# О квантовой механике Дирака и Гейзенберга

д.ф.-м.н. Зотьев Д.Б.

## § 1. Теория фон-Неймана

Привычные для физиков изложения квантовой механики (КМ), оперирующие дельта-функцией Дирака $\delta(x)$, с точки зрения математики не удовлетворительны. Примером служит условие нормировки $\langle\Psi_{x'}|\Psi_{x''}\rangle = \delta(x'-x'')$. Знак равенства между числом, которым, казалось бы, является эрмитово произведение слева и сингулярной обобщенной функцией справа нуждается в формальных пояснениях.

На момент выхода в свет книги [1] (1930), которая подвела итог созданию КМ, такие пояснения были невозможны, т.к. теория обобщенных функций родилась позднее. Поэтому не удивительно, что блестящий математик Джон фон Нейман взялся за «очищение» КМ от дельта-функции, выпустив в 1932 книгу [2]. Сегодня она считается каноническим и абсолютно строгим изложением КМ. Из предисловия:

«*Книга Неймана является первым и до сих пор единственным доведенным до конца опытом изложения аппарата квантовой механики (на момент издания) с той последовательностью и строгостью, которой требуют обычно при построении математической теории. Поэтому только существованию этой книги мы обязаны нашей уверенностью в том, что квантовая механика представляет собой логически непротиворечивую схему*».

Вкратце рассмотрим теорию фон Неймана. Вместилищем волновых функций $\Psi(q)$ считается гильбертово пространство $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^n;\mathbb{C})$ функций $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ с интегрируемым по Лебегу квадратом модуля (определенных с точностью до значений на подмножестве меры ноль). Эрмитово произведение $(\Psi,\Phi) = \langle\Phi|\Psi\rangle = \int \Phi^*(q)\Psi(q)dq$.

Каждой физической величине $r$ данной квантовой системы соответствует эрмитов оператор $R:\mathcal{D}_R \to \mathcal{H}$ (также обозначаемый $\hat{r}$), заданный на всюду плотном в $\mathcal{H}$ подмножестве $\mathcal{D}_R$. Он должен быть замкнутым в том смысле, что для любого $\Phi \in \mathcal{H}$ и любой последовательности $\Phi_k \in \mathcal{D}_R$, сходящейся к $\Phi$, существование $\lim_k R(\Phi_k) = \Psi$ влечет за собой $\Psi = R(\Phi)$. Непрерывный оператор $R:\mathcal{D}_R \to \mathcal{H}$ является замкнутым в том и только том случае, когда $\mathcal{D}_R = \mathcal{H}$. Если область определения $R$ не может быть расширена с сохранением свойств эрмитовости и замкнутости, то оператор $R$ называется максимальным [2].

Проектором называется такой непрерывный эрмитов оператор $E : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, что $E^2 = E$ (т.е. ортогональная проекция на замкнутое подпространство $Im(E) \subset \mathcal{H}$). Разложением единицы называется непрерывное справа отображение $E$ из $\mathbb{R}$ в множество проекторов на $\mathcal{H}$, так что $\lim_{\lambda\to-\infty} E(\lambda) = 0$, $\lim_{\lambda\to+\infty} E(\lambda) = 1$ и для всех $\lambda' \leq \lambda''$ имеет место $Im(E(\lambda')) \subset Im(E(\lambda''))$. Тогда оператор $E(\lambda'') - E(\lambda')$ является проектором на ортогональное дополнение $Im(E(\lambda'))$ до $Im(E(\lambda''))$. Разложение единицы принадлежит эрмитову оператору $R$, если для любых $f, g \in \mathcal{H}$

$$\langle R(f)|g\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d\langle E(\lambda)f|g\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dh_{f,g}(\lambda) \tag{1}$$

где интеграл вычисляется по Стилтьесу и функция $h_{f,g}(\lambda)$ от $\lambda \in \mathbb{R}$ определяется параметрами $f, g$. Выражение (1) называется спектральным разложением $R$.

Каждому эрмитову оператору $R : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, который автоматически непрерывен в силу теоремы Хеллингера и Теплица [3], принадлежит единственное разложение единицы с указаными свойствами (спектральная теорема [2]). О замкнутых эрмитовых операторах $R$, не являющихся непрерывными, известно лишь одно. Если принадлежащее такому максимальному оператору разложение единицы $E$ существует, то оно единственно [2]. Единственность необходима, чтобы уравнение (1) имело физический смысл. Но вопрос о существовании $E$ является, вообще говоря, открытым. Для операторов $\hat{q}_j$ и $\hat{p}_j$, которые не являются непрерывными, разложения единицы построены явным образом [2]. Максимальные операторы, имеющие разложение единицы, фон Нейман назвал гипермаксимальными. Спектром называется множество точек $\lambda' \in \mathbb{R}$, ни в какой окрестности которых функция $E(\lambda)$ не является постоянной [2].

Ключевое предположение: каждой физической величине $r$ данной квантовой системы соответствует гипермаксимальный оператор $R : \mathcal{D}_R \to \mathcal{H}$, спектр которого состоит из всех возможных значений $r$ [2].

При этом собственными значениями $R$ являются те и только те $\lambda' \in \mathbb{R}$, в которых функция $E(\lambda)$ претерпевает разрыв, т.е., $E_-(\lambda') = \lim_{\lambda\to\lambda'-0} E(\lambda) \neq E(\lambda')$. Тогда все собственные векторы со значением $\lambda'$ составляют ортогональное дополнение $Im(E_-(\lambda'))$ до $Im(E(\lambda'))$. Множество собственных значений может быть пустым (например у операторов координат и импульсов), конечным или счетным [2].

Фон Нейман выделил еще 2 постулата. Первый состоит в том, что любой вещественной функции $F(r)$ от физической величины $r$ соответствует гипермаксимальный оператор $F(R)$. Тогда из (1) следует, что $\langle F(R)f|g\rangle = \int F(\lambda)d\langle E(\lambda)f|g\rangle$ для любых $f, g \in \mathcal{H}$. Второй постулат утверждает, что мат. ожидание величины $r$ в произвольном состоянии $\Psi(q)$ равно $\langle R(\Psi)|\Psi\rangle$. Отсюда следует важное утверждение.

Пусть дан набор величин $r_1, \dots, r_m$ с коммутирующими гипермаксимальными операторами $R_1, \dots, R_m$. Обозначим $E_j$ разбиение единицы, принадлежащее $R_j$. Пусть $\lambda'_j \le \lambda''_j$ для всех $j$ и $P_\Psi(\lambda', \lambda'')$ есть вероятность того, что в состоянии с волновой функцией $\Psi(q)$ каждая величина $r_j$ принимает значение из $(\lambda'_j; \lambda''_j]$. Тогда

$$P_\Psi(\lambda'; \lambda'') = \langle E_1(\lambda'_1; \lambda''_1)E_2(\lambda'_2; \lambda''_2) \dots E_m(\lambda'_m; \lambda''_m)\Psi|\Psi\rangle$$

где проекторы $E_j(\lambda'_j; \lambda''_j) = E_j(\lambda''_j) - E_j(\lambda'_j)$ коммутируют между собой. Отсюда следует, что $|\Psi(q)|^2$ есть плотность распределения обобщенных координат $q_1, \dots, q_n$.

Если спектр $s(R)$ оператора $R$ состоит только из собственных значений, то он не более, чем счетный, а разложение (1) сводится к тому, что любой вектор $\Psi \in \mathcal{H}$ разлагается по собственным векторам $R$, т.е., $\Psi = \sum_k \Psi_k$, где $R(\Psi_k) = \lambda_k \Psi_k$.

Дирак называет такие операторы наблюдаемыми, допуская непрерывный спектр собственных значений, так что всякий вектор состояния разлагается в интеграл:

$$|\Psi\rangle = \int_{s(R)} |\Psi_\lambda\rangle d\lambda \qquad R(|\Psi_\lambda\rangle) = \lambda|\Psi_\lambda\rangle \quad \forall \lambda \in s(R) \subset \mathbb{R}$$

Эрмитов оператор в гильбертовом пространстве не может иметь такого спектра. Среди математиков преобладает мнение о том, что любое пространство квантовых состояний является гильбертовым. По-видимому это верно для физически осуществимых состояний. Но нереализуемые состояния, которым отвечают векторы с бесконечной нормой, играют важную роль в КМ [1]. Они находят себе место в пространстве обобщенных функций, которое Дирак de'facto рассматривал, как «резервуар» для (бра,кет) векторов состояний. В статье описана строгая модель КМ на этой основе.

## § 2. Квантование по Гейзенбергу

Из книги [4] видно, как Гейзенберг пришел к идее матричной (квантовой) механики. Отправной точкой была классическая гамильтонова система:

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \qquad \dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \qquad j = 1, \dots, n \tag{1}$$

Гейзенберг предполагает, что на любой фазовой траектории каждая из величин $p_j, q_j$ разлагается в ряд Фурье:

$$p_j(t) = \sum_{(k_1,\dots,k_n)\in\mathbb{Z}^n} p_{j,k_1\dots k_n} e^{i(\sum_{j=1}^n k_j\omega_j)t} \qquad q_j(t) = \sum_{(k_1,\dots,k_n)\in\mathbb{Z}^n} q_{j,k_1\dots k_n} e^{i(\sum_{j=1}^n k_j\omega_j)t} \tag{2}$$

Здесь $\omega_j = \partial H/\partial s_j$, где $H = H(s_1, \ldots, s_n)$ и переменные $s_j$ канонически сопряжены с координатами $\varphi_j$, в которых данная траектория имеет уравнение $\varphi_j(t) = \omega_j t + c_j$ для некоторых констант $c_j$. Возможность разложения (2) в ряды Фурье предполагает, что $\varphi_j$ — угловые координаты (тогда $s_j$ — переменные действия).

Таким образом, de'facto Гейзенберг рассматривает интегрируемую систему в окрестности тора Лиувилля $T^n$. Он постулирует, что величины $p_j$ и $q_j$ квантовой системы, которая соответствует (1), представляются рядами Фурье вида

$$p_j(t) = \sum_{k,l=1}^{\infty} p_{j,kl} e^{i\omega_{kl} t} \qquad q_j(t) = \sum_{k,l=1}^{\infty} q_{j,kl} e^{i\omega_{kl} t} \tag{3}$$

где $\omega_{kl}$ — циклическая частота, отвечающая переходу с $k$ – го энергетического уровня на $l$ – й ($E_k - E_l = \hbar\omega_{kl}$). Но поскольку ряды (3) расходятся, их следует рассматривать формально. Тогда они сводятся к счетномерным матрицам $(p_{j,kl} e^{i\omega_{kl} t})$ и $(q_{j,kl} e^{i\omega_{kl} t})$, где $k, l \in \mathbb{N}$, которые Гейзенберг предложил считать квантовыми величинами $p_j(t)$ и $q_j(t)$. Аналогично, любую физическую величину $\chi$ данной квантовой системы следует считать матрицей $(\chi_{kl})$ с элементами $\chi_{kl}(t) = \eta_{kl} e^{i\omega_{kl} t}$, где $\eta_{kl}$ не зависит от $t$. Независимость $\chi$ от времени эквивалентна диагональности $(\chi_{kl})$ [4].

