varphi)$ — сходится как последовательность комплексных чисел.

В силу того, что из $\varphi_n \xrightarrow[n\to\infty]{\mathcal{S}} \varphi \Rightarrow$

$\Rightarrow \|\varphi_n\|_{L_2} \longrightarrow \|\varphi\|_{L_2}$, то $\forall$ функционал из $\mathcal{H}^*$ есть и функционал из $\mathcal{Y}^*$: $\mathcal{H}^* \subset \mathcal{Y}^*$. Имеем, таким образом тройку пространств:

$$\mathcal{Y}(\mathbb{R}) \subset \underset{L_2(\mathbb{R})}{\underset{\parallel}{\mathcal{H}}} \overset{\text{т. Рисса}}{=} \mathcal{H}^* \subset \mathcal{Y}^*$$

Эта тройка называется оснащением Гильбертова пространства $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R})$.

Пусть теперь $\hat{A}$ – <u>самосопряженный</u> оператор в $\mathcal{H}$, такой, что $\underline{\mathcal{Y}(\mathbb{R}) \subset \mathcal{D}_{\hat{A}}}$ и подпространство $\mathcal{Y}(\mathbb{R})$ инвариантно <u>относительно</u> $\hat{A}$: $\forall \varphi \in \mathcal{Y}(\mathbb{R})$ $\hat{A}\varphi \in \mathcal{Y}(\mathbb{R})$

$\boxed{\text{Зам.}}$ Например, это верно для оператора, непрерывного на $\mathcal{Y}(\mathbb{R})$ относительно сходимости $\xrightarrow{\mathcal{Y}}$. В частности, все интересующие нас дифференциальные операторы с полиномиальными коэффициентами обладают этим свойством.

Распространим действие оператора $\hat{A}$ на <u>функционалы</u> из $\mathcal{Y}^*$ по правилу: $\forall F \in \mathcal{Y}^*$ $\hat{A}F \in \mathcal{Y}^*$ и действует так $\hat{A}F(\varphi) = F(\hat{A}\varphi)$ $\forall \varphi \in \mathcal{Y}(\mathbb{R})$

Введем новое обозначение для действия антилинейного функционала $F(\varphi)$, напоминающее скалярное произведение:

$$F(\varphi) = \langle \varphi | F \rangle \quad \forall |\varphi\rangle \in \mathcal{Y}(\mathbb{R}).$$

Тогда наше действие $\hat{A}$ на F запишется в виде

$$\langle \varphi | \hat{A} F \rangle = \langle \hat{A} \varphi | F \rangle$$

$\boxed{\text{О}}$ Функционал $F \in \mathcal{Y}^*$ называется обобщённым собственным вектором $\hat{A}$ если $\forall \varphi \in \mathcal{Y}(\mathbb{R})$ выполнено равенство

$$F(\hat{A}\varphi) = \alpha F(\varphi),$$

где константа α называется обобщённым собств. значением $\hat{A}$ на собств. векторе F. ~~Видим~~

В новых обозначениях:

$$\langle \hat{A}\varphi | F\rangle = \alpha\langle \varphi | F\rangle \quad \forall \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

$\Rightarrow A|F\rangle = \alpha|F\rangle$ — обозначение.

$\boxed{\text{У}}$ (<u>Спектральная теорема</u>) Пусть $\hat{A}$ — самосопряжённый оператор в $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R})$, $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset \mathcal{D}_A$, для $\forall |\varphi\rangle \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$: $\hat{A}|\varphi\rangle \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$.

Пусть $\hat{A}$ имеет непрерывный спектр, заполняющий вещественный интервал $[a, b] \subset \mathbb{R}$, а также (возможно) дискретный спектр $\{\alpha_n\}$ с собств. векторами $|\varphi_n\rangle \in \mathcal{H}$.

Тогда для $\forall \alpha \in [a, b]$ найдётся антилинейный непрерывный функционал $|\alpha\rangle \subset \mathcal{S}^+$, собственный для $\hat{A}$: $\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ и справедливы формулы:

$\forall |\varphi\rangle \in \underline{\underline{\mathcal{S}(\mathbb{R})}}$:

$$|\varphi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle + \int_a^b |\alpha\rangle\langle\alpha|\varphi\rangle \, d\alpha$$

$$\hat{A} = \sum_n \alpha_n \hat{P}_n + \int \alpha \hat{P}_\alpha \, d\alpha$$

↑ как оператор на $\mathcal{S}(\mathbb{R})$

В этих формулах

$\varphi(\alpha) \equiv \langle \alpha | \varphi \rangle = \langle \varphi | \alpha \rangle$

значение функционала $|\alpha\rangle$ на $|\varphi\rangle$

$c_n = \langle \varphi_n | \varphi \rangle$

$\hat{P}_\alpha |\varphi\rangle := |\alpha\rangle \varphi(\alpha)$

Интегральные формулы понимаются в смысле функционалов на $\mathcal{Y}^*$

$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{Y}(\mathbb{R})$

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_n c_n \langle \psi | \varphi_n \rangle + \int_a^b \langle \psi | \alpha \rangle \langle \alpha | \varphi \rangle d\alpha$$

$$\int_a^b \overline{\psi(\alpha)}\, \varphi(\alpha)\, d\alpha$$

и т. п.

