Дж. МАККИ

ЛЕКЦИИ ПО МАТЕМАТИЧЕСКИМ ОСНОВАМ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Перевод с английского
Н. Б. ВАСИЛЬЕВА

Под редакцией
А. А. КИРИЛЛОВА

Автор книги — известный американский математик — рассматривает основные понятия и задачи квантовой механики с чисто математической точки зрения, пользуясь терминологией современной математики.

Первая глава посвящена классической механике систем с конечным числом степеней свободы и статистической механике. Во второй главе обсуждаются основные понятия квантовой механики, причем проводятся многочисленные параллели с классической механикой. Третья глава посвящена квантовой механике атома и связанным с ней вопросам теории представлений групп. От читателей не требуется специальной подготовки по физике.

Книга представляет интерес для математиков (начиная со студентов старших курсов), желающих ознакомиться с основами квантовой механики и математическими задачами, возникающими в механике. Для читателей, знакомых с квантовой механикой, весьма ценно освещение принципиальных вопросов различных разделов этой науки с новой точки зрения.

Редакция литературы по
математическим наукам

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

Автор этой книги Дж. Макки — крупный американский математик, известный своими работами по функциональному анализу и теории представлений групп. В течение нескольких лет он читал лекции по математическим основам квантовой механики для студентов-математиков Гарвардского университета. Впоследствии эти лекции были изданы отдельной книгой, перевод которой предлагается вниманию читателя. Во время своего посещения Советского Союза в 1961 г. Дж. Макки сделал интересные обзорные доклады по квантовой механике и теории представлений групп в Ленинградском и Московском университетах.

Книгу Макки можно было бы назвать „Квантовая механика для математиков". Для ее чтения не требуется никаких предварительных знаний по механике и физике. Автор дает точные математические определения всех физических понятий, встречающихся в изложении, и уделяет большое внимание возникающим по ходу изложения чисто математическим вопросам. Как правило, эти вопросы довольно трудны; некоторые из них решены лишь недавно, другие до сих пор остаются нерешенными. Принятый автором способ изложения требует от читателя довольно высокой математической культуры. Теория множеств, топология, теория меры, элементы функционального анализа, абстрактная алгебра, тензорный анализ на дифференцируемых многообразиях — вот неполный перечень математического аппарата, используемого в книге.

Хотя автор и дает краткое введение в спектральную теорию самосопряженных операторов, объясняет основные понятия теории дифференцируемых многообразий и других разделов, не входящих в обычный университетский курс математики, книгу все же нельзя считать легко доступной для студентов. Однако, по нашему мнению, усилия, потраченные на чтение этой книги, с лихвой окупаются удовольствием, которое получает читатель, видя, как из простых и естественных предположений строго математически выводятся нетривиальные физические следствия. Например, в гл. 3 определяется структура атомных спектров и выводится периодический закон Д. И. Менделеева по существу из единственного предположения об инвариантности законов природы относительно движений пространства.

Книг такого рода, излагающих физические теории на языке чистой математики, немного во всей мировой литературе. Из них квантовой механике посвящены книги Г. Вейля, Дж. фон Неймана [1]) и эта книга Дж. Макки. Первые две книги написаны в конце 20–х и начале 30–х годов, поэтому книга Дж. Макки, безусловно, будет интересна и специалистам, и людям, не знакомым с квантовой механикой.

[1]) Weil H., Gruppentheorie und Quantenmechanik, Leipzig 1928 (русский перевод: Вейль Г., Теория групп и квантовая механика, ОНТИ ДНТВУ, Харьков. 1938); von Neumann J., Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Berlin, 1932 (русский перевод: фон Нейман, Математические квантовой механики, изд-во "Наука", М., 1964).

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА СЕРИИ [2])

Банальной истиной, основанной на опыте тысячелетий, является положение о том, что взаимодействие математики и физики может быть плодотворным для обеих наук. Тонкость и глубина современных физических теорий делают существенно важным изучение их логической и математической структуры, однако в книгах, опубликованных за последние годы, очень редко можно найти такие исследования. Цель публикации данной серии — найти достойное место для книг подобного направления. В них математическая физика трактуется как попытка введения структуры в физические теории. Мы надеемся, что предлагаемая вниманию читателей серия явится доступным изложением современных достижений математической физики.

А. С. Уайтмен

Принстон, Нью-Джерси
Август 1963 г.

[2]) В США книга издана в серии монографий по математической физике (Mathematical physics monograph series), выходящей под общей редакцией А. Уайтмена. — Прим. ред.

ПРЕДИСЛОВИЕ

При чтении курса лектор обычно составляет более или менее полный конспект прочитанных лекций, которым могли бы пользоваться слушатели. Такой конспект был составлен, в частности, по курсу математических основ квантовой механики, прочитанному в Гарвардском университете весной 1960 г. Текст настоящей книги по существу представляет собой этот конспект, в котором, однако, радикально переработаны отдельные места, исправлены многочисленные мелкие неточности и добавлено короткое приложение.

Курс лекций, положенный в основу этих заметок, предназначался для студентов, которые достаточно свободно обращаются с абстрактными математическими понятиями и в то же время почти незнакомы с физикой или совсем не знают ее. Предполагается, что читателю известны основные понятия абстрактной алгебры, теоретико-множественной топологии и теории меры; кроме того, дается краткое введение в бескоординатный тензорный анализ на многообразиях класса C^∞ и в теорию самосопряженных операторов в гильбертовом пространстве.

Целью курса было изложение квантовой механики и отдельных разделов классической физики с точки зрения, более близкой чистому математику, чем принятая обычно в физической литературе. В соответствии с этим большее внимание уделяется общности и точности формулировок, чем методам решения задач. С другой стороны, мы отнюдь не стремимся к полной строгости. Во многих случаях полное исследование увело бы нас слишком далеко в сторону, в других возникают нетривиальные математические проблемы, которые еще ждут своего решения. В некоторых случаях получение законченной картины просто казалось скорее утомительным, чем проясняющим суть дела. Короче говоря, мы стремились дать набросок вполне строгого исследования, который любой компетентный математик мог бы довести до конца, за исключением решения нескольких более или менее точно поставленных математических задач.

В соответствии с нашим намерением не пользоваться заранее физическими предпосылками мы старались определять все используемые физические понятия только с помощью терминов чистой математики и основных понятий пространства и времени. Наша основная точка зрения состоит в том, что изменение физической системы во времени можно описать с помощью однопараметрической полугруппы U, действующей на некотором множестве S, и что физические законы являются утверждениями, относящимися к структуре S и „инфинитезимальной образующей“ полугруппы U. Эта точка зрения систематически развивается в гл. 1 в применении к классической механике; в нескольких разделах рассматриваются случаи различной степени общности. Последний раздел, посвященный статистической механике, составляет естественный переход — по двум различным путям — к квантовой механике. В гл. 2 с той же точки зрения излагается квантовая механика; при этом подчеркиваются многочисленные параллели с классической механикой. В частности, последние три раздела гл. 2 естественным образом взаимно однозначно соответствуют последним трем разделам гл. 1. Глава 3, посвященная квантовой механике атома, значительно короче остальных и представляет собой нечто более близкое по духу к общепринятой трактовке.

Несколько неформальный характер лекционного курса в известной мере служит оправданием некоторых неточностей. Если читателю покажется, что в какой-либо формуле нужно изменить знак, то, скорее всего, он будет прав; возможно, что могут втретиться и более серьезные ошибки [3]). Точно так же наши библиографические указания носят довольно случайный характер. Излишне говорить, что мы находились под сильным влиянием классических трудов фон Неймана и Вейля; некоторый дополнительный библиографический материал указан в приложении.

Кембридж, Массачусетс
Июль 1963 г.