Тогда произведению рядов отвечает произведение матриц. Для того, чтобы суммы (2) были вещественны, должны выполняться условия $p_{j,k_1 \ldots k_n} = p^*_{j,-k_1 \ldots -k_n}$ и $q_{j,k_1 \ldots k_n} = q^*_{j,-k_1 \ldots -k_n}$, где $^*$ обозначает комплексное сопряжение. Аналогично, вещественность квантовой величины $\chi$ равносильна эрмитовости ее матрицы ($\chi_{kl} = \chi^*_{lk}$). При этом число $\chi_{kk} \in \mathbb{R}$ интерпретируется, как среднее значение величины $\chi$ в стационарном состоянии с энергией $E_k$ [4].

Затем принимается, что классическому гамильтониану $H(p, q)$ соответствует такая диагональная матрица $H$, что $H_{kk} = E_k$ и $H$ функционально выражается через матрицы $p_j$ и $q_j$ таким же образом, как $H(p, q)$ через классические величины. Используя аналог скобки Пуассона $[\cdot, \cdot]$ Гейзенберг постулирует, что

$$[p_i, p_j] = 0 \qquad [q_i, q_j] = 0 \qquad [p_i, q_j] = \delta_{ij} \tag{4}$$

где $i\hbar[x, y] = yx - xy$. Тогда $p_j$, $q_j$ и $H(p, q)$ удовлетворяют (1). Нужно проинтегрировать систему (1) с матричными неизвестными, предполагая $H_{kl} = E_k \delta_{kl}$ и (4).

Для этого Гейзенберг рассматривает замены ортонормированных координат $t_1, t_2, \ldots$ в некотором эрмитовом, гильбертовом, бесконечномерном пространстве $\mathcal{H}$ (сепарабельность имеет место по определению). Поскольку все такие пространства изометрично изоморфны, в качестве $\mathcal{H}$ можно выбрать любое. Будем считать, что $\mathcal{H}$

есть множество $l_2$ таких последовательностей $l : \mathbb{N} \to \mathbb{C}$, что ряд $\sum_{k=1}^{\infty} |l_k|^2$ сходится. Тогда эрмитово произведение $(l, l') = \sum_{j=1}^{\infty} l_j (l'_j)^*$, а последовательности $e_k(j) = \delta_{kj}$ составляют стандартный ортонормированный базис, где $j, k \in \mathbb{N}$.

В [4] допускаются «замены координат» $t_x = \sum_{k=1}^{\infty} S_{xk} t_k$ с «матрицами» $(S_{xk})$, где $k \in \mathbb{N}$, но индекс $x$ непрерывен. Ограничимся случаем, когда $x$ принимает всевозможные значения в $\mathbb{R}^r$. Новые «координаты» $t_x$ заданы в «ортонормированном базисе» из континуума векторов. В пространстве $\mathcal{H}$ не может быть такого базиса, но, как показано ниже, язык Гейзенберга имеет вполне строгую интерпретацию.

Условие унитарности $S$ (формально $S^{-1} = (S^*)^T$) эквивалентно паре уравнений:

$$\int S_{xk}^* S_{xl} dx = \delta_{kl} \qquad \sum_{k=1}^{\infty} S_{xk}^* S_{yk} = \delta(x - y) \tag{5}$$

Здесь и всюду ниже подразумевается интегрирование по интервалу $\mathbb{R}^r$ (возможно $r = 1$). Тогда «матрица» $S^{-1}$ преобразует «координаты» $t_x$ следующим образом:

$$t_k = \int (S^{-1})_{kx} t_x dx = \int S_{xk}^* t_x dx \qquad \forall k \in \mathbb{N}$$

В силу первого уравнения (5) для любой пары векторов $a, b \in \mathcal{H}$ имеет место:

$$\int a_x^* b_x dx = \sum_{k=1}^{\infty} a_k^* b_k \tag{6}$$

Если $\Psi_k(x) = S_{xk}$, $\Psi(x) = a_x$ и $\Phi(x) = b_x$, то $\Psi = \sum_k a_k \Psi_k$, $\Phi = \sum_k b_k \Psi_k$ и, в силу (6),

$$\int a_x^* b_x dx = \int \Psi^*(x) \Phi(x) dx = \sum_{k,l=1}^{\infty} a_k^* b_l \int \Psi_k^*(x) \Psi_l(x) dx = \sum_{k=1}^{\infty} a_k^* b_k$$

Отсюда видно, что функции $\Psi_k(x)$ образуют ортонормированный базис в гильбертовом пространстве $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$. «Преобразование координат» с помощью «матрицы» $S$ определяет изометричный изоморфизм $\sigma : \mathcal{H} \to L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$, где $\sigma(e_k) = \Psi_k$ и $\Psi_k(x) = S_{xk}$ для всех $k \in \mathbb{N}$, $x \in \mathbb{R}^r$. Обратно: любой изометричный изоморфизм $\sigma : \mathcal{H} \to L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$ определяет «матрицу» $\big(S_{xk}\big) = \big(\sigma(e_k)(x)\big)$, которая удовлетворяет первому уравнению (5). Тогда при каждом $k \in \mathbb{N}$ функция $\Psi_k(x) = S_{xk}$ определена с точностью до значений на произвольном подмножестве нулевой меры в $\mathbb{R}^r$.

Второе из уравнений (5) вынуждает рассматривать множество $\sigma(\mathcal{H}) = L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$, как подпространство в $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$ (пространство распределений на $\mathbb{R}^r$). При этом $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$ состоит из регулярных обобщенных функций. Множество $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$ плотно в $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$, поскольку в нем плотно $\mathcal{D}(\mathbb{R}^r) \subset L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$ [5].

**Определение 1.** *Пусть $\mathcal{H}$ — гильбертово пространство $l_2$ и при некотором $r \in \mathbb{N}$ дан изометричный изоморфизм $\sigma : \mathcal{H} \to L_2(\mathbb{R}^r;\mathbb{C})$, где $L_2(\mathbb{R}^r;\mathbb{C})$ канонически вложено в $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$, как линейное подпространство. Тогда пара $(\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r),\sigma)$ называется расширением Дирака пространства $\mathcal{H}$, а $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$ обозначается $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$.*

Таким образом, «замена координат с матрицей» $(S_{xk})$ в действительности означает задание мономорфизма $\sigma : \mathcal{H} \to \mathcal{H}^\sigma_{ext}$ согласно определению 1, так что

$$\sigma(\mathcal{H}) = L_2(\mathbb{R}^r;\mathbb{C}) \subset \mathcal{H}^\sigma_{ext} \qquad \sigma(e_k)(x) = S_{xk} \quad \forall x \in \mathbb{R}^r \ \forall k \in \mathbb{N}$$

Здесь $e_k$ – стандартные базисные векторы в $\mathcal{H}$. Проверим, что удовлетворяется второе уравнение (5). Для любой $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$, полагая $f = \sum_{l=1}^\infty c_l \Psi_l$, справедливы равенства:

$$\int \Big(\sum_{k=1}^\infty S_{xk}S^*_{yk}\Big) f(y)dy = \sum_{k=1}^\infty S_{xk} \int S^*_{yk} f(y)dy = \sum_{k=1}^\infty \Psi_k(x) \int \Psi^*_k(y) \sum_{l=1}^\infty c_l \Psi_l(y)dy =$$

$$= \sum_{k,l=1}^\infty c_l \Psi_k(x) \int \Psi^*_k(y)\Psi_l(y)dy = \sum_{k,l=1}^\infty c_l \Psi_k(x)\delta_{kl} = \sum_{l=1}^\infty c_l\Psi_l(x) = f(x)$$

Следовательно $\sum_k S_{xk}S^*_{yk} = \delta(x-y) = \delta^*(x-y)$, отсюда $\sum_k S^*_{xk}S_{yk} = \delta(x-y)$ $\square$.

При фиксированном мономорфизме $\sigma : \mathcal{H} \to \mathcal{H}^\sigma_{ext}$ обобщенные функции $\Psi \in \mathcal{H}^\sigma_{ext}$ будем также обозначать, как (кет)векторы $|\Psi\rangle$ в стиле Дирака.

Выясним смысл «координат» $a_x = \sum_{k=1}^\infty S_{xk}a_k$ произвольного вектора $|\Psi\rangle = \sigma(a)$, имеющего координаты $a_k$ в базисе $|\Psi_k\rangle = \sigma(e_k)$, $k \in \mathbb{N}$. Заметим, что $a_x = \Psi(x)$. Для каждого $x \in \mathbb{R}^r$ обозначим $|e_x\rangle$ обобщенную функцию $\delta(y-x) \in \mathcal{H}^\sigma_{ext} \setminus \sigma(\mathcal{H})$.

Проверим, что $|\Psi\rangle = \int a_x|e_x\rangle dx$. Для этого разобьем пространство $\mathbb{R}^r$ на равные кубы со сторонами $\lambda$ и центрами $x_{\lambda,n}$, где $n \in \mathbb{Z}$. Тогда

$$\int a_x|e_x\rangle dx = \lim_{\lambda\to 0}\sum_n a_{x_{\lambda,n}}|e_{x_{\lambda,n}}\rangle \cdot \lambda^r = \lim_{\lambda\to 0}\sum_n a_{x_{\lambda,n}}\lambda^r\delta\left(x - x_{\lambda,n}\right)$$

По определению сходимости в $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$ [5], для любой функции $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$ (финитной класса $C^\infty(\mathbb{R}^r;\mathbb{C})$) должно иметь место

$$(|\Psi\rangle, f) = \Big(\int a_x|e_x\rangle dx, f\Big) = \lim_{\lambda\to 0}\sum_n a_{x_{\lambda,n}}\lambda^r\big(\delta\left(x-x_{\lambda,n}\right), f(x)\big) = \lim_{\lambda\to 0}\sum_n a_{x_{\lambda,n}} f(x_{\lambda,n})\lambda^r$$

Это действительно имеет место, поскольку $(|\Psi\rangle, f) = \int \Psi(x)f(x)dx = \int a_x f(x)dx$. В каждой сумме по $n$ лишь конечное число слагаемых отлично от нуля $\square$.

