Таким образом, в выборе коэффициентов a_{kl} остается еще известный произвол.

Рассмотрим, наконец, волновые функции сплошного спектра. Для волновых функций сплошного спектра $\psi_F(x)$ условие ортогональности доказывается аналогично (18,3)—(18,5):

$$\int \psi_F^*(x)\,\psi_{F'}(x)\,dV = 0. \tag{18,11}$$

С другой стороны, условие нормировки уже не может быть записано в виде (18,6), так как волновые функции сплошного спектра квадратично не интегрируемы. Интеграл $\int |\psi_F|^2 dV$ для них расходится. Эта расходимость связана с тем, что собственные функции сплошного спектра не обращаются в нуль на бесконечности. Собственные функции сплошного спектра удобно нормировать на δ-функцию Дирака (см. приложение III), так что условия ортогональности и нормировки могут быть выражены аналогично (18,7)

$$\int \psi_F^*(x)\,\psi_{F'}(x)\,dV = \delta(F - F'). \tag{18,12}$$

Нормировка на δ-функцию, конечно, не является единственно возможной. Ниже мы встретимся и с другими способами нормировки собственных функций сплошного спектра (см., например, § 26).

§ 19. Разложение по собственным функциям

В предыдущем параграфе мы доказали, что система собственных функций произвольного линейного самосопряженного оператора является системой ортогональных функций. Оказывается, что такая система функций является полной. Произвольную непрерывную функцию, определенную в той же области изменения независимых переменных и удовлетворяющую широкому классу условий, можно разложить по этой системе собственных функций[1]).

Мы приведем здесь сперва условия полноты системы собственных функций для случая оператора F, обладающего дискретным спектром. Напишем разложение функции ψ в ряд по собственным функциям ψ_n, предполагая последние нормированными на единицу, в виде

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x). \tag{19,1}$$

[1]) В. А. Смирнов, Курс высшей математики, Физматгиз, 1958, т. IV, стр. 133.

Амплитуды c_n можно определить, воспользовавшись ортогональностью собственных функций. Умножая (19,1) на $\psi_m^*(x)$ и интегрируя по всей области изменения независимых переменных, получаем

$$\int \psi_m^*(x)\,\psi(x)\,dV = \sum_n c_n \int \psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,dV.$$

При этом мы изменили порядок суммирования и интегрирования. В силу ортогональности собственных функций (18,7), из всех членов суммы, стоящей в правой части равенства, отличен от нуля только член с $n = m$. Соответственно имеем

$$c_m = \int \psi_m^*(x)\,\psi(x)\,dV. \tag{19,2}$$

Подставляя это выражение в (19,1) и снова изменяя порядок суммирования и интегрирования, получаем

$$\psi(x) = \int \psi(x')\left(\sum_n \psi_n^*(x')\,\psi_n(x)\right)dV'. \tag{19,3}$$

Для того чтобы это выражение было справедливым для произвольной непрерывной функции $\psi(x)$, необходимо выполнение равенства

$$\sum_n \psi_n^*(x')\,\psi_n(x) = \delta(x - x'). \tag{19,4}$$

Соотношение (19,4) выражает условие полноты системы собственных функций $\psi_n(x)$. Если оператор $\hat{F}$ обладает сплошным спектром, то разложение функции $\psi(x)$ по его собственным функциям представится уже не суммой, а интегралом

$$\psi(x) = \int c(F)\,\psi_F(x)\,dF. \tag{19,5}$$

Амплитуды $c(F)$ находятся так же, как и в случае дискретного спектра. Умножая левую и правую части уравнения (19,5) на функцию $\psi_{F'}^*(x)$ и интегрируя по всей области изменения независимых переменных, находим

$$\int \psi_{F'}^*(x)\,\psi(x)\,dV = \int c(F)\,dF \int \psi_{F'}^*(x)\,\psi_F(x)\,dV.$$

Предполагая, что собственные функции $\psi_F(x)$ нормированы на δ-функцию, окончательно получаем

$$c(F) = \int \psi_F^*(x)\,\psi(x)\,dV. \tag{19,6}$$

С частным случаем подобного разложения (разложения по плоским волнам) мы уже встречались в § 3. Условие полноты в случае сплошного спектра записывается аналогично (19,4)

$$\int \psi_F^*(x')\,\psi_F(x)\,dF = \delta(x - x'). \tag{19.7}$$

§ 20. Квантовомеханические величины и операторы

Мы можем теперь перейти к обсуждению основного постулата квантовой механики, устанавливающего связь между реальными физическими величинами, характеризующими свойства квантовомеханических систем, и математическим аппаратом квантовой механики.

В классической механике состояние системы определяется совокупностью координат и импульсов (или величин, выражающихся через них), входящих в уравнение движения. Все величины, характеризующие состояние системы, называют механическими величинами. В квантовой механике величины, играющие аналогичную роль будут называться квантовомеханическими величинами. Их также часто именуют физическими величинами или динамическими переменными.

На примерах, разобранных выше, были выяснены некоторые свойства квантовых систем. К ним относятся в первую очередь:

1) наличие соотношения неопределенности между значениями канонически сопряженных физических величин (таких, как, например, координата и импульс);

2) существование дискретного и непрерывного спектров значений физических величин (например, энергии квантового осциллятора и свободной частицы);

3) существование суперпозиции квантовых состояний (например, суперпозиции состояний свободной частицы);

4) непрерывный переход от понятий квантовой механики к понятиям классической механики при переходе к системам, в которых можно считать постоянную Планка бесконечно малой величиной, а квантовые числа — бесконечно большими (принцип соответствия).

Первая и вторая особенности квантовомеханических величин как раз соответствуют свойствам линейных операторов — их некоммутативности и существованию спектра собственных значений. Поэтому естественно высказать следующее основное допущение: «каждой квантовомеханической величине F соответствует некоторый линейный эрмитовый оператор $\hat{F}$. Спектр собственных значений оператора $\hat{F}$ представляет спектр возможных (измеряемых) значений этой величины».