Джордж У. Макки

[3]) Несколько неточностей устранено при переводе. — *Прим. перев.*

Глава 1

КЛАССИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

1.1 Предварительные замечания

Обозначим через S множество всех „состояний“ физической системы; при этом мы предполагаем, что „состояние“ задается некоторым набором параметров таким образом, что состояние системы в момент времени $t = t_0 > 0$ однозначно определяется соответствующим физическим законом и состоянием при $t = 0$. Например, состояние системы n взаимодействующих материальных точек задается $3n$ координатами точек и $3n$ компонентами скоростей этих точек. Пусть для каждого $s \in S$ и для каждого $t > 0$ через $U_t(s)$ обозначено состояние системы в момент времени t, если в момент времени 0 система находилась в состоянии s. Тогда U_t для каждого фиксированного t будет преобразованием S в S. Далее, $U_{t_1}(U_{t_2}(s))$ — состояние, возникающее через t_1 единиц времени после состояния $U_{t_2}(s)$, а $U_{t_2}(s)$ — состояние, возникающее через t_2 единиц времени после состояния s; таким образом, $U_{t_1}(U_{t_2}(s))$ — состояние, возникающее через $t_1 + t_2$ единиц времени после состояния s, или $U_{t_1+t_2}(s)$. Другими словами, для всех $t_1 > 0$ и $t_2 > 0$ имеет место равенство

$$U_{t_1+t_2} = U_{t_1} U_{t_2} \tag{1.1}$$

Отсюда следует, что множество всех U_t является *полугруппой* преобразований. Полугруппа, параметризованная действительными числами так, что выполняется условие (1), называется *однопараметрической полугруппой*. Таким образом, изменение некоторой физической системы во времени описывается однопараметрической полугруппой. Мы будем называть ее *динамической полугруппой* системы.

Если каждое U_t является взаимно однозначным отображением S на S, т. е. существует U_t^{-1}, то мы будем писать $U_{-t} = U_t^{-1}$, где I — тождественное преобразование. При этом условие (1) выполняется для всех t_1 и t_2, и мы получаем *однопараметрическую группу*. Мы будем иметь дело главным образом с системами, которые являются *обратимыми* в том смысле, что их динамические полугруппы можно расширить до однопараметрических групп, как указано выше.

Если наша система обратима, то каждое s лежит на одной и только на одной „орбите“; под орбитой понимается множество всех точек $U_t(s)$ при фиксированном s и переменном t. Каждая орбита — некоторая кривая в S. Вообще говоря (мы остановимся на этом подробнее в различных частных случаях), S обладает дополнительной структурой, которая позволяет говорить о „касательных векторах“ к каждой орбите во всех ее точках. Тем самым динамическая группа позволяет приписать каждой точке S некоторый „вектор“, т. е. порождает „векторное поле“ на S. Это векторное поле называется „инфинитезимальной образующей“ соответствующей группы и во многих случаях однозначно определяет группу. Это чрезвычайно важно, поскольку обычно физический закон выражается значительно проще при описании инфинитезимальной образующей группы, чем при описании самой группы. В самом деле, физические законы почти всегда даются в инфинитезимальной форме и, для того чтобы получить орбиты группы, приходится интегрировать дифференциальные уравнения.

В том частном случае, когда S является открытым подмножеством n-мерного евклидова пространства, мы можем выразить приведенные выше соображения в значительно более определенной форме. (Более общие случаи мы рассмотрим позднее.) При этом каждая орбита в S является кривой в n-мерном пространстве, описываемой n функциями от t: $q_1(t), q_2(t), \ldots, q_n(t)$. Здесь

$$(q_1(t), \ldots, q_n(t)) = U_t(q_1(0), \ldots, q_n(0)).$$

Если все производные $q_1'(t), \ldots, q_n'(t)$ существуют, то они служат компонентами касательного вектора к единственной орбите, проходящей через точку $q_1(t), \ldots, q_n(t)$. Мы будем говорить тогда, что U дифференцируема. Обозначим n компонент касательного вектора к орбите в точке $(q_1, \ldots, q_n)$ через

$$A_1^U(q_1, \ldots, q_n), A_2^U(q_1, \ldots, q_n), \ldots, A_n^U(q_1, \ldots, q_n).$$

Тогда каждая орбита $t \to q_1(t), \ldots, q_n(t)$ удовлетворяет системе дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dq_1}{dt} &= A_1^U(q_1, \ldots, q_n), \\ \frac{dq_2}{dt} &= A_2^U(q_1, \ldots, q_n), \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \frac{dq_n}{dt} &= A_n^U(q_1, \ldots, q_n). \end{aligned} \tag{1.2}$$

Если A_j^U являются дифференцируемыми функциями $q_1, \ldots, q_n$, то, согласно классической теореме единственности для дифференциальных уравнений, через заданную точку проходит не более одной кривой, удовлетворяющей системе (2). Таким образом, A_j^U однозначно определяют U. Если A_j^U существуют и дифференцируемы, мы будем говорить, что U дважды дифференцируема. Таким образом, мы имеем естественное взаимно однозначное соответствие между дважды дифференцируемыми однопараметрическими группами на S и *некоторыми* непрерывными векторными полями на S. Мы можем устанавливать физический закон, задавая явным образом функции A_j^U.

Заметим, что не каждое дифференцируемое векторное поле на S является образующей некоторой однопараметрической группы. Теорема существования для дифференциальных уравнений обеспечивает только существование локальных решений; нетрудно построить примеры, в которых глобальное решение (т. е. группа U_t) не существует. Более того, неизвестны никакие простые необходимые и достаточные условия для существования глобальных решений. С другой стороны, из сказанного выше ясно, что векторное поле может определять некоторый обратимый физический закон только в том случае, когда существует именно глобальное решение.

Как мы увидим в дальнейшем, в применении к системам с бесконечным числом степеней свободы изложенные выше соображения приводят к дифференциальным уравнениям в частных производных. В квантовой механике состояние никогда не может быть описано конечным числом координат — даже в том случае, когда для соответствующего классического состояния это может быть сделано. Таким образом, в квантовой механике мы всегда получаем дифференциальное уравнение в частных производных (или систему таких уравнений). Оно называется уравнением Шредингера.

Основная группа $t \to U_t$ играет очень важную роль в теоретических исследованиях, хотя ее редко можно выписать в явном виде.

1.2 Законы механики системы точек

Пусть $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots, x_n, y_n, z_n$ — координаты n точек в некоторой евклидовой системе координат. Быть может, самым основным законом классической механики системы точек является то, что „будущие“ координаты определяются координатами и их производными по времени в некоторый фиксированный момент времени. Таким образом, пространство S всех состояний можно отождествить с некоторым подмножеством $6n$-мерного евклидова пространства. Мы будем предполагать пока, что это подмножество *открыто*; это означает, грубо говоря, что отсутствуют „связи“. Будет удобно обозначить все координаты одинаковыми буквами $q_1, \ldots, q_{3n}$, а соответствующие производные по времени — буквами $v_1, \ldots, v_{3n}$. Предполагая, что динамическая группа U дважды дифференцируема, ее можно получить путем интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\frac{dq_j}{dt} = A_j^0(q_1, \dots, q_{3n}, v_1, \dots, v_{3n}),$$
$$\frac{dv_j}{dt} = A_j(q_1, \dots, q_{3n}, v_1, \dots, v_{3n}).$$

Более того, поскольку по определению $v_j = dq_j/dt$, все функции A_j^0 известны, и мы получаем систему

$$\frac{dq_j}{dt} = v_j,$$
$$\frac{dv_j}{dt} = A_j(q_1, \dots, q_{3n}, v_1, \dots, v_{3n}).$$

Заметим, что именно эта система $6n$ уравнений первого порядка получается из системы $3n$ уравнений второго порядка

$$\frac{d^2 q_j}{dt^2} = A_j\left(q_1, \dots, q_{3n}, \frac{dq_1}{dt}, \dots, \frac{dq_{3n}}{dt}\right)$$

с помощью стандартного приема — замены первых производных вспомогательными переменными. Дальнейшие предположения относительно физических законов будут ограничениями на функции A_j. Мы будем рассматривать только такие системы, относительно которых предполагается следующее:

(1) функции A_j являются функциями только переменных q_k и не зависят от v_k;

(2) существуют такие положительные константы m_j, что

$$\frac{\partial m_j A_j}{\partial q_k} = \frac{\partial m_k A_k}{\partial q_j};$$

(3) величины $m_j A_j$ являются частными производными от некоторой функции $-\mathcal{V}$ [1]).