Таким образом, вектор $|\Psi\rangle$ разлагается в интеграл по векторам $|e_x\rangle$. Они линейно независимы в том смысле, что никакая сумма $\sum_n c_n|e_{x_n}\rangle$ с хотя бы одним $c_n \neq 0$, а также никакой интеграл $\int c(x)|e_x\rangle dx$ с функцией $c(x)$, отличной от нуля на множестве ненулевой меры в $\mathbb{R}^r$, не равны нулю. Множество векторов $\{|e_x\rangle : x \in \mathbb{R}^r\}$ можно считать базисом в тот смысле, который придает этому термину Дирак [1].

Функция $\Psi(x)$ называется *волновой* [1]. Следует формально различать ее и обобщенную функцию $|\Psi\rangle = |\Psi(x)\rangle$, для которой $\Psi(x)$ является представителем.

## § 3. Эрмитово произведение

Для любых двух векторов $|\Phi\rangle = \sigma(a)$ и $|\Psi\rangle = \sigma(b)$ определено эрмитово произведение $(|\Phi\rangle, |\Psi\rangle) = (a, b)$. В дальнейшем оно обозначается $\langle\Psi|\Phi\rangle$, а $(|\Phi\rangle, |\Psi\rangle)$ — значение обобщенной функции $|\Phi\rangle \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$ на функции $|\Psi\rangle \in L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C}) \subset \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$.

Тогда правая часть (6) выражает эрмитово произведение $|\Phi\rangle = \sum_k b_k|\Psi_k\rangle$ на $|\Psi\rangle = \sum_k a_k|\Psi_k\rangle$ через координаты в базисе $e_k \in \sigma(\mathcal{H})$, где $k \in \mathbb{N}$, а левая часть (6) выражает это произведение в координатах базиса $|e_x\rangle \in \mathcal{H}^\sigma_{ext} \setminus \sigma(\mathcal{H})$, где $x \in \mathbb{R}^r$.

В случае, когда $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^\sigma_{ext} \setminus \sigma(\mathcal{H})$ и $|\Phi\rangle \in \sigma(\mathcal{H}) = L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$ положим

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = (|\Psi\rangle, |\Phi\rangle^*) \qquad \langle\Psi|\Phi\rangle = (|\Psi\rangle, |\Phi\rangle^*)^* \tag{7}$$

Обобщенные функции принимают значения на т.н. основных функциях, составляющих $\mathcal{D}(\mathbb{R}^r) \subset L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$. Но каждую $\Psi \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$ можно продолжить на $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$.

**Предложение 1.** *Для каждой $\Psi \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$ существует единственный линейный функционал $\widetilde{\Psi}$ на пространстве $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$, непрерывный в его топологии, такой что $(\widetilde{\Psi}, f) = (\Psi, f)$ для всех $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r) \subset L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$.*

*Доказательство.* Множество $\mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$ всюду плотно в гильбертовом пространстве $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$. Поэтому для любой $\Phi \in L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$ существует последовательность $\Phi_n \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$, сходящаяся к $\Phi$ (в метрике $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$). Положим $(\Psi, \Phi) = \lim_n(\Psi, \Phi_n)$. Поскольку последовательность $\Phi_n \to \Phi$ произвольна, для проверки корректности этого определения достаточно доказать существование конечного предела $\lim_n(\Psi, \Phi_n)$.

Воспользуемся критерием Коши и оценим $|(\Psi, \Phi_n) - (\Psi, \Phi_m)| = |(\Psi, \Phi_n - \Phi_m)|$. Найдется последовательность $f_k \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r) \subset \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$, сходящаяся к $\Psi$ в топологии $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$. Последнее означает, что $\lim_k(f_k, f) = (\Psi, f)$ для любой $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$. Поэтому достаточно оценить величину $|(f_k, \Phi_n - \Phi_m)|$ для произвольного $k$:

$$|(f_k, \Phi_n - \Phi_m)| = \left|\int f_k(x)(\Phi_n - \Phi_m)(x)dx\right| \leq \sqrt{\int |f_k|^2(x)dx}\sqrt{\int |\Phi_n(x) - \Phi_m(x)|^2(x)dx}$$

Последний корень как угодно мал для достаточно больших $n$ и $m$, поскольку последовательность $\Phi_n$ сходится в $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$ $\square$.

Вследствие предложения 1 формула (7) корректно определяет эрмитово произведение векторов из $\mathcal{H}^{\sigma}_{ext} \setminus \sigma(\mathcal{H})$ на векторы из $\sigma(\mathcal{H})$. Очевидно, что она верна и в случае $|\Psi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$. Для любого $|\Phi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$ имеем $\langle e_x|\Phi\rangle = (\delta(y-x), \Phi^*(y))^* = \Phi(x)$. Таким образом $x$ - ая координата вектора $|\Psi\rangle$ в базисе $|e_x\rangle$, где $x \in \mathbb{R}^r$, равна $\langle e_x|\Psi\rangle$. Однако пока не ясно: в каком смысле этот базис является ортонормированным?

Для пары обобщенных функций $|\Phi\rangle, |\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{\sigma}_{ext} \setminus \sigma(\mathcal{H})$ произведение $\langle\Phi|\Psi\rangle$ не определено. В духе [1] ортонормированость базиса $|e_x\rangle$ должна выражаться условием

$$\langle e_{x'}|e_{x''}\rangle = \langle e_{x''}|e_{x'}\rangle = \delta(x'-x'') = \delta(x''-x') \tag{8}$$

Обобщенная функция $\delta(x'-x'')$ корректно определена, если одна из величин $x'$, $x''$ является ее аргументом, а другая — фиксированным параметром.

**Определение 2.** *Любое отображение $\chi : \mathbb{R}^r \to \mathcal{D}'(\mathbb{R}^s)$ называется обобщенной матрицей размерности $\dim\chi = r\times s$. Тогда $\forall x' \in \mathbb{R}^r$ обобщенная функция $\chi_{x'} = \chi(x')$ обозначается $\chi_{x'x''}$, где $x''$ — ее аргумент. Если каждая $\chi(x')$ является регулярной обобщенной функцией, то матрица $\chi$ называется регулярной (иначе сингулярной).*

Стоит пояснить, что $\chi_{x'x''} = \chi_{x'}(x'')$ и $(\chi_{x'x''}, f(x''))$ — это значение функционала $\chi(x')$ на основной функции $f(x'') \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^s)$. Обобщенную матрицу $\chi$ будем обозначать $(\chi_{x'x''})$, т.е., как матрицу с «элементами» $\chi_{x'x''}$. Примером служит «матрица» $(\delta_{x'x''})$ [4], которую Дирак определяет, как $\delta(x'-x'')$ [1]. Если $\chi$ является регулярной, то $\forall x' \in \mathbb{R}^r$ функция $\chi(x')$ принимает значение $\chi_{x'x''}$ в точке $x'' \in \mathbb{R}^s$. Тогда обобщенную матрицу $(\chi_{x'x''})$ можно понимать, как отображение $\chi : \mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^s \to \mathbb{C}$, т.е., $\chi_{x'x''} = \chi(x', x'')$ для всех $(x', x'') \in \mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^s$.

**Определение 3.** *Пусть дана обобщенная матрица $\chi : \mathbb{R}^r \to \mathcal{D}'(\mathbb{R}^s)$. Каждая обобщенная функция $\chi_{x'x''} = \chi(x')(x'')$ является пределом последовательности функций из $\mathcal{D}(\mathbb{R}^s)$, зависящих от $x' \in \mathbb{R}^r$, так что $\chi_{x'x''} = \lim_n f_n(x', x'')$ для некоторых $f_n : \mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^s \to \mathbb{C}$, где $n \in \mathbb{N}$.*

*Предположим, что при любых $n$ и $x' \in \mathbb{R}^s$ функция $f^{\tau}_n(x', x'') = f_n(x'', x')$ с аргументом $x'' \in \mathbb{R}^r$ является локально интегрируемой, последовательность $f^{\tau}_n(x', x'')$ сходится в $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$ к обобщенной функции $\Psi_{x'}(x'') \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$, не зависящей от $\{f_n\}_{n\in\mathbb{N}}$.*

*Тогда обобщенная матрица $x' \longmapsto \Psi_{x'}$ называется симметричной матрице $x' \longmapsto \chi_{x'}$ и обозначается $\chi^{\tau}$, так что по определению $(\chi^{\tau})_{x'x''} = \chi_{x''x'} = \Psi_{x'}(x'')$.*

Если матрица $\chi$ регулярна, то $\chi^{\tau}$ получается перестановкой аргументов функции $\chi : \mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^s \to \mathbb{C}$. Операцию $^{\tau}$ (транспонирование) можно описать наглядно.

Предположим, что для некоторой обобщенной матрицы $(\chi_{x'x''})$ в определении обобщенной функции $\chi_{x'}(x'') = \chi_{x'x''}$, отвечающей произвольному $x' \in \mathbb{R}^r$, все символы $x'$ и $x''$ подвергнуты транспозиции. Если в итоге получилось корректное определение обобщенной функции с аргументом $x'' \in \mathbb{R}^r$, то она совпадает с $\chi^\tau$. Например, обобщенные матрицы $x' \longmapsto \delta(x' - x'')$ и $x' \longmapsto \delta(x'' - x')$ взаимно симметричны.

В случае, когда $\dim\chi = r \times s$, $\dim\zeta = s \times t$ и хотя бы одна из обобщенных матриц $\chi$, $\zeta$ является регулярной, определено произведение $\chi\zeta$, которое является регулярной матрицей $(\chi\zeta)_{x'x''} = \int \chi_{x'x'''}\zeta_{x'''x''}dx'''$ размерности $r \times t$. Если например $\chi$ регулярна, то произведение $\chi\zeta$ есть функция $(\chi\zeta)(x', x'') = \big(\zeta^\tau_{x''}(x'''), \chi(x', x''')\big)$, где $\chi(x', x''') = \chi_{x',x'''}$ для всех $(x', x'') \in \mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^t$.

Теперь мы готовы раскрыть смысл уравнения (8). «Эрмитово произведение» $\langle e_{x'}|e_{x''}\rangle$ является обобщенной матрицей, которая каждому $x' \in \mathbb{R}^r$ ставит в соответствие обобщенную функцию $\delta(x' - x'')$. При фиксированных значениях $x', x''$ величина $\langle e_{x'}|e_{x''}\rangle$ не определена, хотя при $x' \neq x''$ векторы $|e_{x'}\rangle$ и $|e_{x''}\rangle$ можно называть ортогональными, имея ввиду несовместность квантовых состояний [1].

