

оперируют с формальными решениями ур-ния $Ax = \lambda x$, отвечающими непрерывному спектру; такие решения не принадлежат \mathcal{H} . Напр., для системы с одной степенью свободы, координата q которой может принимать значения на всей оси $\mathbb{R} = (-\infty, +\infty)$, \mathcal{H} в координатном представлении реализуется как пространство $L^2(\mathbb{R})$ квадратично интегрируемых ф-ций $\varphi(q)$ на \mathbb{R} . Оператор импульса $p = -i\hbar d/dq$ имеет непрерывный спектр, совпадающий с \mathbb{R} . Решениями ур-ния $p\psi_\lambda(q) = \lambda\psi_\lambda(q)$ являются плоские волны $\psi_\lambda(q) = |\lambda\rangle = \exp(i\lambda q/\hbar)$; поскольку в пространстве $L^2(\mathbb{R})$ их норма $\langle \lambda | \lambda \rangle = (2\pi)^{-1} \int \psi_\lambda^*(q)\psi_\lambda(q) dq$ расходится, они не принадлежат $L^2(\mathbb{R})$ и наз. обобщёнными собственными векторами. Комбинация $|\lambda\rangle \langle \lambda|$ является аналогом проектора на обобщённый собств. вектор $|\lambda\rangle$, а спектральное разложение

$$p = \int d\lambda \lambda |\lambda\rangle \langle \lambda| -$$

аналогом разложения (*) для случая непрерывного спектра: для любого вектора $\varphi(q) = |\varphi\rangle$ из $L^2(\mathbb{R})$ имеем:

$$p\varphi(q) = \int d\lambda \lambda |\lambda\rangle \langle \lambda | \varphi \rangle = \int d\lambda \lambda \exp(-i\lambda q/\hbar) (2\pi)^{-1} \int dq' \exp(i\lambda q'/\hbar) \varphi(q') = -i\hbar d\varphi(q)/dq.$$

Эта конструкция служит только моделью математически строгого определения спектрального разложения операторов с непрерывным спектром ([3], [4]). В большинстве квантовомеханич. задач дискретный и непрерывный участки спектра не пересекаются, а случаи, когда точки дискретного спектра погружены в непрерывный, считаются экзотическими. Простейший пример такой ситуации — осциллирующий и медленно убывающий с расстоянием потенциал (т. н. потенциал Вигнера — фон Неймана).

Лит.: 1) Халмош П., Конечномерные векторные пространства, пер. с англ., М., 1963; 2) Дирак П. А. М., Принципы квантовой механики, пер. с англ., 2 изд., М., 1979; 3) Рид М., Саймон Б., Методы современной математической физики, т. 1, Функциональный анализ, пер. с англ., М., 1977; 4) фон Нейман И., Математические основы квантовой механики, пер. с нем., М., 1964. В. И. Павлов.

СПЕКТРАЛЬНАЯ АППАРАТУРА РЕНТГЕНОВСКАЯ — см. Рентгеновская спектральная аппаратура.

СПЕКТРАЛЬНАЯ ЛИНИЯ — узкий (почти монохроматический) пик в спектре испускания (С. л. испускания) либо провал в спектре пропускания (С. л. поглощения) объекта. С. л. характерны для разл. спектров, однако чаще всего этот термин применяют к квантовым системам. Положение С. л. в спектре обычно определяется длиной волны λ , частотой $\nu = c/\lambda$ либо энергией фотона $h\nu$.

С. л. квантовой системы (атома, ядра, молекулы, кристалла и т. п.), как правило, отвечает переходу между её дискретными уровнями энергии j и k и кроме длины волны характеризуется энергией перехода и квантовыми числами нижнего j и верхнего k уровней, вероятностью излучат. перехода (Эйнштейна коэффициентом) A_{jk} либо силой осциллятора f_{jk} . С. л., возникающие вследствие оптически разрешённых (электрических дипольных) переходов, наз. разрешёнными. Если электрический дипольный переход между уровнями запрещён отбора правилами, С. л. наз. запрещённой.