Ясно, что константы m_j в предположении (2) неоднозначно определяются функциями A_j. Мы можем умножить все m_j на одну и ту же положительную константу, не нарушая равенств (2). С другой стороны, отношения m_j/m_k определены, если соответствующие частные производные не обращаются в нуль. Если мы условимся считать, что $m_j/m_k = 1$ во всех случаях, когда это отношение не определяется из равенств (2), то сразу же увидим, что все величины m_j однозначно определяются, как только одной, из них приписано определенное значение. Выбор одного такого значения — это выбор единицы массы; получающиеся в результате числа m_j называются массами, ассоциированными с соответствующими координатами. На практике оказывается, что $m_{3k+1} = m_{3k+2} = m_{3k+3}$, так что на самом деле массы являются свойствами частиц. Предположение (3) почти следует из (2): в соответствии с известной теоремой дифференциального исчисления $\mathcal{V}$ всегда существуем локально, и во всех случаях, когда S односвязно, можно, соединяя эти локальные $\mathcal{V}$, построить одну глобальную функцию $\mathcal{V}$ на всем S. Если же S не предполагается односвязным, то требование (3) ставится отдельно.

Функция $m_j A_j(q_1, \dots, q_{3n})$ часто обозначается через $F_j(q_1, \dots, q_{3n})$ и называется компонентой силы, отнесенной к j-й координате. Величина $p_j = m_j v_j$ называется компонентой *импульса* (*количества движения*), сопряженной координате q_j [2]). Уравнения движения, записанные через силы и импульсы, принимают следующий вид:

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{p_j}{m_j}, \quad \frac{dp_j}{dt} = F_j(q_1, \dots, q_{3n}),$$

а предположение (3) представляется как $F_j = -\partial\mathcal{V}/\partial q_j$. В этом случае говорят, что силы *консервативны и имеют потенциал* $\mathcal{V}$.

[1]) Как следует из дальнейшего (см. стр. 10, где вводится понятие энергии и функции Гамильтона), при этом предполагается, что $\mathcal{V}$ является функцией только от координат q_i и не зависит явно от времени t.— *Прим. ред.*

[2]) Определение импульса, данное здесь автором ($p_j = mv_j = m\dot{q}_j$), справедливо только в том случае, когда $q_1, \dots, q_n$ образуют декартову систему координат. —*Прим.ред.*

Поскольку v_j и p_j однозначно определяют друг друга, мы можем считать, что состояние нашей системы описывается параметрами q_j и p_j вместо q_i и v_i. Конечно, при этом S становится другим подмножеством $6n$-мерного пространства. Когда S рассматривается как множество всех возможных q_i и p_i, оно называется фазовым пространством. Действительное значение перехода к фазовому пространству станет понятным ниже, когда будет дана трактовка этих вопросов, не зависящая от выбора системы координат.

Под интегралом нашей системы мы будем понимать функцию φ, определенную на фазовом пространстве S и постоянную на каждой орбите U_t. Если φ дифференцируема, то, как нетрудно видеть,

$$\frac{d}{dt}[\varphi(U_t(s))]_{t=0} = \frac{\partial\varphi}{\partial q_1}\frac{dq_1}{dt} + \ldots + \frac{\partial\varphi}{\partial q_{3n}}\frac{dq_{3n}}{dt} + \frac{\partial\varphi}{\partial p_1}\frac{dp_1}{dt} + \ldots + \frac{\partial\varphi}{\partial p_{3n}}\frac{dp_{3n}}{dt} = \\ = \frac{\partial\varphi}{\partial q_1}\frac{p_1}{m_1} + \ldots + \frac{\partial\varphi}{\partial q_{3n}}\frac{p_{3n}}{m_{3n}} - \frac{\partial\varphi}{\partial p_1}\frac{\partial\mathcal{V}}{\partial q_1} - \ldots - \frac{\partial\varphi}{\partial p_{3n}}\frac{\partial\mathcal{V}}{\partial q_{3n}}.$$

Поэтому φ является интегралом в том и только в том случае, когда последнее выражение равно нулю тождественно по всем q и p.

Более общим образом пусть W — любая дважды дифференцируемая однопараметрическая группа, $B_1^W, \ldots, B_{3n}^W$, $C_1^W, \ldots, C_{3n}^W$ — компоненты ее инфинитезимальной образующей; каждое B_i^W и C_j^W — функция всех q и p. Тогда функция φ постоянна на орбитах W в том и только в том случае, когда

$$\frac{\partial\varphi}{\partial q_1}B_1^W + \ldots + \frac{\partial\varphi}{\partial q_{3n}}B_{3n}^W + \frac{\partial\varphi}{\partial p_1}C_1^W + \ldots + \frac{\partial\varphi}{\partial p_{3n}}C_{3n}^W = 0$$

Предположим, что векторное поле, компонентами которого по порядку являются C_j^W и $-B_j^W$ есть множество всех частных производных некоторой функции φ, т. е. предположим, что

$$C_j^W = \frac{\partial\varphi}{\partial q_j};\quad B_j^W = -\frac{\partial\varphi}{\partial p_j}.$$

Из написанного выше тождества сразу следует, что φ будет постоянна на орбитах W. Такие векторные поля играют важную роль в нашей теории. Они называются *инфинитезимальными контактными преобразованиями*. Если инфинитезимальная образующая группы W является инфинитезимальным контактным преобразованием, т. е. если существует такая функция φ, что

$$C_j^W = \frac{\partial\varphi}{\partial q_j},\quad B_j^W = -\frac{\partial\varphi}{\partial p_j},$$

мы говорим, что W является *однопараметрической группой контактных преобразований*. Функция φ однозначно определяет W и сама однозначно определяется группой W с точностью до аддитивной константы. Мы будем называть ее *фундаментальным инвариантом* группы W.

Мы покажем теперь, что наша динамическая группа U является однопараметрической группой контактных преобразований и, следовательно, имеет хотя бы один нетривиальный интеграл. Мы должны найти функцию (которую мы обозначим H), такую что

$$\frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{p_j}{m_j},\quad \frac{\partial H}{\partial q_j} = \frac{\partial\mathcal{V}}{\partial q_j}.$$

Из первой группы равенств мы видим, что H должна иметь вид

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \ldots + \frac{p_{3n}^2}{2m_{3n}} + H_0(q_1, \ldots, q_{3n}),$$

а из второй, что можно положить $H_0 = \mathcal{V}$. Таким образом, функция

$$H(q_1, \ldots, q_{3n}, p_1, \ldots, p_{3n}) = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \ldots + \frac{p_{3n}^2}{2m_{3n}} + \mathcal{V}(q_1, \ldots, q_{3n}) \tag{1.3}$$

постоянна на орбитах U. Она называется *интегралом энергии* или просто *энергией* системы. Тот факт, что она остается постоянной во времени, представляет собой один из аспектов

„закона сохранения энергии“. Используя H, мы можем переписать дифференциальные уравнения движения в так называемой „гамильтоновой“ форме

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}.$$

В этом контексте функция H называется гамильтонианом, или функцией Гамильтона, системы. Мы заметим, что H является суммой двух слагаемых, одно из которых зависит только от координат, а другое — только от скоростей. Эти два слагаемых называются соответственно *потенциальной и кинетической энергией.*

Пусть W — однопараметрическая группа контактных преобразований с фундаментальным инвариантом ψ; посмотрим, при каком условии функция φ будет постоянной на орбитах W. Производя замены в полученной выше формуле, мы приходим к следующему условию:

$$-\frac{\partial\varphi}{\partial q_1}\frac{\partial\psi}{\partial p_1} - \ldots - \frac{\partial\varphi}{\partial q_{3n}}\frac{\partial\psi}{\partial p_{3n}} + \frac{\partial\varphi}{\partial p_1}\frac{\partial\psi}{\partial q_1} + \ldots + \frac{\partial\varphi}{\partial p_{3n}}\frac{\partial\psi}{\partial q_{3n}} = 0. \tag{1.4}$$

Выражение в левой части этого равенства [взятое с обратным знаком. — *Ред.*] называется скобкой Пуассона функций φ и ψ и обозначается $[\varphi, \psi]$. Ясно, что $[\varphi,\psi] = -[\psi,\varphi]$ и, следовательно, $[\varphi,\psi] \equiv 0$ тогда и только тогда, когда $[\psi,\varphi] \equiv 0$. Это означает, что функция φ постоянна на орбитах однопараметрической группы контактных преобразований, определенной функцией ψ, тогда и только тогда, когда ψ постоянна на орбитах однопараметрической группы контактных преобразований, определенной функцией φ. В частном случае, когда $\varphi = H$, мы получаем следующий важный принцип. Пусть ψ — фундаментальный инвариант произвольной однопараметрической группы контактных преобразований W^ψ. Тогда ψ является интегралом нашей динамической системы в том и только в том случае, когда преобразования W^ψ переводят H в себя. Тем самым мы получаем соответствие между интегралами и однопараметрическими группами „симметрий“. Мы скоро увидим, что известные интегралы импульса и момента импульса соответствуют симметриям переноса и вращения пространства.