Для доказательства (8) фиксируем любое $x' \in \mathbb{R}^r$ и рассмотрим любую последовательность *вещественных* функций $\varphi_n(x'') \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$, сходящуюся к $|e_{x'}\rangle = \delta(x - x')$ в топологии $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$. Тогда для любой $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$ по определению имеем:

$$\big(\langle e_{x'}|e_{x''}\rangle, f(x'')\big) = \lim_{n\to\infty}\big(\langle\varphi_n|e_{x''}\rangle, f(x'')\big) = \lim_{n\to\infty}\big(\varphi_n(x''), f(x'')\big) = (\delta(x' - x''), f(x'')) \ \square$$

Такое «эрмитово произведение» базисных векторов $|e_x\rangle$ нельзя продолжить на $\mathcal{H}^\sigma_{ext} \times \mathcal{H}^\sigma_{ext}$. В самом деле, используя (8) и разложение $|\Psi\rangle = \int \Psi(x)|e_x\rangle dx$, формально выражающее тождество $\Psi(x') = \Psi(x') * \delta(x')$, получим уравнение:

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \int \Phi^*(x)\Psi(x)dx \tag{9}$$

Если функции $\Phi, \Psi \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$ не лежат в $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$, то интеграл (9) в общем не имеет смысла. Но если хотя бы одна из них лежит в $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$, то (9) эквивалентно (7).

Интеграл (9) также определен и выражает (7), если $\Psi \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r) \setminus L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$ финитна (например $\delta(x)$ и ее производные), а $\Phi \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r) \setminus L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$ регулярна.

Аналогично (8), в КМ может использоваться «эрмитово произведение» регулярных обобщенных функций $|\Psi_{p'}\rangle(x), |\Phi_{p''}\rangle(x) \in \mathcal{H}^\sigma_{ext}\setminus\sigma(\mathcal{H})$, зависящих от непрерывного параметра $p$. В таком случае интеграл $\int \Psi^*_{p'}(x)\Phi_{p''}(x)dx = \langle\Psi_{p'}|\Phi_{p''}\rangle$ может оказаться «элементом» обобщенной матрицы с «индексами» $p'$ и $p''$. Например, собственные векторы $|\Psi_{p'}\rangle(x)$ операторов $\hat{p}_j$ нормированы так, что $\langle\Psi_{p'}|\Psi_{p''}\rangle = \delta(p' - p'')$ (§4).

Условие (8) можно обобщить, распространяя операцию $\langle\cdot|\cdot\rangle$ на векторы вида

$$|\delta(x_{i_1} - x'_{i_1}, \ldots, x_{i_s} - x'_{i_s}) \cdot \psi(x_{j_1}, \ldots, x_{j_{r-s}})\rangle \quad \{i_1, \ldots, i_s\} \cup \{j_1, \ldots, j_{r-s}\} = \{1, \ldots, r\}$$

где $\psi$ — регулярная функция из $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^{r-s})$. Если $I = \{i_1, \ldots, i_s\}$, $J = \{j_1, \ldots, j_{r-s}\}$, то

$$\langle\delta(x_I - x'_I) \cdot \psi(x_J)|\delta(x_I - x''_I) \cdot \varphi(x_J)\rangle = \delta(x'_I - x''_I) \cdot \langle\psi(x_J)|\varphi(x_J)\rangle \tag{10}$$

Если $|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$, то эрмитово произведение $\langle\psi(x_J)|\varphi(x_J)\rangle$ является регулярной обобщенной функцией $\mathbb{R}^{r-s} \to \mathbb{C}$. В противном случае $\langle\psi(x_J)|\varphi(x_J)\rangle$ может выражаться обобщенной матрицей в том смысле, как поясняется абзацем выше.

Теперь, следуя формализму Дирака [1], определим ковекторы (бра-векторы).

**Определение 4.** *Если $|\Psi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$, то ковектор $\langle\Psi|$ — это такая линейная функция на $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$, что $\langle\Psi|(|\Phi\rangle) = \langle\Psi|\Phi\rangle$. Если $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^\sigma_{ext} \setminus \sigma(\mathcal{H})$, то $\langle\Psi|$ является аналогичной функцией от векторов из $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$, но область ее определения является надмножеством $\sigma(\mathcal{H})$, не совпадающим с $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$.*

Если $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^\sigma_{ext} \setminus \sigma(\mathcal{H})$ и имеет компактный носитель, то ковектор $\langle\Psi|$ определен на подпространстве $\mathcal{H}^\sigma_{reg} \subset \mathcal{H}^\sigma_{ext}$ регулярных обобщенных функций в $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$. При этом по определению $\langle\Phi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Phi\rangle^*$ для всех $\Phi \in \mathcal{H}^\sigma_{reg}$. Хотя для любого бра-вектора $\langle e_{x'}|$ в силу (8) определено символическое спаривание с кет-векторами $|e_{x''}\rangle$, последние не входят в область определения ковектора $\langle e_{x'}|$ и никаким образом ее не расширяют.

Рассмотрим тождество $|e_{x'}\rangle = |e_{x'}\rangle * \delta(x') = \delta(x') * |e_{x'}\rangle$, где звездочка обозначает свертку [5]. Записывая ее символически в виде интеграла получим «разложение по базису» $|e_{x'}\rangle = \int \delta(x' - x)|e_x\rangle dx$. Формально выражая $\langle e_{x'}|e_{x''}\rangle$ через «непрерывные координаты», из (8) получаем:

$$\langle e_{x'}|e_{x''}\rangle = \int (e^x_{x'})^* \, e^x_{x''} dx = \int \delta(x' - x)\delta(x - x'')dx = \delta(x' - x'')$$

Последнее равенство дано в [1], как свойство дельта-функции (формула (10) стр. 93), доказательство которого можно свести к выводу тождества $\delta(x') * \delta(x' - x'') = \delta(x' - x'')$. Такого рода выкладки оставляют ощущение, что для полной формализации гениальной интуиции Дирака придется расширить теорию обобщенных функций.

## § 4. Эрмитовы операторы

При замене координат $t_k$ на $t_x$ (см. §2) матрица $(\chi_{kl})$ подвергается преобразованию в «матрицу» $(\chi_{xy}) = S(\chi_{kl})S^{-1}$ и обратно $(\chi_{kl}) = S^{-1}(\chi_{xy})S$, что означает:

$$\chi_{xy} = \sum_{k,l=1}^{\infty} S_{xk}\chi_{kl}S^*_{yl} = \sum_{k,l} \chi_{kl}\Psi_k(x)\Psi^*_l(y) \tag{11}$$

$$\chi_{kl} = \iint S^*_{xk}\chi_{xy}S_{yl}dxdy = \iint \chi_{xy}\Psi^*_k(x)\Psi_l(y)dxdy$$

Проверим, что $(\chi_{xy})$ является ядром интегрального оператора $\chi : \sigma(\mathcal{H}) \to \sigma(\mathcal{H})$, где $\chi(\Phi)(x) = \int \chi_{xy}\Phi(y)dy$ и $y \in \mathbb{R}^r$. Матрица $(\chi_{kl})$ представляет $\chi$ в координатах $t_k$. Пусть $\Psi = \sum_k a_k\Psi_k$, $\Phi = \sum_m b_m\Psi_m$ и $\Psi = \chi(\Phi)$, тогда $a_k = \sum_l \chi_{kl}b_l$ и

$$\int \chi_{xy}\Phi(y)dy = \sum_{kl}\chi_{kl}\Psi_k(x)\int \Phi(y)\Psi^*_l(y)dy = \sum_{kl}\chi_{kl}\Psi_k(x)\sum_m b_m\int \Psi_m(y)\Psi^*_l(y)dy =$$

$$= \sum_{kl}\chi_{kl}\Psi_k(x)b_l = \sum_k\Big(\sum_l \chi_{kl}b_l\Big)\Psi_k(x) = \sum_k a_k\Psi_k(x) = \Psi(x) = \chi(\Phi)(x) = \chi(\Phi)_x \quad \square$$

Таким образом, преобразования матриц при заменах дискретных координат на непрерывные [4] являются переходами от матричного представления операторов $\chi : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ в ортонормированном базисе к интегральному представлению соответствующих операторов $\chi : \sigma(\mathcal{H}) \to \sigma(\mathcal{H})$ в координатах базиса $|e_x\rangle \in \mathcal{H}^\sigma_{ext}$, где $x \in \mathbb{R}^r$ и $(\mathcal{H}^\sigma_{ext}, \sigma)$ — расширение Дирака пространства $\mathcal{H}$ (определение 1).

При этом ядро оператора $\chi : \sigma(\mathcal{H}) \to \sigma(\mathcal{H})$ является, вообще говоря, обобщенной матрицей $(\chi_{xy})$, а интеграл $\int \chi_{xy}\Phi(y)dy$ может быть символическим. Например, тождественный оператор $I : \sigma(\mathcal{H}) \to \sigma(\mathcal{H})$ имеет матрицу с «элементами» $I_{xy} = \delta(x-y)$.

Теперь нужно определить эрмитовы, т.е., самосопряженные операторы. Формальная трудность заключается в том, что $\sigma(\mathcal{H})$ несет структуру гильбертова пространства, но пространство $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$ расширения Дирака даже не является эрмитовым.

**Определение 5.** *Линейный непрерывный оператор $\xi : \mathcal{H}^\sigma_{ext} \to \mathcal{H}^\sigma_{ext}$ называется эрмитовым, если $\langle\xi(\Psi)|\Phi\rangle = \langle\Psi|\xi(\Phi)\rangle$ для любых $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^\sigma_{ext}$ и $|\Phi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$.*

Свойство эрмитовости $\langle\xi(\Phi)|\Psi\rangle = \langle\Phi|\xi(\Psi)\rangle$ позволяет записывать оба выражения в виде $\langle\Phi|\xi|\Psi\rangle$ [1]. При этом $\langle\Phi|\xi$ обозначает ковектор, сопряженный к $\xi|\Phi\rangle = |\xi(\Phi)\rangle$.