Найдём теперь обобщённые собств. вектора для $\hat{q}$ и $\hat{p}$.

Вначале кратко напомним некоторые факты о пространстве обобщённых функций или (анти)линейных непрерывных функционалах на $\mathcal{Y}(\mathbb{R})$.

Непрерывные ~~фу~~ линейные функционалы на $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ можно разделить на 2 группы: регулярные и сингулярные функционалы.

[О] Функция $f(x): \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ называется функцией медленного роста, если она локально интегрируема на $\mathbb{R}$ (т. е. $\exists \int_a^b f(x)dx$ для $\forall$ конечного сегмента $[a,b]$) и $\exists$ натуральное число p и константа $C \geq 0$ такие, что

$$\cancel{(1+|x|^p)^{-1}|f(x)| \leq C \quad \forall x \in \mathbb{R}}.$$

$$|f(x)| \leq C(1+|x|^p) \quad \forall x \in \mathbb{R}$$

[У] Любая функция медленного роста задаёт антилинейный непрерывный функционал на пространстве $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ по формуле

$$\langle \varphi | f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi}(x) f(x) dx \qquad (*)$$

В частности, $\forall$ функция из $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ является функцией медленного роста.

Самые известные функционалы второго типа, т.е. сингулярные, это δ-функция Дирака, $P\frac{1}{x}$ и другие:

$$\delta_{x_0}[\varphi] = \varphi(x_0)$$

$$P\frac{1}{x}[\varphi] = V.p.\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\varphi(x)}{x}dx \stackrel{def}{=} \lim_{\varepsilon\to 0}\left(\int_{-\infty}^{-\varepsilon} + \int_{\varepsilon}^{+\infty}\right)\frac{\varphi(x)}{x}dx.$$

$\boxed{\text{Зам.}}$ Очень популярна запись δ_{x_0} в виде ~~ф~~ ядерного функционала с "ядром" $\delta(x-x_0)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x_0)\varphi(x)dx = \varphi(x_0)$$

На самом деле, такой функции "$\delta(x-x_0)$" не существует и эта запись лишь условный символ, определяющий действие δ_{x_0}.

Тем не менее, δ_{x_0} можно представлять как слабый предел регулярных функционалов.

[O] Функционал $F \in \mathcal{S}^*$ является слабым пределом последовательности функционалов $\{F_n\} \subset \mathcal{S}^*$, если для $\forall |\varphi\rangle \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ выполнено равенство:

$$\exists \lim_{n \to \infty} \langle \varphi | F_n \rangle = \langle \varphi | F \rangle$$

Последовательности регулярных функционалов, сходящихся к δ-функции.

$$\boxed{w\text{-}\lim_{\alpha \to +\infty} \frac{\sin(\alpha x)}{x} = \pi \delta(x)} \Leftrightarrow$$

$$\lim_{\alpha \to +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \underbrace{\frac{\sin \alpha x}{x}}_{f_\alpha(x)} dx = \pi \varphi(0)$$

$f_\alpha(x)$ – функция медленного роста

$$\boxed{w\text{-}\lim_{\varepsilon \to +0} \frac{1}{\sqrt{\pi \varepsilon}} e^{-\frac{x^2}{\varepsilon}} = \delta(x)}$$

В данном случае $f_\varepsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi\varepsilon}} e^{-\frac{x^2}{\varepsilon}} \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$

Это общее утверждение

[У] $\forall$ сингулярный линейный функционал на $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ может быть представлен в виде слабого предела регулярных функционалов с ядрами из $\mathcal{S}(\mathbb{R})$.

Важное следствие формулы с $\frac{\sin\alpha x}{x}$:

$$\frac{\sin\alpha x}{x} = \frac{e^{i\alpha x} - e^{-i\alpha x}}{2ix} = \int_{-\alpha}^{\alpha} e^{ipx}\frac{dp}{2}$$

Поэтому получаем Фурье-разложение $\delta(x)$:

$$\boxed{\delta(x) = \lim_{\alpha\to+\infty}\int_{-\alpha}^{\alpha} e^{\pm ipx}\frac{dp}{2\pi} = \text{v.p.}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\pm ipx}\frac{dp}{2\pi}}$$

И, наконец, очень важный функционал — преобр. Фурье.

$\boxed{\text{D}}$ $$\Phi_p(\varphi) \overset{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\varphi(x)\frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \equiv \tilde{\varphi}(p)$$

Определено для $\forall$ функции из $L_1(\mathbb{R})$, а на $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ обладает многими полезными свойствами:

- $\tilde{\varphi}(p)$ — как функция параметра $p\in\mathbb{R}$ есть функция из $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, т.е. $\tilde{\varphi}\in C^\infty(\mathbb{R})$ и $\lim\limits_{|p|\to\infty} p^n\frac{d^k\tilde{\varphi}}{dp^k}\to 0$ $\quad\forall\, n\geq 0,\ k\geq 0.$

• Преобр. Фурье — как функции от p — невырожденное непрерывное отображение $\mathcal{S} \to \mathcal{S}$.