Предположим теперь, что S для каждого фиксированного набора $q_1, \ldots, q_{3n}$ содержит $q_1, \ldots, q_{3n}, p_1, \ldots, p_{3n}$ для произвольного набора $p_1, \ldots, p_{3n}$. Обозначим через $\mathcal{M}$ открытое множество в E^{3n}, состоящее из всех $q_1, \ldots, q_{3n}$, входящих в S. Пусть $t \to U_t$ — дважды дифференцируемая однопараметрическая группа в $\mathcal{M}$, инфинитезимальной образующей которой служит векторное поле с компонентами $D_1, \ldots, D_{3n}$. Тогда некоторым способом, объяснение которого нам удобнее отложить до следующего раздела, U индуцирует однопараметрическую группу W на S с инфинитезимальной образующей

$$D_1, \ldots, D_{3n}, -\sum_{i=1}^{3n} p_i \frac{\partial D_i}{\partial q_1}, -\sum_{i=1}^{3n} p_i \frac{\partial D_i}{\partial q_2}, \ldots, -\sum_{i=1}^{3n} p_i \frac{\partial D_i}{\partial q_{3n}}.$$

Мы сразу же видим, что W является однопараметрической группой контактных преобразований с фундаментальным инвариантом

$$p_1 D_1(q_1, \ldots, q_{3n}) + \ldots + p_{3n} D_{3n}(q_1, \ldots, q_{3n}).$$

Если U такова, что H остается инвариантной при всех W_t, то функция

$$p_1 D_1(q_1, \ldots, q_{3n}) + \ldots + p_{3n} D_{3n}(q_1, \ldots, q_{3n})$$

будет интегралом, линейным по всем p_i. Такие интегралы, когда они существуют, называются линейными интегралами импульсов [3]).

Важным случаем, когда имеются линейные интегралы импульсов, является система, у которой функция $\mathcal{V}$ зависит только от расстояний между частицами, например движение планет или более общий случай, когда

$$F_i(x_1, y_1, z_1, \ldots, x_n, y_n, z_n) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} G_{ij}(|w_i - w_j|) \frac{w_i - w_j}{|w_i - w_j|}$$

[3]) В подлиннике стоит просто momentum integrals (интегралы импульсов), но, поскольку речь идет о линейной комбинации импульсов, нам представляется более удачным термин „линейные интегралы импульсов“, хотя он и не принят в русской научной литературе. — *Прим. ред.*

где w_i — вектор (x_i, y_i, z_i),

$$|w_i - w_j| = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2},$$

а G_{ij} — некоторые непрерывные функции, определенные на положительной части действительной оси и такие, что $G_{ij} = G_{ji}$. Пусть в этом случае $t \to A_t$ — любая однопараметрическая группа преобразований трехмерного пространства, сохраняющих расстояние. Тогда соответствие

$$x_1, y_1, z_1, \ldots, x_n, y_n, z_n \to A_t(x_1, y_1, z_1), \ldots, A_t(x_n, y_n, z_n)$$

определяет некоторую однопараметрическую группу U на $\mathcal{M}$, для которой соответствующая W на S оставляет H неизменной. В этом можно убедиться, производя соответствующие вычисления; кроме того, это будет непосредственно вытекать из соображений, которые не зависят от выбора системы координат и будут приведены в следующем разделе.

Таким образом, каждой группе $t \to A_t$ мы ставим в соответствие некоторый интеграл, линейный по импульсам p. Если $A_t(x, y, z) = (x + t, y, z)$, то этот интеграл превращается в $p_1 + p_4 + p_7 + \ldots$. Точно так же группа всевозможных переносов в направлении y приводит к интегралу $p_2 + p_5 + p_8 + \ldots$, а группа переносов в направлении z — к интегралу $p_3 + p_6 + p_9 + \ldots$. Эти три интеграла называются компонентами (соответственно по осям x, y и z) импульса системы. Тот факт, что они являются интегралами, составляет содержание закона сохранения импульса. Рассматривая переносы по другим направлениям, можно получить другие интегралы, но они не дают ничего существенно нового. Все они являются линейными комбинациями с постоянными коэффициентами трех уже описанных интегралов.

Рассмотрим теперь группу

$$(x, y, z) \to (x \cos t + y \sin t, -x \sin t + y \cos t, z)$$

всех вращений относительно оси z. Она приводит к интегралу

$$\sum_{j=1}^{n} (p_{3j-2}\, q_{3j-1} - q_{3j-2}\, p_{3j-1}),$$

называемому моментом импульса относительно оси z. Аналогично определяются моменты импульса относительно осей x и y. Моменты импульса относительно осей, имеющих другие направления и проходящих через точки, отличные от $(0, 0, 0)$, также являются интегралами, но все они просто выражаются через шесть уже полученных. Мы подчеркиваем эти теоретико-групповые определения импульса и момента импульса, поскольку именно эти определения допускают наиболее естественное обобщение в квантовой механике.

Отображение

$$(q_1, \ldots, q_{3n}, p_1, \ldots, p_{3n}) \to \left(q_1, \ldots, q_{3n}, \frac{p_1}{m_1}, \ldots, \frac{p_{3n}}{m_{3n}}\right)$$

устанавливает взаимно однозначное соответствие между фазовым пространством S, рассматриваемым как множество всевозможных значений q и p, и первоначально выбранным пространством S' всевозможных значений q и v. Это отображение переводит функцию H на S в функцию H' на S', где

$$H'(q_1, \ldots, q_{3n}, v_1, \ldots, v_{3n}) = \frac{m_1 v_1^2}{2} + \ldots + \frac{m_{3n} v_{3n}^2}{2} + \mathcal{V}(q_1, \ldots, q_{3n}).$$

Уравнения движения, выраженные через H', имеют вид

$$\frac{dq_i}{dt} = v_i, \quad \frac{dv_i}{dt} = -\frac{\partial H'}{\partial q_i}\,\frac{1}{m_i}.$$

Далее,

$$v_i = \frac{\partial H'}{\partial v_i}\,\frac{1}{m_i},$$

поэтому мы можем переписать их так:

$$\frac{dq_i}{dt} = v_i, \quad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial H'}{\partial v_i}\right) = -\frac{\partial H'}{\partial q_i}.$$

Наконец, полагая

$$\mathcal{L}(q_1, \ldots, q_{3n}, v_1, \ldots, v_{3n}) = \frac{m_1 v_1^2}{2} + \ldots + \frac{m_{3n} v_{3n}^2}{2} - \mathcal{V}(q_1, \ldots, q_{3n}),$$

мы получаем

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_i}\right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}, \quad \frac{dq_i}{dt} = v_i,$$

или, в общепринятой, более краткой форме,

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}\right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}.$$

Уравнения движения, записанные в таком виде, называют *уравнениями в форме Лагранжа, а* $\mathcal{L}$ *— лагранжианом* или *функцией Лагранжа* системы. Уравнения Лагранжа интересны тем, что они являются в точности уравнениями Эйлера для некоторой определенной задачи вариационного исчисления. Поэтому функция $\mathcal{L}$ определяет орбиты группы U_t некоторым внутренним образом, не зависящим от особенностей выбранной системы координат.