**Предложение 2.** *Любой эрмитов оператор $\xi : \sigma(\mathcal{H}) \to \sigma(\mathcal{H})$ однозначно продолжается до эрмитова оператора на $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$.*

*Доказательство.* Для любой $\Psi \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$ существует последовательность $\Phi_n \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r) \subset \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$, сходящаяся к $\Psi$ [5]. Определим оператор $\widetilde{\xi}$ на $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$ равенством $\widetilde{\xi}(\Psi) = \lim_n \xi(\Phi_n)$. Для проверки корректности этого определения достаточно доказать существование такого предела для любой $\Phi_n \to \Psi$, где $\Phi_n \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$. В силу теоремы о полноте ([5], стр. 92) нужно проверить, что $\exists \lim_n(\xi(\Phi_n), f)\ \forall f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$.

По критерию Коши оценим $|(\xi(\Phi_n), f) - (\xi(\Phi_m), f)| = |(\Phi_n - \Phi_m, \xi(f))|$. Для достаточно больших $n$ и $m$ последний модуль как угодно мал, т.к. последовательность $\Phi_n$ сходится в $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$. Поэтому $\lim_n(\xi(\Phi_n), f)$ существует и конечен.

Поскольку $\forall \Phi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$ последовательность $\Phi_n = \Phi$ сходится к $\Phi$, то $\widetilde{\xi}(\Phi) = \xi(\Phi)$. Эрмитовость оператора $\widetilde{\xi}$, с учетом (7), проверяется следующим образом:

$$\langle \widetilde{\xi}(\Psi)|\Phi\rangle = \lim_n \langle \xi(\Phi_n)|\Phi\rangle = \lim_n \langle \Phi_n|\widetilde{\xi}(\Phi)\rangle = \lim_n (\widetilde{\xi}(\Phi), \Phi_n^*) = (\widetilde{\xi}(\Phi), \Psi^*) = \langle \Psi|\widetilde{\xi}(\Phi)\rangle$$

Проверим непрерывность $\widetilde{\xi}$. Пусть $\Psi_n \to \Psi$, где $\Psi_n \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$. Тогда $\forall f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$:

$$\lim_n (\widetilde{\xi}(\Psi_n), f) = \lim_n \langle f^*|\widetilde{\xi}(\Psi_n)\rangle = \lim_n \langle \widetilde{\xi}(f^*)|\Psi_n\rangle = \langle \widetilde{\xi}(f^*)|\Psi\rangle = \langle f^*|\widetilde{\xi}(\Psi)\rangle = (\widetilde{\xi}(\Psi), f) \ \Box$$

**Предложение 3.** *Линейный непрерывный оператор $\xi : \mathcal{H}^\sigma_{ext} \to \mathcal{H}^\sigma_{ext}$ является эрмитовым, если $\langle \xi(\Psi)|\Phi\rangle = \langle \Psi|\xi(\Phi)\rangle$ для любых $|\Psi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$ и $|\Phi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$.*

Доказательство аналогично доказательству эрмитовости $\widetilde{\xi}$ в предложении 2 $\Box$.

Если обобщенная матрица $(\chi_{xy})$, получаемая в силу (11), является регулярной, то эрмитовость исходного оператора $\chi : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ влечет, что $\chi^*_{xy} = \chi_{yx}$ для всех $x, y \in \mathbb{R}^r$. В силу предложения 2 оператор $\chi$ можно считать заданным на $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$. На векторы «континуального базиса» он действует аналогично обычному базису:

$$(\chi|e_{x'}\rangle)_x = \int \chi_{xy}\delta(y - x')dy = \chi_{xx'} \qquad \chi|e_{x'}\rangle = \int \chi_{xx'}|e_x\rangle dx$$

При этом $\chi|e_{x'}\rangle \in \mathcal{H}^\sigma_{reg}$ для всех $x' \in \mathbb{R}^r$. Примером служит любой оператор Гильберта-Шмидта в пространстве $L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$ с ядром $\kappa_{xy} \in L_2(\mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^r; \mathbb{C})$, удовлетворяющим условию $\kappa^*_{xy} = \kappa_{yx}$. Такой оператор является компактным, поэтому его собственные векторы образуют ортонормированный базис в $\sigma(\mathcal{H})$ (теорема Гильберта-Шмидта [6]). Будучи продолженным на $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$ он станет наблюдаемой (§5).

**Предложение 4.** *Любой непрерывный линейный оператор $\xi : \mathcal{H}^\sigma_{ext} \to \mathcal{H}^\sigma_{ext}$, сохраняющий подпространство $\mathcal{D}(\mathbb{R}^r) \subset \mathcal{H}^\sigma_{ext}$ и являющийся на нем эрмитовым, является эрмитовым на $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$.*

Доказательство непосредственно следует из всюду плотности $\mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$ в $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$ $\Box$.

Такие эрмитовы операторы могут не сохранять подпространство $\sigma(\mathcal{H})$. В качестве примера рассмотрим коммутирующие операторы $\hat{x}_j : \mathcal{H}^\sigma_{ext} \to \mathcal{H}^\sigma_{ext}$, где $j = 1, \ldots, r$ и $\hat{x}_j(|\Psi\rangle) = x_j|\Psi\rangle$ (произведение гладкой и обобщенной функций определено [5]). Если $|\Psi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$, то $x_j|\Psi\rangle = |x_j\Psi(x)\rangle$. Очевидно, что $\hat{x}_j(\mathcal{D}(\mathbb{R}^r)) = \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$ и оператор $\hat{x}_j$ эрмитов на $\mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$, поэтому $\hat{x}_j$ эрмитов на $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$. При этом

$$\langle \hat{x}_j(e_{x'})|e_{x''}\rangle = x'_j\langle e_{x'}|e_{x''}\rangle = x'_j\delta(x' - x'') = x''_j\delta(x' - x'') = x''_j\langle e_{x'}|e_{x''}\rangle = \langle e_{x'}|\hat{x}_j(e_{x''})\rangle$$

Эти равенства следует понимать, как относящиеся к обобщенным матрицам (определение 3). Каждый $|e_x\rangle$ является собственным вектором всех операторов $\hat{x}_j$ :

$$\forall x' \in \mathbb{R}^r \quad \hat{x}_j\big(|e_{x'}\rangle\big) = x_j\delta(x-x') = x'_j\delta(x-x') = x'_j|e_{x'}\rangle \quad j=1,\dots,r$$

Таким образом, каждый вектор $|\Psi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$ разлагается в интеграл по общим собственным векторам коммутирующих эрмитовых операторов $\hat{x}_1,\dots,\hat{x}_r$ с непрерывными спектрами (мы называем *спектром* множество собственных значений). Эти векторы нормированы условием $\langle e_{x'}|e_{x''}\rangle = \delta(x'-x'')$ (оно поясняется в §3).

Другим примером к предложению 4 служат попарно коммутирующие эрмитовы операторы $\hat{p}_j = -i\hbar\cdot\partial/\partial x_j$ при $j=1,\dots,r$. Их общие собственные векторы:

$$\Psi_{p'}(x) = \frac{1}{h^{r/2}}\cdot e^{i\sum_{j=1}^r p'_j x_j/\hbar} \quad \Psi_{p'} \in \mathcal{H}^\sigma_{reg}\setminus\sigma(\mathcal{H}) \quad \forall p' \in \mathbb{R}^r$$

При этом $\langle\Psi_{p'}|\Psi_{p''}\rangle = \delta(p'-p'')$, где «эрмитово произведение» является «элементом» обобщенной матрицы $\mathbb{R}^r \ni p' \longmapsto \delta(p'-p'')$ (определение 2). В самом деле:

$$\langle\Psi_{p'}|\Psi_{p''}\rangle = \int \Psi^*_{p'}(x)\Psi_{p''}(x)dx = \frac{1}{(2\pi)^n}\int e^{i\sum_{j=1}^r(p''_j-p'_j)y_j}dy = \prod_{j=1}^r \delta(p''_j-p'_j) = \delta(p'-p'')$$

Проверим, что обобщенная матрица $((p_j)_{x'x''})$ оператора $\hat{p}_j$ имеет вид:

$$\mathbb{R}^r \ni x' \longmapsto -i\hbar\cdot\partial_j\delta(x'-x'') \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r) \tag{12}$$

Достаточно взять любые $\Phi, f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r) \subset \mathcal{H}^\sigma_{ext}$. Так как $|\Phi\rangle = \int\Phi(x')|e_{x'}\rangle dx'$, то:

$$(\hat{p}_j|\Phi\rangle, f) = \Big(\int\Phi(x')\hat{p}_j|e_{x'}\rangle dx', f\Big) = -i\hbar\int f(x'')dx''\int\Phi(x')\frac{\partial}{\partial x''_j}\delta(x''-x')dx' =$$

$$= -i\hbar\int\Phi(x')dx'\int\frac{\partial}{\partial x''_j}\delta(x''-x')f(x'')dx'' = i\hbar\int\Phi(x')\frac{\partial f}{\partial x'_j}\,dx' = -i\hbar\int f(x')\frac{\partial\Phi}{\partial x'_j}\,dx'$$

$$\int(p_j)_{x'x''}\Phi(x'')dx'' = -i\hbar\int\partial_j\delta(x'-x'')\Phi(x'')dx'' = i\hbar\int\frac{\partial}{\partial x''_j}\delta(x''-x')\Phi(x'')dx'' = -i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial x'_j}$$

Следовательно $\big(\int(p_j)_{x'x''}\Phi(x'')dx'', f(x')\big) = (\hat{p}_j|\Phi\rangle, f)$, что и требовалось доказать.

Обобщенная матрица $x' \longmapsto i\hbar\cdot\partial_j\delta(x'-x'')$ симметрична матрице (12) (определение 3). Следовательно $(p_j)_{x''x'} = (p_j)^*_{x'x''}$, т.е., эрмитовость $\hat{p}_j$ отражается на его матрице обычным образом. Обобщенные матрицы операторов $\hat{x}_j$ имеют «элементы» $(x_j)_{x'x''} = x'_j\delta(x'-x'')$ и обладают тем же свойством.

