3.5. Собственные функции и собственные значения оператора в случае непрерывного спектра

В расширенном гильбертовом пространстве, включающем и ненормированные функции, любой эрмитов оператор может иметь обычные собственные значения, соответствующие собственным векторам,

$$\hat{A}\,|\,\psi_i\rangle = a_i\,|\,\psi_i\rangle\,, \qquad (70)$$

и так называемые «обобщённые собственные значения», соответствующие собственным векторам другого типа:

$$\hat{A}\,|\,\psi_a\rangle = a\,|\,\psi_a\rangle\,. \qquad (71)$$

Первые собственные значения являются дискретными, вторые – непрерывными. Множество всех собственных значений обоих типов называется <u>*спектром оператора*</u>.

Собственные функции второго типа нельзя нормировать таким же образом, как собственные функции, соответствующие дискретным собственным значениям. Собственные функции, соответствующие различным собственным значениям, по-прежнему ортогональны, но норма функции, вычисленная обычным образом, может равняться бесконечности.

<u>Пример</u>: собственные функции оператора импульса

$$\psi_p(x) = Ce^{i/\hbar\, p\cdot x}\,. \qquad (72)$$

Вычисляем норму функции:

$$\left\|\psi_p\right\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi_p(x)\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty}\left|C\right|^2 e^{-i/\hbar\, p\cdot x}e^{i/\hbar\, p\cdot x}dx = \left|C\right|^2\int_{-\infty}^{\infty}dx = \infty\,.$$

Мы видим, что способ нормировки, пригодный для функций дискретного спектра, приводит к расходимостям в случае непрерывного спектра.

Для нормировки собственных функций непрерывного спектра используют соотношение

$$\langle\psi_a\,|\,\psi_{a'}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_a(x)\,\psi_{a'}(x)\,dx = \delta(a-a') = \begin{cases}\infty,\ a=a'\\ 0,\ a\neq a'\end{cases}, \qquad (73)$$

здесь $\delta(a-a')$ – δ-функция Дирака (дельта-функция), обобщённая функция, сходная по смыслу с δ-символом Кронекера $\delta_{aa'}$. Дирак впервые ввёл её именно в контексте квантовой механики и использовал для демонстрации эквивалентности матричного подхода Гейзенберга и волновых функций, введенных Шредингером.

Дельта-функция получается при дифференцировании ступенчатой функции (единичной функции Хевисайда, или тета-функции)

$$\theta(x) = \begin{cases}1,\ x>0\\ 0,\ x<0\end{cases}$$

и определяется через интегральное соотношение (свёртка с δ-функцией): $\int_{-\infty}^{\infty} f(a)\,\delta(a-a')\,da = f(a')$ для произвольной функции *f(a).*

При $a'=0$ имеем более простое выражение:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(a)\,\delta(a)\,da = f(0). \tag{74}$$

Если положить в (74) *f(a)* =1, то получим свойство

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(a)\,da = 1. \tag{75}$$

δ-функция имеет интегральное представление следующего вида:

$$\delta(a) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, e^{i\xi a}. \tag{76}$$

Как видно из данного представления (для этого нужно заменить переменную интегрирования на $-\xi$), дельта-функция Дирака – чётная, $\delta(a) = \delta(-a)$, или $\delta(a - a') = \delta(a' - a)$. Применим представление (76) к нормировке собственных функций оператора импульса (72):

$$\langle \psi_p \,|\, \psi_{p'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_p(x)\,\psi_{p'}(x)\,dx = \delta(p - p') \Rightarrow$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |C|^2 e^{-i/\hbar\, p\cdot x} e^{i/\hbar\, p'\cdot x} dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i/\hbar\,(p-p')\cdot x} dx = \delta(p - p') \overset{(76)}{\Rightarrow} |C| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Функция Дирака позволяет записать точечное воздействие (поэтому она ещё называется единичной импульсной функцией), а также пространственную плотность физических величин, сосредоточенных в одной точке.

Пример. В классической механике δ-функцию можно представить как плотность распределения массы одномерной системы, представляющей собой точечную частицу единичной массы *m*, помещённую в начало координат: $\rho(x) = m\,\delta(x)$. Тогда масса вычисляется как интеграл по всему интервалу (в трёхмерном случае было бы – по всему объёму):

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} m\,\delta(x)\,dx.$$

Вернёмся к функциям непрерывного спектра: $\psi_a(x)$, $\forall a$ образуют полную систему функций, т. е. функция $\psi(x)$ может быть разложена (аналогично случаю дискретного спектра (63), но вместо суммирования здесь будет интегрирование) по $\psi_a(x)$:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(a)\,\psi_a(x)\,da. \tag{77}$$

Коэффициенты разложения $c(a)$ определяются из (77) таким образом:

$$\langle \psi_{a'} \,|\, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(a)\,\langle \psi_{a'} \,|\, \psi_a \rangle\,da \overset{(73)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} c(a)\,\delta(a - a')\,da = c(a') \quad \Rightarrow$$

$$c(a) = \langle \psi_a \,|\, \psi \rangle. \tag{78}$$

Итак, разложение полной функции по дискретному и непрерывному спектру имеет вид:

$$\psi(x) = \sum_n c_n\,\psi_n(x) + \int c(a)\,\psi_a(x)\,da. \tag{79}$$