Действительно, пусть $\mathcal{L}$ — произвольная подходящая дифференцируемая функция, определенная на S'; предположим также, что S' для каждого набора $(q_1, \ldots, q_{3n})$ содержит точки $(q_1, \ldots, q_{3n}, v_1, \ldots, v_{3n})$ для всевозможных наборов $(v_1, \ldots, v_{3n})$. Пусть $\mathcal{M}$ — множество наборов $q_1, \ldots, q_{3n}$, соответствующих точкам S'. Пусть, далее, q' и q'' — две точки в $\mathcal{M}$, и $q_1(t), \ldots, q_{3n}(t)$ — дифференцируемые функции, определенные на отрезке $[0,1]$ и такие, что кривая $q_1(t), \ldots, q_{3n}(t)$ целиком лежит в $\mathcal{M}$, причем $(q_i(0)) = q'_i$ и $(q_i(1)) = q''_i$. Тогда набор $(q_1(t), \ldots, q_{3n}(t), \dot{q}_1(t), \ldots, \dot{q}_{3n}(t))$ можно подставить в функцию $\mathcal{L}$ и проинтегрировать полученное выражение по t от 0 до 1. Тем самым каждой кривой C в $\mathcal{M}$, соединяющей q' с q'', мы ставим в соответствие некоторое число $I(C)$.

Мы ищем условия, которым должны удовлетворять функции $q_i(t)$, чтобы соответствующая кривая C давала функционалу $I(C)$ „стационарное" значение. Более точно, если $\eta_i(t)$ таково, что $\eta_i(0) = \eta_i(1) = 0$, то $q_i(t) + \varepsilon\eta_i(t) = C^{\eta}_{\varepsilon}$ будет „допустимой кривой" для любого (достаточно малого) ε; мы говорим, что C дает стационарное значение $I(C)$, если

$$\left.\frac{d}{d\varepsilon} I(C^{\eta}_{\varepsilon})\right|_{\varepsilon=0} = 0$$

для каждой функции η. Несложное рассуждение, которое читатель может найти в любом учебнике вариационного исчисления, показывает, что кривая, определенная функциями $q_i(t)$, дает стационарное значение I тогда и только когда, когда $q_i(t)$ удовлетворяют дифференциальным уравнениям

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}\big(q_1(t), \ldots, q_{3n}(t), \dot{q}_1(t), \ldots, \dot{q}_{3n}(t)\big)\right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}\big(q_1(t), \ldots, q_{3n}(t), \dot{q}_1(t), \ldots, \dot{q}_{3n}(t)\big).$$

Когда $\mathcal{L}$ — лагранжиан нашей системы, это в точности уравнения Лагранжа. Тот факт, что на орбитах группы U_t указанный интеграл принимает стационарное значение, известен как *принцип Гамильтона*.

1.3 Обобщенные координаты и дифференцируемые многообразия

Иногда бывает удобно перейти к новой системе координат, в которой координаты не только не являются прямоугольными, но могут произвольным образом зависеть от прямоугольных координат нескольких различных частиц. Более того, рассматривая системы, в которых имеются „связи", удобно уменьшить число координат, оставив только те, которые могут изменяться независимо от остальных, а это, вообще говоря, можно сделать только локально. Например, если $\mathcal{M}$ — поверхность сферы, то нельзя найти две непрерывные функции f и g, которые давали бы взаимно однозначное отображение $q \to (f(q), g(q))$ поверхности $\mathcal{M}$ на некоторое подмножество плоскости. Наконец, представляя результаты в форме, не зависящей от выбора системы координат, нередко можно глубже проникнуть в суть дела. Таковы причины, побудившие нас дать здесь более абстрактное обобщение материала, разобранного в разд. 1.1 и 1.2.

Для того, чтобы оправдать определения, которые будут даны ниже, мы начнем с доказательства теоремы, характеризующей вектор в E^n с помощью частных производных, которые он определяет. Пусть $\mathcal{O}$ — открытое подмножество пространства E^n; обозначим через $\mathcal{E}_{\mathcal{O}}$ множество всех действительных функций, которые определены на $\mathcal{O}$ и принадлежат классу C^∞, т. е. имеют непрерывные частные производные всех порядков. Множество ее является к о л ь ц о м функций в том смысле, что оно замкнуто относительно операций сложения и умножения. Для каждой $f \in \mathcal{E}_{\mathcal{O}}$, каждого $a = (a_1, \ldots, a_n) \in \mathcal{O}$ и каждого $v = (v_1, \ldots, v_n) \in E^n$ рассмотрим действительную функцию на прямой $t \to f(a + tv)$. Она определена для всех достаточно малых t и также принадлежит классу C^∞. Мы определяем $f_v(a)$ как

$$\frac{d}{dt} f(a+tv)\bigg|_{t=0} = \lim_{t \to 0} \frac{f(a+tv) - f(a)}{t}.$$

Заметим, что если $v = (1, 0, \ldots, 0)$, то $f_v(a) = \dfrac{\partial f}{\partial x_1}(a_1, \ldots, a_n)$; аналогичные результаты имеют место для остальных частных производных. Вообще

$$f_v(a) = v_1 \frac{\partial f}{\partial x_1}(a_1, \ldots, a_n) + v_2 \frac{\partial f}{\partial x_2}(a_1, \ldots, a_n) + \ldots + v_n \frac{\partial f}{\partial x_n}(a_1, \ldots, a_n).$$

Таким образом, $f_v(a)$ всегда представляет собой конечную линейную комбинацию частных производных первого порядка от функции f в точке a. Поскольку $f_{\lambda v}(a) = \lambda f_v(a)$, величина $f_v(a)$ имеет следующую геометрическую интерпретацию: $f_v(a)$ есть длина вектора v, умноженная на производную функции f по направлению v. Фиксируя a и v, рассмотрим функционал $l^{a,v}$, переводящий функцию $f \in \mathcal{E}_{\mathcal{O}}$ в число $f_v(a)$. Нетрудно убедиться в том, что $l^{a,v}$ обладает следующими формальными свойствами:

$$\text{(a)} \qquad l^{a,v}(f + \mathrm{g}) = l^{a,v}(f) + l^{a,v}(\mathrm{g});$$
$$\text{(b)} \qquad l^{a,v}(f\,\mathrm{g}) = f(a)\, l^{a,v}(\mathrm{g}) + \mathrm{g}(a)\, l^{a,v}(f);$$
$$\text{(c)} \qquad l^{a,v}(f) = 0, \text{ если } f \text{ постоянна.}$$

Кроме того, если $l^{a,v}(f) = l^{a,w}(f)$ для всех f, то $v = w$. Таким образом, отображение $v \to l^{a,v}$ является взаимно однозначным, т. е. вектор v полностью описывается функционалом $l^{a,v}$. Мы покажем сейчас, что каждый функционал, обладающий свойствами (a), (b) и (c), соответствует некоторому вектору.