• Преобр. Фурье — изометрия на $\mathcal{S}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = \langle\varphi|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\varphi}(p)|^2 dp$$

• Обратное преобр. Фурье на $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ поточечно восстанавливает $\varphi(x)$:

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{px}{\hbar}} \tilde{\varphi}(p) \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Построим теперь обобщённые с.в. операторов $\hat{q}$ и $\hat{p}$.

$\boxed{\text{У}}$ Обобщённым собств. вектором оператора $\hat{q}$ с с.з. $x_0 \in \mathbb{R}$ является функционал δ_{x_0}:

$$\hat{q}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle \Rightarrow \langle\varphi|x_0\rangle = \overline{\varphi(x_0)}$$

функция из $\mathcal{S}(\mathbb{R})$

Доказательство ~~сразу~~ следует =34=
из определения обобщённого собств.
вектора. $\hat{q}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$ означает,
что для $\forall$ ~~$\varphi(x)$~~ ~~$|$~~ $\varphi\rangle \in S(\mathbb{R})$:

$$\langle \hat{q}\varphi|x_0\rangle = x_0\langle\varphi|x_0\rangle$$

Но $\hat{q}\varphi(x) = x\varphi(x) = \psi(x) \in S \Rightarrow$

$$\Rightarrow \langle\hat{q}\varphi|x_0\rangle = \langle\psi|x_0\rangle = \psi(x_0) =$$
$$= x_0\varphi(x_0) = x_0\langle\varphi|x_0\rangle$$

Можно ли придать смысл
"скалярному произведению" $\langle y||x\rangle$?

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}|x\rangle\langle x|\varphi\rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|x\rangle\overline{\varphi}(x)dx$$

$$\langle y|\varphi\rangle \underset{def}{=} \overline{\varphi}(y) = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle y||x\rangle\,\overline{\varphi}(x)dx \quad \forall\varphi(x)\in S$$

$\Rightarrow \langle y||x\rangle = \delta(x-y)$ — "ядро" δ-функции

— Это согласовано, т.к.

$$\langle y|\varphi\rangle = \overline{\langle\varphi|y\rangle} \underset{def}{=} \overline{\delta_y[\varphi]} = \overline{\varphi}(y)$$

V) Обобщённым собств. векторам оператора импульса $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ является функционал преобр. Фурье.

$$\hat{p}\,|p_0\rangle = p_0|p\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \langle\varphi|p_0\rangle = \overline{F_{p_0}(\varphi)} = \overline{\tilde{\varphi}(p_0)}$$

Доказательство.

Найдём ядро функционала $|p\rangle$ (предполагая, что он регулярный):

$$\langle\varphi|p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi(x)}\, f_p(x)\,dx$$

Тогда, по определению обобщенного с. в:

$$\langle\hat{p}\varphi|p_0\rangle = p_0\langle\varphi|p_0\rangle$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d\varphi}{dx}\right)} f_{p_0}(x)\,dx = \Big($$ бем по частям, внеинтегральные члены $= 0$, т.к. $f_p(x)$ – ф-ция медленного роста, а $\varphi(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ $\Big) = \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\varphi(x)}\frac{d f_{p_0}}{dx}\,dx$

Итак, на ядро $f_{p_0}(x)$ получаем дифф. уравнение:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d f_{p_0}(x)}{dx} = p_0 f_{p_0}(x)$$

$$\Rightarrow \quad f_{p_0}(x) = C e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}}$$

Константу C ("нормировка" с. в.) выберем равной $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ – для выполнения равенства Парсеваля: $\int |\varphi|^2 dx = \int |\tilde{\varphi}|^2 dp$.

Итак $\langle \varphi | p \rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \bar{\varphi}(x) e^{\frac{ipx}{\hbar}} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

или $\langle p | \varphi \rangle = \tilde{\varphi}(p) = \int \varphi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

Придадим смысл "скалярному произведению" $\langle x \| p \rangle$.

$$\mathbb{1} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\, dx$$

$$\langle \varphi | p \rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \langle \varphi | x \rangle \langle x \| p \rangle dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \bar{\varphi}(x) \langle x \| p \rangle dx$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \bar{\varphi}(x) e^{\frac{ipx}{\hbar}} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\Rightarrow \langle x \| p \rangle = \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = f_p(x) \text{ —}$$

— ядро преобразования Фурье.

И, наконец, из разложения

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \underbrace{\langle p|\varphi\rangle}_{\tilde{\varphi}(p)} dp$$

$$\Downarrow$$

$$\langle q|\varphi\rangle = \tilde{\varphi}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle q\|p\rangle \tilde{\varphi}(p) dp$$

$\Rightarrow$ принимаем соглашение, что

$$\langle q\|p\rangle = \delta(q-p) \text{ — «ядро» } \delta\text{-функции.}$$