Проверим, что $\langle\hat{p}_j(e_{x'})|e_{x''}\rangle = \langle e_{x'}|\hat{p}_j(e_{x''})\rangle$. Данное равенство, формально выражающее эрмитовость $\hat{p}_j$, относится к обобщенным матрицам. Матрица $(\langle\hat{p}_j(e_{x'})|e_{x''}\rangle)$ определяется следующим образом. При произвольном $x' \in \mathbb{R}^r$ обобщенная функция $\langle\hat{p}_j(e_{x'})|e_{x''}\rangle$ является пределом последовательности регулярных функций $\langle\hat{p}_j(\Phi_{x';n})|e_{x''}\rangle$ с аргументом $x''$, где $\Phi_{x';n}\in\mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$ и $|e_{x'}\rangle=\lim_n|\Phi_{x';n}\rangle$, т.е., $\forall f\in\mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$

$$\big(\langle\hat{p}_j(e_{x'})|e_{x''}\rangle,f(x'')\big)=-i\hbar\lim_{n\to\infty}\big(\langle\partial_j\Phi_{x';n}(x)|\delta(x-x'')\rangle,f(x'')\big)=$$

$$=-i\hbar\lim_{n\to\infty}\big(\big(\delta(x-x''),\partial_j\Phi^*_{x';n}(x)\big),f(x'')\big)=-i\hbar\lim_{n\to\infty}\big(\partial_j\Phi^*_{x'';n}(x''),f(x'')\big)=i\hbar\frac{\partial f}{\partial x_j}(x')$$

Из эрмитовости $\hat{p}_j$ следует $\langle\hat{p}_j(e_{x'})|e_{x''}\rangle=\lim_n\langle\Phi_{x',n}|\hat{p}_j(e_{x''})\rangle=\langle e_{x'}|\hat{p}_j(e_{x''})\rangle$ $\square$.

Аналогично можно доказать, что для любого оператора $\xi$ вида $\hat{p}_{j_1}\cdot\ldots\cdot\hat{p}_{j_m}$ справедливо $\langle\xi(e_{x'})|e_{x''}\rangle=\langle e_{x'}|\xi(e_{x''})\rangle$. Следовательно, этому тождеству удовлетворяет эрмитов оператор $\xi=f(\hat{p}_1,\ldots,\hat{p}_r)$ для любой функции $f(p'_1,\ldots,p'_r)$, разложимой в ряд Тейлора с вещественными коэффициентами.

Для любой функции $g\in C^\infty(\mathbb{R}^r,\mathbb{R})$ определен эрмитов оператор $g(\hat{x}_1,\ldots,\hat{x}_r)$, умножающий обобщенные функции $|\Psi(x)\rangle\in\mathcal{H}^\sigma_{ext}$ на $g(x)$ [5], так что:

$$g(\hat{x}_1,\ldots,\hat{x}_r)|x'_1\ldots x'_r\rangle=g(x'_1,\ldots,x'_r)|x'_1\ldots x'_r\rangle\quad\forall x'\in\mathbb{R}^r$$

**Предложение 5.** *Пусть $\xi=f(\hat{p}_1,\ldots,\hat{p}_r)+g(\hat{x}_1,\ldots,\hat{x}_r)$, где функция $f\in C^\infty(\mathbb{R}^r;\mathbb{R})$ разложима в ряд Тейлора с вещественными коэффициентами и $g\in C^\infty(\mathbb{R}^r,\mathbb{R})$. Тогда оператор $\xi$ эрмитов и справедливо $\langle\xi(e_{x'})|e_{x''}\rangle=\langle e_{x'}|\xi(e_{x''})\rangle$ (что означает равенство обобщенных матриц с «индексами» $x',x''\in\mathbb{R}^r$).*

Примером такого оператора может быть гамильтониан $H(\hat{p},\hat{q})$ (§2), продолженный на $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$, где $q=x$ и $r=n$. Стоит заметить, что во многих случаях пространство конфигураций исходной классической системы отлично от $\mathbb{R}^n$. Такова, например, задача о движении электронов в атоме. Однако, представленную теорию можно дословно переформулировать, полагая $\sigma(\mathcal{H})=L_2(U;\mathbb{C})$ для открытого множества $U\subset\mathbb{R}^n$ нужного вида. При этом областью значений импульса $\hat{p}_j$ всегда служит $\mathbb{R}$.

## § 5. Наблюдаемые величины

В рассуждениях Дирака о наблюдаемых (observables) случаи дискретного и непрерывного спектров почти не разделяются [1]. Вследствие этого доказательства ключевых утверждений о непрерывных наблюдаемых математически некорректны. Имея целью доказать непротиворечивость КМ [1] следует подвергнуть ревизии понятие наблюдаемой с непрерывным спектром. Это было сделано фон Нейманом [2], но его «исправления», хотя и математически глубокие, сводятся к отказу от идей Дирака.

**Определение 6.** *Пусть* $\chi : \mathcal{H}^\sigma_{ext} \to \mathcal{H}^\sigma_{ext}$ *— эрмитов оператор. Если множество его собственных значений, которым отвечают собственные векторы из* $\sigma(\mathcal{H})$*, является конечным или счетным, то оно называется дискретным спектром. Если все собственные векторы* $\chi$ *лежат в* $\mathcal{H}^\sigma_{ext} \setminus \sigma(\mathcal{H})$*, а множество собственных значений имеет мощность континуума, то оно называется непрерывным спектром.*

Поскольку подпространство $\sigma(\mathcal{H})$ эрмитово, всякий дискретный спектр лежит в $\mathbb{R}$. О непрерывном спектре этого утверждать пока нельзя. В дискретном случае определение наблюдаемой по существу не отличается от данного в [1].

**Определение 7.** *Эрмитов оператор* $\chi$ *с дискретным спектром называется наблюдаемой, если любой вектор* $|\Psi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$ *выражается суммой или сходящимся рядом так, что* $|\Psi\rangle = \sum_k |\Phi_k\rangle$*, где* $|\Phi_k\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$ *и* $\chi(|\Phi_k\rangle) = \chi_k|\Phi_k\rangle$.

Гамильтониан $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{q})$ изначально задан в пространстве $\mathcal{H} \cong \sigma(\mathcal{H})$, как эрмитов оператор. Поскольку его матрица в исходном базисе диагональна (§2), после продолжения на $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$ энергия $\hat{H}$ станет наблюдаемой с дискретным спектром.

Вследствие спектральной теоремы, любой эрмитов оператор $\chi : \sigma(\mathcal{H}) \to \sigma(\mathcal{H})$ с конечным или счетным множеством всех таких $\lambda \in \mathbb{R}$, что $\chi - \lambda I$ необратим, порождает ортонормированный базис из собственных векторов $\chi$ [3]. В силу предложения 2 оператор $\chi$ продолжается до наблюдаемой на $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$ (с дискретным спектром).

Согласно [1], любой вектор $|\Psi\rangle$ должен выражаться интегралом $|\Psi\rangle = \int |\Phi_{\chi'}\rangle d\chi'$ от собственных векторов $|\Phi_{\chi'}\rangle$ непрерывной наблюдаемой $\chi$. Перенос этого определения в обсуждаемую модель КМ без дополнительных условий лишен смысла.

**Предложение 6.** *Любой изометрический изоморфизм* $F : L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C}) \to L_2(\mathbb{R}^s; \mathbb{C})$ *однозначно продолжается до линейного гомеоморфизма* $F : \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r) \to \mathcal{D}'(\mathbb{R}^s)$*, сохраняющего эрмитово произведение в следующем смысле:*

$$\langle F(\Psi)|F(f)\rangle = \langle \Psi|f\rangle \quad \forall \Psi \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r) \quad \forall f \in L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C}) \subset \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$$

*Доказательство.* Пусть последовательность $\Phi_n \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$ сходится к $\Psi \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$. Определим отображение $\widetilde{F} : \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r) \to \mathcal{D}'(\mathbb{R}^s)$ равенством $\widetilde{F}(\Psi) = \lim_n F(\Phi_n)$. Нужно доказать существование такого предела для любой последовательности $\Phi_n \to \Psi$. Достаточно проверить, что для любой $g \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^s)$ существует и конечен $\lim_n (F(\Phi_n), g)$. Поскольку $g = F(f)$ для некоторой $f \in L_2(\mathbb{R}^r; \mathbb{C})$, по критерию Коши оценим:

$$|(F(\Phi_n), g) - (F(\Phi_m), g)| = \left|\big(F(\Phi_n - \Phi_m), F(f)\big)\right| = \left|\langle F(\Phi_n - \Phi_m)|(F(f))^*\rangle\right| =$$

$$= \left|\langle\Phi_n - \Phi_m|F^{-1}((F(f))^*)\rangle\right| = \left|\big(\Phi_n - \Phi_m, (F^{-1}((F(f))^*))^*\big)\right|$$

Для достаточно больших $n$ и $m$ последний модуль как угодно мал, т.к. $\Phi_n$ сходится в $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$. Поэтому $\lim_n(F(\Phi_n), g)$ существует и конечен. Проверим сохранение $\langle\cdot|\cdot\rangle$ :

$$\langle\widetilde{F}(\Psi)|F(f)\rangle = \lim_n\langle F(\Phi_n)|F(f)\rangle = \lim_n\langle\Phi_n|f\rangle = \langle\Phi|f\rangle$$

Проверим непрерывность $\widetilde{F}$. Пусть $\Psi_n \to \Psi$, где $\Psi_n \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^r)$. Тогда $\forall f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$:

$$\lim_n\big(\widetilde{F}(\Psi_n), F(f)\big) = \lim_n\langle(F(f))^*|\widetilde{F}(\Psi_n)\rangle = \lim_n\langle F^{-1}((F(f))^*)|\Psi_n\rangle =$$

$$= \langle F^{-1}((F(f))^*)|\Psi\rangle = \langle(F(f))^*|\widetilde{F}(\Psi)\rangle = (\widetilde{F}(\Psi), F(f))$$

Следовательно $\widetilde{F}(\Psi_n) \to \widetilde{F}(\Psi)$. Обратимость $\widetilde{F}$ следует из того, что существует аналогичное продолжение изоморфизма $F^{-1} : L_2(\mathbb{R}^s;\mathbb{C}) \to L_2(\mathbb{R}^r;\mathbb{C})$ $\Box$.