Т е о р е м а. *Пусть a — некоторая точка $\mathcal{O}$, и l — функционал, сопоставляющий каждой функции $f \in \mathcal{E}_{\mathcal{O}}$ некоторое число $l(f)$ так что*

$$\left.\begin{array}{ll} \text{(i)} & l(f+\mathrm{g}) = l(f) + l(\mathrm{g}), \\ \text{(ii)} & l(f\mathrm{g}) = f(a)\, l(\mathrm{g}) + \mathrm{g}(a)\, l(f) \end{array}\right\} \text{ для всех } f \text{ и } \mathrm{g} \text{ из } \mathcal{E}_{\mathcal{O}};$$
$$\text{(iii)} \quad l(f) = 0, \qquad \text{если } f \text{ постоянна}$$

Тогда существует единственный вектор v, такой что $l(f) = f_v(a)$ для всех $f \in \mathcal{E}_{\mathcal{O}}$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Прежде всего заметим, что из (ii) и (iii) следует, что $l(\lambda f) = \lambda\, l(f)$, если λ — произвольная константа. Предположим теперь, что $\mathcal{O}$ не только открыто, но и выпукло. Для заданных $f \in \mathcal{E}_{\mathcal{O}}$ и $x \in \mathcal{O}$ положим $\varphi(t) = f(a + t(x-a))$; тогда

$$f(x) - f(a) = \varphi(1) - \varphi(0) = \int_0^1 \varphi'(t)\, dt = \int_0^1 \sum_{j=1}^n (x_j - a_j) f_j(a + t(x-a))\, dt,$$

где через f_j обозначена частная производная f по j-й переменной. Пусть

$$A_j(x_1, \ldots, x_n) = \int_0^1 f_j(a + t(x-a))\, dt;$$

тогда, как нетрудно видеть, A_j принадлежит $\mathcal{E}_{\mathcal{O}}$, и имеет место тождество

$$f(x_1, \ldots, x_n) = f(a_1, \ldots, a_n) + \sum_{j=1}^n (x_j - a_j)\, A_j(x_1, \ldots, x_n).$$

Применяя то же самое рассуждение к каждой функции A_j, получаем

$$A_j(x_1, \ldots, x_n) = c_j + \sum_{i=1}^{n} (x_i - a_i)\, A_{ij}(x_1, \ldots, x_n),$$

где $c_j = A_j(a) = f_j(a)$. Подстановка этих выражений в предыдущее тождество дает новое тождество:

$$f(x_1, \ldots, x_n) \equiv f(a_1, \ldots, a_n) + \sum c_j(x_j - a_j) + \sum (x_i - a_i)(x_j - a_j)\, A_{ij}(x_1, \ldots, x_n);$$

таким образом, $l(f) = 0 + \sum c_j l(x_j) + 0$. Последний член равен нулю, поскольку он представляет собой сумму нескольких членов, в каждом из которых *два* сомножителя обращаются в нуль в точке a:

$$l(h_1 h_2 h_3) = h_1(a)\, l(h_2 h_3) + h_2(a)\, h_3(a)\, l(h_1) = 0,$$

если $h_1(a) = h_2(a) = 0$. Положим $v_j = l(x_j)$, тогда $l(f) = \sum v_j f_j(a) = l^{a,v}(f)$.

Теперь предположим, что $\mathcal{O}$ не обязательно выпукло. Заметим, что если $f = 0$ в некотором открытом множестве вокруг точки a, то $l(f) = 0$. Действительно, мы всегда можем выбрать $\mathrm{g} \in \mathcal{E}_{\mathcal{O}}$ так, чтобы $\mathrm{g}(a) = 1$ и $\mathrm{g}(x) = 0$ вне множества, где $f(x) = 0$. Таким образом, $f\mathrm{g} = 0$, т. е.

$$0 = l(f\mathrm{g}) = f(a)\, l(\mathrm{g}) + \mathrm{g}(a)\, l(f) = 0 + l(f) = l(f).$$

Следовательно, если f_1 и f_2 совпадают в окрестности a, то $l(f_1) = l(f_2)$. Теперь выберем открытое выпуклое множество $\mathcal{O}'$ так, чтобы $a \in \mathcal{O}' \subseteq \mathcal{O}$. Для любой функции f из $\mathcal{E}_{\mathcal{O}'}$ выберем $\mathrm{g} \in \mathcal{E}_{\mathcal{O}}$ так, чтобы $f(x) = \mathrm{g}(x)$ в некоторой окрестности точки a. Если g_1 и g_2 — две такие функции, то, как доказано выше, $l(\mathrm{g}_1) = l(\mathrm{g}_2)$. Следовательно, $l(\mathrm{g})$ не зависит от выбора g, а зависит только от f. Обозначим этот функционал через $\bar{l}(f)$. Ясно, что для $\bar{l}$ выполняются свойства (i)–(iii) и, поскольку $\mathcal{O}'$ выпукло, существует такой вектор v, что $\bar{l}(f) = l^{a,v}(f)$ для всех $f \in \mathcal{E}_{\mathcal{O}'}$. Но если $f \in \mathcal{E}_{\mathcal{O}}$, то $l(f) = \bar{l}(\mathrm{g})$ для некоторой функции g из $\mathcal{E}_{\mathcal{O}'}$, которая совпадает с f в некоторой окрестности точки a. Поэтому $l(f) = l^{a,v}(\mathrm{g}) = l^{a,v}(f)$, и доказательство закончено.

Пусть теперь S — произвольное множество, а $\mathcal{E}$ — кольцо действительных функций, определенных на всем S, причем для любых двух различных точек p и q из S существует функция $f \in \mathcal{E}$, такая что $f(p) \neq f(q)$. Множество S становится хаусдорфовым пространством [4]) (а на самом деле даже вполне регулярным пространством), если считать открытыми те множества $\mathcal{O} \subseteq S$, у которых для каждой точки $q \in \mathcal{O}$ существуют функции $f_1, \ldots, f_n \in \mathcal{E}$ и $\varepsilon > 0$, такие, что из неравенств $|f_i(p) - f_i(q)| < \varepsilon$, $i = 1, 2, \ldots, n$, следует, что $p \in \mathcal{O}$. В этой топологии все функции из $\mathcal{E}$ непрерывны, и ее можно определить эквивалентным образом как слабейшую из топологий, при которых сохраняется это свойство. Мы будем говорить что некоторая действительная функция f *локально* принадлежит $\mathcal{E}$, если каждая точка q, в которой функция f определена, содержится в таком открытом множестве $\mathcal{O}$, что f определена всюду на $\mathcal{O}$ и совпадает там с некоторой функцией из $\mathcal{E}$. Мы будем говорить, что $\mathcal{E}$ превращает S в *многообразие класса* C^∞, если выполняются следующие два дополнительных условия:

(a) любая функция, определенная всюду на S и локально принадлежащая $\mathcal{E}$, действительно принадлежит $\mathcal{E}$;

---

[4]) Подмножество $\mathcal{O}$ евклидова пространства называется открытым, если для любой точки $P \in \mathcal{O}$ существует такое положительное число ε, что все точки P', расстояние которых до точки P меньше ε, принадлежат множеству $\mathcal{O}$. Нетрудно проверить, что открытые множества обладают следующими свойствами:

1) объединение любой совокупности открытых множеств открыто;

2) пересечение любых двух открытых множеств открыто;

3) если P_1 и P_2 — различные точки, то существуют непересекающиеся открытые множества $\mathcal{O}_1$ и $\mathcal{O}_2$, такие что $P_1 \in \mathcal{O}_1$ и $P_2 \in \mathcal{O}_2$.

Понятие хаусдорфова топологического пространства получается, если принять эти свойства за аксиомы. Пусть S — произвольное множество, и $\mathcal{F}$ — некоторое семейство его подмножеств. Элементы $\mathcal{F}$ мы будем называть открытыми множествами. Если для этого семейства множеств выполняются перечисленные выше свойства 1, 2, 3, то мы будем говорить, что S является хаусдорфовым пространством (в топологии, которая задается семейством $\mathcal{F}$).

(b) для любой точки $q \in S$ существует некоторое открытое множество $\mathcal{O}$, $q \in \mathcal{O} \subseteq S$, и некоторое взаимно однозначное и взаимно непрерывное отображение θ открытого подмножества G n-мерного евклидова пространства E^n на $\mathcal{O}$, такие, что функция f, определенная на $\mathcal{O}$, локально принадлежит $\mathcal{E}$ тогда и только тогда, когда $f \circ \theta$ является бесконечно дифференцируемой на G.