Распределение интенсивности в С. л. наз. её контуром; его характеризуют ширина спектральной линии и её сдвиг (см. Контур спектральной линии). Мин. ширина С. л. наз. естественной или радиационной, она реализуется при квантовых переходах в изолиров. атоме или молекуле (системе неподвижных и невзаимодействующих молекул). Уширение спек-

тральных линий возникает вследствие теплового движения частиц (доплеровское уширение) и взаимодействий с окружающими частицами. В некоторых случаях упругие столкновения с окружающими частицами либо со стенками приводят к сужению С. л. Чрезвычайно узкие ($\Delta\nu/\nu \sim 10^{-15}$) С. л. атомных ядер проявляются в спектрах кристаллов в результате Мессбауэра эффекта. Очень узкие С. л. излучения получают в стабилизированных по частоте квантовых генераторах микроволнового и оптического диапазонов. Весьма узкие С. л. могут наблюдаться методами нелинейной лазерной спектроскопии. Наблюдаемая ширина С. л. часто определяется аппаратной функцией спектрального прибора.

В электрич. поле С. л. испытывает сдвиг и расщепление (см. Штарка эффект), магн. поле приводит к зеемановскому расщеплению С. л. (см. Зеемана эффект). В электрич. поле интенсивной эл.-магн. волны также возникают сдвиг и расщепление С. л.

В таблицах и атласах С. л. чаще всего указывают длины волн, приведённые к условиям наблюдения в вакууме $\lambda_{\text{вак}}$, а иногда — в воздухе при нормальных условиях $\lambda_{\text{возд}}$ ($\lambda_{\text{возд}} = \lambda_{\text{вак}}/n$, где n — показатель преломления воздуха для длины волны $\lambda_{\text{вак}}$). Имеются систематич. таблицы С. л. атомов и ионов, а также атласы С. л. большого числа молекул.

Лит.: Таблицы спектральных линий, 4 изд., М., 1977; Bearden J. A., X-ray wavelengths, «Rev. Mod. Phys.», 1967, т. 39, № 1, p. 78; Bearden J. A., Burg A. F., Reevaluation of X-ray atomic energy levels, там же, p. 125; Kelly R. L., Palumbo L. J., Atomic and ionic emission lines below 2000 angstroms. Hydrogen through krypton, Wash., 1973; Wavelengths and transition probabilities for atoms and atomic ions, Wash., 1980; Стриганов А. Р., Одицова Г. А., Таблицы спектральных линий атомов и ионов, М., 1982. Е. А. Юков. **СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ** (спектральная интенсивность) в статистической физике — коэффициенты разложения временных корреляционных функций в интеграл Фурье. Для операторов A и B квантовомеханич. системы с гамильтонианом H , хим. потенциалом μ и оператором числа частиц N величина С. п.

$$I_{BA}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle B(t)A(t') \rangle \exp(-i\omega(t-t')) dt(t-t'),$$

где $\langle B(t)A(t') \rangle = \text{Sp}[\rho B(t)A(t')] — зависящая лишь от $(t-t')$ равновесная временная корреляц. ф-ция двух операторов в Гейзенберга представлении $B(t) = \exp(i\mathcal{H}t/\hbar) B \exp(-i\mathcal{H}t/\hbar)$, $\mathcal{H} = H - \mu N$, $\rho = Z^{-1} \exp\{- (H - \mu N)/kT\}$ — статистич. оператор для большого канонического распределения Гиббса, $Z = \text{Sp} \exp\{-\mathcal{H}/kT\}$, Sp обозначает суммирование диагональных матричных элементов оператора. С. п. можно получить из спектральных представлений Грина функции, что затем позволяет вычислить временные корреляц. ф-ции. В том случае, когда A и B эрмитово сопряжённые операторы ($B = A^\dagger$), величина $I_{AA} \geq 0$. Перестановочность операторов под знаком Sp^{A^\dagger} определяет условие Кубо — Мартина — Швингера (R. Kubo, P. C. Martin, J. Schwinger, 1959) для С. п.:$

$$I_{AB}(\omega) = I_{BA}(-\omega) \exp(-\hbar\omega/kT).$$

В более явной форме С. п. можно представить в виде суммы по всем собств. состояниям оператора \mathcal{H} (m и n — квантовые числа):

$$I_{BA}(\omega) = 2\pi \sum_{m,n} B_{mn} A_{nm} \exp(-\mathcal{E}_m/kT) \delta(\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n - \hbar\omega).$$

Здесь \mathcal{E}_m и \mathcal{E}_n — собств. значения оператора \mathcal{H} , B_{mn} и A_{nm} — матричные элементы операторов A и B по системе собств. ф-ций \mathcal{H} , $\delta(\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n - \hbar\omega) —$