Определим наблюдаемые с непрерывным спектром, опираясь на «замены координат» по Гейзенбергу [4]. Пусть $t_y = \int S_{yx}t_x dx$, где «индексы» $x$ и $y$ пробегают $\mathbb{R}^r$ и $\mathbb{R}^s$ соответственно. Условие унитарности «матрицы» $(S_{xy})$ эквивалентно следующей паре уравнений для обобщенных матриц (определение 2):

$$\int_{\mathbb{R}^r} S^*_{y'x}S_{y''x}dx = \delta(y'-y'') \qquad \int_{\mathbb{R}^s} S^*_{yx'}S_{yx''}dy = \delta(x'-x'')$$

Тогда $t_x = \int S^*_{yx}t_y dy$ и для любых $a, b \in \sigma(\mathcal{H})$ имеет место $\int a^*_y b_y dy = \int a^*_x b_x dx$. Введем обозначения $\varphi_x(y) = S_{yx}$, $\psi_y(x) = S^*_{yx}$, $\Phi(y) = t_y$, $\Psi(x) = t_x$, тогда $\varphi^*_x(y) = \psi_y(x)$ и

$$\int_{\mathbb{R}^r} \psi^*_{y'}(x)\psi_{y''}(x)dx = \delta(y'-y'') \qquad \int_{\mathbb{R}^s} \varphi^*_{x'}(y)\varphi_{x''}(y)dy = \delta(x'-x'') \tag{13}$$

При этом формулы $\Phi(y) = \int \varphi_x(y)\Psi(x)dx$ и $\Psi(x) = \int \psi_y(x)\Phi(y)dy$ определяют взаимно обратные изометрические изоморфизмы $F : L_2(\mathbb{R}^r(x);\mathbb{C}) \to L_2(\mathbb{R}^s(y);\mathbb{C})$ и $G : L_2(\mathbb{R}^s(y);\mathbb{C}) \to L_2(\mathbb{R}^r(x);\mathbb{C})$. Согласно определению 1, мономорфизм $\widetilde{\sigma} = F\sigma$ определяет расширение Дирака $\big(\mathcal{D}'(\mathbb{R}^s), \widetilde{\sigma}\big)$, где $\mathcal{H}^{\widetilde{\sigma}}_{ext} = \mathcal{D}'(\mathbb{R}^s)$ и $\widetilde{\sigma}(\mathcal{H}) = L_2(\mathbb{R}^s;\mathbb{C})$.

На $\mathcal{H}^{\widetilde{\sigma}}_{ext}$ определены операторы $\hat{y}_j$, умножающие $\Phi(y) \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^s)$ на $y_j$, где $j = 1,\ldots,s$. Их можно перенести на $\mathcal{H}^{\sigma}_{ext}$ посредством $F = G^{-1}$. Тогда $\forall y' \in \mathbb{R}^s$

$$G(|e_{y'}\rangle) = G(\delta(y-y')) = \int \psi_y(x)\delta(y-y')dy = \psi_{y'}(x) = |\psi_{y'}(x)\rangle$$

является общими собственным вектором эрмитовых операторов $F^{-1}\hat{y}_j F$ и отвечает набору собственных значений $y'$. Из (13) видно, что векторы $|\psi_{y'}(x)\rangle$ нормированы условием $\langle\psi_{y'}|\psi_{y''}\rangle = \delta(y'-y'')$ (равенство обобщенных матриц).

Именно так получаются импульсы $\hat{p}_j$, где $r = s$, $y = p$, $\psi_{y'} = \Psi_{p'}$, а гомеоморфизмом $F : \mathcal{H}^{\sigma}_{ext} \to \mathcal{H}^{\widetilde{\sigma}}_{ext}$, который продолжает изометрию $F : L_2(\mathbb{R}^r;\mathbb{C}) \to L_2(\mathbb{R}^r;\mathbb{C})$ согласно предложению 6, является нормированное преобразование Фурье:

$$F(\Psi)(p) = \frac{1}{h^{r/2}} \int e^{-ipx/\hbar} \cdot \Psi(x)dx \quad F\left(L_2(\mathbb{R}^r;\mathbb{C})\right) = L_2(\mathbb{R}^r;\mathbb{C})$$

Теперь мы готовы ввести наблюдаемые с непрерывным спектром.

**Определение 8.** *Пусть дан любой изометрический изоморфизм $F : L_2(\mathbb{R}^r;\mathbb{C}) \to L_2(\mathbb{R}^s;\mathbb{C})$. По предложению 6 продолжим его до линейного гомеоморфизма $F : \mathcal{H}^{\sigma}_{ext} \to \mathcal{H}^{\widetilde{\sigma}}_{ext}$ пространств расширений Дирака $(\mathcal{H}^{\sigma}_{ext}, \sigma)$ и $\left(\mathcal{H}^{\widetilde{\sigma}}_{ext}, \widetilde{\sigma}\right)$, где $\widetilde{\sigma} = F\sigma$. Пусть $\hat{y}_j|\Psi(y)\rangle = |y_j\Psi(y)\rangle$ для всех $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{\widetilde{\sigma}}_{ext} = \mathcal{D}'(\mathbb{R}^s)$ и $j = 1, \ldots, s$.*

*Тогда операторы $\hat{y}_j$ на $\mathcal{H}^{\widetilde{\sigma}}_{ext}$ определяют эрмитовы операторы $F^{-1}\hat{y}_jF$ на $\mathcal{H}^{\sigma}_{ext}$, имеющие непрерывный спектр, которые называются наблюдаемыми.*

Поскольку спектры операторов $F^{-1}\hat{y}_jF$ и $\hat{y}_j$ совпадают, спектры всех наблюдаемых вещественны. Все операторы $\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_r$ являются наблюдаемыми, отвечающими отображению $F = I$. Как видно из рассуждений выше, импульсы $\hat{p}_j$ являются наблюдаемыми. Все операторы, введенные определением 8, имеют спектр $\mathbb{R}$. Другие непрерывные спектры могут возникать из следующей конструкции.

Для любого гладкого диффеоморфизма $F : \mathbb{R}^r \to U \subset \mathbb{R}^r$ операторы $f_j(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_r)$, где $F = f_1 \times \ldots \times f_r$, по определению являются наблюдаемыми и, как таковые, составляют полный коммутативный набор, где $|F'(x')\rangle = |x'\rangle$ для всех $x' \in \mathbb{R}^r$. Спектр оператора $\hat{f}_j$ совпадает с проекцией $U$ на $j$ - ю координатную ось.

## § 6. Уравнение Шредингера

**Определение 9.** *Набор коммутирующих наблюдаемых $\xi_1, \ldots, \xi_n$ называется полным, если каждому вектору $(\xi'_1, \ldots, \xi'_n)$ их собственных значений отвечает одномерное максимальное подпространство, являющееся инвариантным для всех $\xi_k$.*

Нормированный вектор, порождающий это подпространство, обозначается $|\xi'_1 \ldots \xi'_n\rangle$ или $|\xi'\rangle$ [1]. Наблюдаемые $\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_r$ составляют полный коммутативный набор, его общие собственные векторы $|x'_1 \ldots x'_r\rangle = |x'\rangle$ обозначались выше, как $|e_{x'}\rangle$. Другой такой набор образуют импульсы $\hat{p}_j$, так что $|p'\rangle = |\Psi_{p'}\rangle$ для всех $p' \in \mathbb{R}^r$.

**Предложение 7.** *Для любой наблюдаемой $\chi$ с непрерывным спектром каждый вектор $|\Phi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$ выражается интегралом $|\Psi\rangle = \int |\Phi_{\chi'}\rangle d\chi'$ по спектру от собственных векторов $|\Phi_{\chi'}\rangle$ наблюдаемой $\chi$, отвечающих собственным значениям $\chi'$.*

*Доказательство.* Достаточно рассмотреть случай, когда $\chi$ определяется линейным гомеоморфизмом $F : \mathcal{H}^{\sigma}_{ext} \to \mathcal{H}^{\widetilde{\sigma}}_{ext}$, так что $\chi = F^{-1}\hat{y}_1 F$. Тогда вектор $F(|\Psi\rangle) \in \widetilde{\sigma}(\mathcal{H})$ выражается интегралом от собственных векторов операторов $\hat{y}_j$:

$$F(|\Psi\rangle) = \int \psi(y')|y'\rangle dy' = \int_{-\infty}^{+\infty} \Big( \int_{\mathbb{R}^{r-1}} \psi(y'_1, y'_2, \ldots, y'_r)|y'_1, y'_2, \ldots, y'_r\rangle dy'_2 \ldots dy'_r \Big) dy'_1$$

Интеграл в скобках является собственным вектором для $\hat{y}_1$, обозначим его $|\theta_{y'_1}\rangle$. Тогда $F(|\Psi\rangle) = \int |\theta_{y'_1}\rangle dy'_1$, отсюда $|\Psi\rangle = \int |\Phi_{\chi'}\rangle d\chi'$, где $\chi' = y'_1$, $|\Phi_{\chi'}\rangle = F^{-1}(|\theta_{y'_1}\rangle)$ и

$$\chi(|\Phi_{\chi'}\rangle) = \chi\big(F^{-1}(|\theta_{y'_1}\rangle)\big) = F^{-1}\hat{y}_1(|\theta_{y'_1}\rangle) = F^{-1}(y'_1|\theta_{y'_1}\rangle) = y'_1 F^{-1}(|\theta_{y'_1}\rangle) = \chi'|\Phi_{\chi'}\rangle \quad \square$$

**Предложение 8.** *Каждая наблюдаемая с непрерывным спектром входит в полный коммутативый набор, общие собственные векторы которого нормируются на дельта-функцию и составляют континуальный базис.*

*Доказательство.* Полные коммутативные наборы, о которых идет речь, возникают вместе с наблюдаемыми в силу предложения 8. Проверим нормируемость общих собственных векторов $|g_{y'}\rangle = F^{-1}(|e_{y'}\rangle)$ наблюдаемых $\xi_j = F^{-1}\hat{y}_j F$, где $j = 1, \ldots, s$.

Фиксируем любое $y' \in \mathbb{R}^s$ и рассмотрим последовательность вещественных функций $\varphi_n(y'') \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^s)$, сходящуюся к $|e_{y'}\rangle = \delta(y - y')$ в топологии $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^s)$. Тогда $\forall f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^s)$ число $\big(\langle G(e_{y'})|G(e_{y''})\rangle, f(y'')\big)$, где $G = F^{-1}$, по определению равно

$$\lim_{n\to\infty} \big(\langle G(\varphi_n)|G(e_{y''})\rangle, f(y'')\big) = \lim_{n\to\infty} \big(\langle \varphi_n|e_{y''}\rangle, f(y'')\big) = \lim_{n\to\infty} \big(\varphi_n(y''), f(y'')\big)$$

Последний предел равен $(\delta(y' - y''), f(y''))$, что и доказывает равенство обобщенных матриц $\big(\langle g_{y'}|g_{y''}\rangle\big) = \big(\delta(y' - y'')\big)$. Векторы $|g_y\rangle$ составляют базис в $\mathcal{H}^{\sigma}_{ext}$, т.к.

$$\forall |\Phi\rangle \in \sigma(\mathcal{H}) \quad F(|\Phi\rangle) = \int \psi(y)|e_y\rangle dy \quad \Rightarrow \quad |\Phi\rangle = \int \psi(y)|g_y\rangle dy \quad \square$$

Говорят, что наблюдаемые $\xi_1, \ldots, \xi_s$ (и их матрицы) *диагонализуются* в базисе $|g_y\rangle$, векторы которого обозначаются $|\xi'\rangle$, где $\xi' = y' \in \mathbb{R}^s$ и $|\xi'\rangle = |g_{y'}\rangle = |y'\rangle$.