Пусть $x_1, \ldots, x_n$ — функции, определенные на открытом подмножестве $\mathcal{O} \subseteq S$; обозначим через Φ отображение $p \to (x_1(p), \ldots, x_n(p))$. Если Φ устанавливает взаимно однозначное соответствие между $\mathcal{O}$ и некоторым открытым подмножеством G пространства E^n, и Φ^{-1} обладает свойствами, описанными в пункте (b), мы будем говорить, что $x_1, \ldots, x_n$ *образуют систему координат* для $\mathcal{O}$ и *локальную систему координат* для каждой точки q из $\mathcal{O}$. Ясно, что функции, образующие систему координат, локально принадлежат $\mathcal{E}$. Более того, из (b) следует, что каждая точка $q \in S$ имеет локальную систему координат, т. е. лежит в некотором открытом множестве, имеющем систему координат. Нетрудно доказать, что каждая точка имеет локальную систему координат, целиком состоящую из ограничений на подходящее открытое множество нескольких функций из $\mathcal{E}$. Конечно, функции из $\mathcal{E}$ обычно не образуют системы координат для всего S.

Можно представлять себе многообразие класса C^∞ как результат соединения нескольких открытых подмножеств евклидова пространства; это соединение произведено таким образом, чтобы сохранилось понятие бесконечно дифференцируемой функции (функции класса C^∞). Мы будем в дальнейшем говорить о функциях из $\mathcal{E}$ как о функциях класса C^∞ на S, а о функциях, локально принадлежащих $\mathcal{E}$ — как о функциях, которые бесконечно дифференцируемы в своей области определения.

Если S связно, то, как нетрудно видеть, каждая точка имеет локальную систему координат с тем же самым числом координат, что и любая другая точка; мы будем называть это число *размерностью* S. Представляется удобным принять это предположение и, начиная с этого момента, считать, что S имеет размерность n.

Пусть S — произвольное многообразие класса C^∞, и $\mathcal{E}$ — кольцо всех функций класса C^∞ на S. Под (касательным) *вектором* в точке $q \in S$ мы будем понимать произвольную действительную функцию v на $\mathcal{E}$, удовлетворяющую условиям

$$\text{(a)} \qquad v(f) + v(g) = v(f + g),$$
$$\text{(b)} \qquad v(fg) = g(q)\, v(f) + f(q)\, v(g),$$
$$\text{(c)} \qquad v(c) = 0,$$

если f и g принадлежат $\mathcal{E}$, а c — произвольная константа. Мы будем часто обозначать $v(f)$ через $f_v(q)$ и называть его частной производной функции f в точке q, определяемой вектором v. Ясно, что множество всех касательных векторов в точке q образует векторное пространство над полем действительных чисел. Мы будем называть его *касательным пространством* в точке q и обозначать V_q.

Пусть $x_1, \ldots, x_n$ — система координат для открытого множества $\mathcal{O}$, содержащего q. Тогда для любой функции $f \in \mathcal{E}$ существует бесконечно дифференцируемая функция $\tilde{f}$, определенная на некоторой открытой окрестности $(x_1(q), \ldots, x_n(q))$, такая что $f(p) = \tilde{f}(x_1(p), \ldots, x_n(p))$ для всех $p \in \mathcal{O}$. Мы можем образовать производные $\dfrac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j}(x_1(q), \ldots, x_n(q))$ и будем обозначать их через $\left.\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\right|_q, \ldots, \left.\dfrac{\partial f}{\partial x_n}\right|_q$. Из доказанной выше теоремы непосредственно следует, что для каждого f функция $f \to \left.\dfrac{\partial f}{\partial x_j}\right|_q$ принадлежит V_q, и что эти n элементов пространства V_q образуют в нем базис.

Таким образом, мы видим, что для n-мерного многообразия класса C^∞ каждое V_q является n-мерным векторным пространством, и каждая локальная система координат для точки q определяет некоторый базис в пространстве V_q. Проще говоря, как только в открытом множестве $\mathcal{O}$ введена система координат, мы можем отождествить его с открытым подмножеством E^n, при этом наиболее общий касательный вектор в точке $q = (q_1, \ldots, q_n)$ имеет вид

$$f \to \left(c_1 \left.\frac{\partial f}{\partial x_1}\right|_q, \ldots, c_n \left.\frac{\partial f}{\partial x_n}\right|_q \right).$$

Под *контравариантным векторным полем* L на S мы будем понимать сопоставление каждой точке $q \in S$ некоторого элемента из $V_q : q \to L_q \in V_q$. Если L — контравариантное векторное поле, и f — бесконечно дифференцируемая функция, то мы можем определить новую функцию $L(f)$, заставляя L_q действовать на f при каждом q. Другими словами, $L(f)(q) \equiv L_q(f)$. Если $L(f)$ — функция класса C^∞ для всех f, то мы будем говорить, что L — *контравариантное векторное поле класса* C^∞.

Пусть $\mathcal{O}$ — открытое множество, в котором имеется система координат $(x_1, \ldots, x_n)$. Тогда каждое контравариантное векторное поле L описывается в $\mathcal{O}$ своими компонентами относительно базисов в V_q, определенных координатами $x_1, \ldots, x_n$. Мы имеем

$$L = A_1(x_1, \ldots, x_n)\,\frac{\partial}{\partial x_1} + \ldots + A_n(x_1, \ldots, x_n)\,\frac{\partial}{\partial x_n},$$

и

$$L(f) = A_1(x_1, \ldots, x_n)\,\frac{\partial f}{\partial x_1} + \ldots + A_n(x_1, \ldots, x_n)\,\frac{\partial f}{\partial x_n}.$$

Легко видеть, что L будет бесконечно дифференцируемым тогда и только тогда, когда A_j будут бесконечно дифференцируемыми для всех локальных систем координат.

Каждое векторное поле класса C^∞ отображает $\mathcal{E}$ в $\mathcal{E}$ так, что выполняются следующие тождества:

$$\begin{array}{ll} \text{(a)} & L(f+\mathrm{g}) = L(f) + L(\mathrm{g}), \\ \text{(b)} & L(f\mathrm{g}) = f\,L(\mathrm{g}) + \mathrm{g}\,L(f), \\ \text{(c)} & L(c) = 0 \end{array}$$

для всех f и g из $\mathcal{E}$ и всех констант c. Другими словами, L определяет некоторое *дифференцирование* в кольце $\mathcal{E}$. Обратно, пусть D — любое дифференцирование в $\mathcal{E}$, т. е. отображение $\mathcal{E}$ в $\mathcal{E}$, удовлетворяющее условиям (a), (b) и (c). Для каждого $q \in S$ положим $L_q(f) = D(f)(q)$. Мы немедленно убеждаемся, что L_q принадлежит V_q, и что, соответственно, $q \to L_q$ представляет собой контравариантное векторное поле класса C^∞, такое что $L(f) \equiv D(f)$. Таким образом, контравариантное векторное поле класса C^∞ можно одновременно рассматривать как определенного вида отображение $\mathcal{E}$ в $\mathcal{E}$.

Если L и M — контравариантные векторные поля класса C^∞, то мы можем положить по определению $(L+M)_q = L_q + M_q$, и тогда $L+M$ снова будет таким же векторным полем. Аналогичным образом мы можем умножить контравариантное векторное поле класса C^∞ на функцию f класса C^∞ и получим контравариантное векторное поле fL. Можно также определить „произведение“ L и M, что уже менее очевидно. Для заданных L и M мы полагаем $[L, M](f) = L(M(f)) - M(L(f))$ для всех $f \in \mathcal{E}$. Ясно, что $[L, M]$ обладает свойствами (a) и (c), указанными выше; непосредственные вычисления показывают, что (b) также выполняется. Таким образом, $[L, M]$ снова является контравариантным векторным полем класса C^∞. „Умножение“, определенное таким образом, дистрибутивно относительно сложения и „антикоммутативно“ в том смысле, что $[L, M] = -[M, L]$. Оно, конечно, не ассоциативно. Вместо этого оно удовлетворяет так называемому тождеству Якоби [5])

$$[[L, M], N] + [[N, L], M] + [[M, N], L] = 0.$$

Итак, множество контравариантных векторных полей класса C^∞ образует то, что обычно называют *алгеброй Ли.*