Для любого $x' \in \mathbb{R}^r$ оператор проекции $|x'\rangle\langle x'| : \mathcal{H}^{\sigma}_{reg} \to \big(\mathcal{H}^{\sigma}_{ext} \setminus \mathcal{H}^{\sigma}_{reg}\big) \cup \{0\}$ отображает вектор $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}^{\sigma}_{reg}$ в вектор $|x'\rangle\langle x'|\Phi\rangle = \Phi(x')|e_{x'}\rangle$. Определение проектора не имеет смысла на $\mathcal{H}^{\sigma}_{ext} \setminus \mathcal{H}^{\sigma}_{reg}$, но он продолжается на все $\mathcal{H}^{\sigma}_{ext}$ (предложение 2). Элементарно проверяется эрмитовость. В КМ [1] важную роль играет тождество

$$\int |x'_1 \ldots x'_r\rangle\langle x'_1 \ldots x'_r| \; dx'_1 \ldots dx'_r = I \quad \text{(единичный оператор)} \tag{14}$$

где оператор в левой части определен на всем $\mathcal{H}^{\sigma}_{ext}$. В силу предложения 2 достаточно проверить его для любого $|\Psi\rangle \in \sigma(\mathcal{H})$. Пусть $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^r)$. Разбивая пространство $\mathbb{R}^r$

на кубы со сторонами $\lambda$ и центрами $x_{\lambda,n}$, применяя левую часть (14) к $|\Psi\rangle$, получим:

$$\Big(\int |x'\rangle\langle x'|dx'(|\Psi\rangle), f\Big) = \big(\lim_{\lambda\to 0}\sum_{n\in\mathbb{Z}} |x_{\lambda,n}\rangle\langle x_{\lambda,n}|\cdot\lambda^r(|\Psi\rangle), f\big) = \lim_{\lambda\to 0}\sum_n \big(\Psi(x_{\lambda,n})|x_{\lambda,n}\rangle\cdot\lambda^r, f\big)$$

$$= \lim_{\lambda\to 0}\sum_n \Psi(x_{\lambda,n})\lambda^r\big(\delta\left(x - x_{\lambda,n}\right), f(x)\big) = \lim_{\lambda\to 0}\sum_n \Psi(x_{\lambda,n})f(x_{\lambda,n})\lambda^r = \int \Psi(x)f(x)dx \ \square$$

Для любой наблюдаемой $\xi = F^{-1}\hat{y}_j F$ на $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$, возникающей в соответствии с определением 8, докажем тождество $\langle\xi(e_{x'})|e_{x''}\rangle = \langle e_{x'}|\xi(e_{x''})\rangle$. Используем (14):

$$|\xi(e_x)\rangle = \xi(I|e_x\rangle) = \xi\Big(\int |g_{y'}\rangle\langle g_{y'}|dy'(|e_x\rangle)\Big) = \int\langle g_{y'}|e_x\rangle\xi(|g_{y'}\rangle)dy' = \int\langle g_{y'}|e_x\rangle\xi'|g_{y'}\rangle dy'$$

$$\langle e_{x'}|\xi(e_{x''})\rangle = \int\langle g_{y'}|e_{x''}\rangle\xi'\langle e_{x'}|g_{y'}\rangle dy' \quad \langle\xi(e_{x'})|e_{x''}\rangle = \int\langle e_{x'}|g_{y'}\rangle\xi'\langle g_{y'}|e_{x''}\rangle dy' \quad \square$$

Таким образом, к непрерывным наблюдаемым $\xi$ применим формализм Дирака, позволяющий записывать $\langle\xi(e_{x'})|e_{x''}\rangle$ и $\langle e_{x'}|\xi(e_{x''})\rangle$, как $\langle e_{x'}|\xi|e_{x''}\rangle = \langle x'|\xi|x''\rangle$ в базисах из собственных векторов *любых* полных наборов коммутирующих наблюдаемых. При этом $\langle x'|\xi|x''\rangle$ обозначает не число, а обобщенную матрицу.

Перестановочные соотношения (4) выполняются в пространстве $\mathcal{H}^\sigma_{ext}$ любого расширения Дирака, если обозначить $\hat{x}_j$ и $\hat{p}_j$, как $q_j$ и $p_j$ при $j = 1,\dots,r$. Для системы, имеющей классический аналог, $r$ равно числу $n$ пространственных степеней свободы. При этом пространство осуществимых состояний $\mathcal{H} \cong L_2(\mathbb{R}^n;\mathbb{C})$.

Базис из собственных векторов $|q'\rangle = |e_{q'}\rangle$ полного комутативного набора наблюдаемых $q_j$ определяет представление Шредингера [1]. В нем «матричные элементы»:

$$(q_j)_{q'q''} = q'_j\delta(q'_1 - q''_1)\dots\delta(q'_n - q''_n) = q'_j\delta(q' - q'') \tag{15}$$

$$(p_j)_{q'q''} = -i\hbar\delta(q'_1 - q''_1)\dots\delta(q'_{j-1} - q''_{j-1})\delta'(q'_j - q''_j)\delta(q'_{j+1} - q''_{j+1})\dots\delta(q'_n - q''_n) \tag{16}$$

Эти формулы даны в [4], $\delta'(x)$ обозначает производную от $\delta(x)\in\mathcal{D}'(\mathbb{R})$. Ниже дан вывод Гейзенбергом уравнения Шредингера [4]. Из (5) следует, что

$$S(H_{kl}) = (H_{q'q''})S \quad\Leftrightarrow\quad \int H_{q'q''}S_{q''k}dq'' = E_k S_{q'k} \tag{17}$$

Обозначая $\Psi_k(q') = S_{q'k}$, подставляя матрицы (15),(16) в оператор $H(p,q)$ и вычисляя интеграл (17) получим стационарное уравнение Шредингера:

$$H\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q'_1},\dots,-i\hbar\frac{\partial}{\partial q'_n}, q'_1,\dots,q'_n\Big)\Psi_k(q') = E_k\Psi_k(q') \tag{18}$$

Из (18) определяются значения энергии $E_k$ и волновые функции $\Psi_k(q')$ стационарных состояний $|\Psi_k(q')\rangle$, составляющих ортонормированный базис в $L_2(\mathbb{R}^n;\mathbb{C}) = \sigma(\mathcal{H})$.

Теперь заметим, что если каждый «столбец матрицы» $S_{q'k} = \Psi_k(q')$ умножить на $e^{i\phi}$, то физически значимые величины (амплитуды вероятностей $|\Psi_k(q')|^2$ и мат. ожидания $\chi_{kk}$ наблюдаемых $\chi$) не изменятся. Если наблюдаемая $\chi$ в представлении Шредингера не зависит от $t$, например $p_j$ и $q_j$ (15,16), то ее исходное представление Гейзенберга будет иметь искомый вид $\chi_{kl}(t) = \eta_{kl}e^{i\omega_{kl}t}$ (3), если мы умножим $k$ - й «столбец» $S$ на $e^{-iE_k/\hbar}$ при каждом $k \in \mathbb{N}$. После этого каждая волновая функция $\Psi_k(q', t) = S_{q'k}$, а значит и каждая $\Psi(q', t) = \sum_k a_k \Psi_k(q', t)$ удовлетворяет уравнению:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_1'}, \ldots, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_n'}, q_1', \ldots, q_n'\Big)\Psi(q', t) \tag{19}$$

Как видно, вывод уравнения (19) является эвристическим. Получим уравнение Шредингера более формально. Изометрический изоморфизм $\sigma : \mathcal{H} \to L_2(\mathbb{R}^n; \mathbb{C})$, определяющий расширение Дирака, должен зависеть от времени $t$, так что $\sigma = \sigma_t$ (в противном случае система была бы лишена динамики). Следовательно, волновые функции $(\sigma_t(e_k))(q') = \Psi_k(q', t)$ зависят от $t$.

Поскольку в стационарном состоянии средние значения физических величин не меняются, в т.ч. не меняется амплитуда вероятностей $|\Psi_k(q', t)|^2$, зависимость от времени должна выражаться фазовым множителем, т.е. $\Psi_k(q', t) = e^{i\phi(t)}\psi_k(q')$. Отсюда $\partial_t\Psi_k(q', t) = i\dot{\phi}\Psi_k(q', t)$. Из аргументов Гейзенберга следует, что $\phi(t) = -E_k t/\hbar$. Умножая обе части (18) на $i\dot{\phi}$, получим $E_k\partial_t\Psi_k = i\dot{\phi}H(\Psi_k)$ откуда $i\hbar\partial_t\Psi_k = H(\Psi_k)$ $\square$.

## § 7. Заключение

Таким образом, в рамках рассмотренной модели КМ возможно строгое описание наблюдаемых с непрерывным спектром. При этом спектральная теорема, на которой основана теория Фон Неймана [2], никакой роли не играет. Возможно, что глубоко переделанная им КМ не потеряла ничего по существу. Но она утратила математическую красоту, которую Дирак считал необходимым качеством физической теории (впрочем, это суждение субъективно). На пути, который фон Нейман избрал для наведения порядка в КМ, она бы вряд ли была открыта. При этом порядок присутствовал в ней изначально. Просто Дирак опередил развитие математики, введя в обращение «несобственную» функцию $\delta(x)$. По-видимому, формализм непрерывных наблюдаемых в [1], привычный физикам [7], имеет под собой надежную основу.

# Список литературы

[1] П.А.М. Дирак, Принципы квантовой механики, 1960, Москва: Физматгиз (перевод английского издания P.A.M. Dirac. The principles of quantum mechanics, 1958, Oxford: Clarendon press).

[2] Дж. фон Нейман, Математические основы квантовой механики, 1964, М.: Наука.

[3] У. Рудин, Функциональный анализ, 1975, М.: Мир.

[4] В. Гейзенберг, Физические принципы квантовой теории, 1932, Москва: ГТТИ (перевод немецкого издания W. Heisenberg: Die Physikalischen Prinzipien der Quantentheorie, 1930, Leipzig)

[5] В.С. Владимиров, Уравнения математической физики, 1988, М.:Наука.

[6] А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин, Элементы теории функций и функционального анализа, 1972, М.:Наука.

[7] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теоретическая физика. Квантовая механика (нерелятивистская теория),1963, Л. : Государственное издательство.