Пусть V_q^* для каждого $q \in S$ обозначает пространство, сопряженное к V_q, т. е. пространство всех линейных функционалов на V_q. Мы предоставляем читателю убедиться в том, что, хотя V_q и V_q^* всегда имеют одинаковую размерность и, следовательно, изоморфны, между ними нет никакого „естественного“ изоморфизма. Правда, каждый базис $v_1, \ldots, v_n$ в V_q естественным образом определяет некоторый двойственный базис $l_1, \ldots, l_n$ в V_q^*; а именно, l_k — единственный линейный функционал, для которого $l_k(v_j) = \delta_j^k$. Далее, если заданы $v_1, \ldots, v_n$ и, следовательно, $l_1, \ldots, l_n$, то мы можем построить некоторый изоморфизм

$$c_1 v_1 + \ldots + c_n v_n \to c_1 l_1 + \ldots + c_n l_n$$

[5]) Это тождество называют также тождеством Пуассона.— *Прим. ред.*

V_q на V_q^*, однако этот изоморфизм зависит, вообще говоря, от выбора базиса. Только в том случае, когда мы имеем внутреннее произведение в V_q и ограничиваемся ортогональными базисами, мы получаем единственный изоморфизм. Таким образом, при использовании произвольных координат, которые мы сейчас рассматриваем, необходимо проводить тщательное разграничение между элементами V_q и элементами V_q^*. Под *ковариантным векторным полем* W на S мы будем понимать сопоставление $q \to W_q$ каждой точке $q \in S$ некоторого элемента V_q^*. Если W — ковариантное векторное поле, и L — контравариантное векторное поле, то можно для всех q образовать $W_q(L_q)$ и получить, таким образом, действительную функцию $W(L)$, определенную на S. Если $W(L) \in \mathcal{E}$ для любого контравариантного векторного поля L класса C^∞, то мы будем говорить, что W — ковариантное векторное поле класса C^∞.

Пусть $f \in \mathcal{E}$. Тогда для каждого $q \in S$ и каждого $v \in V_q$ можно образовать $f_v(q)$. При фиксированном q и переменном v это линейный функционал, т. е. существует единственный элемент $l_q \in V_q^*$, такой, что $f_v(q) = l_q(v)$ для всех $v \in V_q$. Этот линейный функционал называется *дифференциалом* f *в точке* q и обозначается через $(df)_q$. Ковариантное векторное поле класса C^∞, получающееся при сопоставлении $(df)_q$ каждой точке $q \in S$, мы будем обозначать просто df и называть *дифференциалом* f. Тот факт, что df принадлежит классу C^∞, непосредственно следует из очевидного тождества $df(L) = L(f)$.

Предположим, что $(x_1, \ldots, x_n)$ — система координат для некоторого открытого множества $\mathcal{O}$ в S. Тогда для каждого q из $\mathcal{O}$ $((dx_1)_q, \ldots, (dx_n)_q)$ — некоторый базис к естественному базису в V_q, определенному системой координат $(x_1, \ldots, x_n)$. Это следует из того, что $\partial x_i/\partial x_j = \delta^i_j$. Непосредственно видно, что компонентами df относительно этого естественного базиса в V_q^*, являются $\partial f/\partial x_1, \ldots, \partial f/\partial x_n$. Таким образом, (ковариантное) векторное поле df есть как раз то, что физики называют градиентом (grad$f$). Поскольку $(dx_1, \ldots, dx_n)$ представляет собой базис для всех $q \in \mathcal{O}$, наиболее общее ковариантное векторное поле W класса C^∞ имеет в $\mathcal{O}$ вид $a_1\, dx_1 + \ldots + a_n\, dx_n$, где $a_1, \ldots, a_n$ — подходящие функции класса C^∞. Таким образом, самое общее ковариантное векторное поле класса C^∞, выраженное в локальных координатах, представляет собой просто формальный дифференциал. Отсюда и из известных теорем анализа непосредственно следует, что не каждое ковариантное векторное поле класса C^∞ можно представить в форме df. Те дифференциалы, для которых это возможно, называются *точными*.

Пусть V — произвольное конечномерное действительное векторное пространство. Под n раз ковариантным и m раз контравариантным тензором над V мы будем понимать действительную функцию F от $n + m$ аргументов, из которых первые n принадлежат пространству V, а последние m — пространству V^*, линейную по каждому аргументу отдельно. Например, любой элемент V^* является тензором ковариантного порядка 1 (1 раз ковариантным тензором), а элементы V можно рассматривать как элементы V^{**} и, следовательно, как тензоры контравариантного порядка 1. „Внутренним произведением“ в V называется тензор ковариантного порядка 2, обладающий дополнительными свойствами симметрии и положительной определенности.

Пусть F — произвольный тензор ковариантного порядка 2. Тогда для каждого фиксированного $v_0 \in V$ $F(v_0, v)$ как линейный функционал от v принадлежит V^*. Тем самым определено линейное отображение $\tilde{F}$ пространства V в V^*, такое, что $F(v_0, v) \equiv \tilde{F}(v_0)(v)$. Обратно, каждое линейное отображение V в V^* можно получить таким способом из некоторого тензора ковариантного порядка 2. Если $\tilde{F}$ взаимно однозначно, то мы говорим, что F невырожден. В том случае, когда F невырожден, мы можем образовать $\tilde{F}^{-1}$, которое получается аналогичным образом из некоторого тензора контравариантого порядка 2.

Под *тензорным полем* T ковариантного порядка n и контравариантного порядка m на многообразии $(S, \mathcal{E})$ класса C^∞ мы будем понимать сопоставление каждой точке q из S некоторого тензора T_q над векторным пространством V_q. Если $L_1, \ldots, L_n$ — контравариантные векторные поля, и $W_1, \ldots, W_m$ — ковариантные векторные поля, то мы можем задать функцию

$$T(L_1, \ldots, L_n, W_1, \ldots, W_m),$$

положив

$$T(L_1, \ldots, L_n, W_1, \ldots, W_m)(q) = T(v_1, \ldots, v_n, l_1, \ldots, l_m),$$

где

$$v_j = (L_j)_q \text{ и } l_k = (W_k)_q.$$

Если
$$T(L_1, \ldots, L_n, W_1, \ldots, W_m)$$
— функция класса C^∞ для любых L_j и W_k класса C^∞, то мы будем говорить, что T — тензорное поле класса C^∞. Ясно, что

$$\begin{aligned}T(f\,L_1' + \mathrm{g}\,L_1'', L_2, \ldots, L_n, W_1, \ldots, W_m) = \\ = f\,T(L_1', L_2, \ldots, L_n, W_1, \ldots, W_m) + \mathrm{g}\,T(L_1'', \ldots, L_n, W_1, \ldots, W_m)\end{aligned}$$

для всех f и g из $\mathcal{E}$ и всех L_j и W_k, и что аналогичное тождество имеет место для каждого из остальных аргументов; другими словами, функция T линейна над $\mathcal{E}$ по каждому аргументу. Обратно, пусть T' — любая функция $n+m$ аргументов со значениями в $\mathcal{E}$, у которой первые n аргументов — контравариантные векторные поля класса C^∞, а последние m аргументов — ковариантные векторные поля класса C^∞. Мы предоставляем читателю убедиться в том, что если T' линейна над $\mathcal{E}$ по каждому аргументу, то она порождается, как показано выше, некоторым однозначно определенным тензорным полем T' класса C^∞.

Если T — тензорное поле ковариантного порядка n и контравариантного порядка m, а $q_1, \ldots, q_k$ — система координат для открытого множества $\mathcal{O} \subset S$, то $q_1, \ldots, q_k$ определяют базис $\varphi_1^q, \ldots, \varphi_k^q$ в каждом V_q и двойственный базис $l_1^q, \ldots, l_k^q$ в каждом V_q^*; значения T при этом определяются его значениями

$$A_{i_1,\ldots,i_n}^{j_1,\ldots,j_m}(q) = T(\varphi_{i_1}^q, \ldots, \varphi_{i_n}^q, l_{j_1}^q, \ldots, l_{j_m}^q)$$

на элементах этих базисов. Поэтому тензорное поле T можно описать (на множестве $\mathcal{O}$), указав значения его компонент $A_{i_1,\ldots,i_n}^{j_1,\ldots,j_m}$ при каждом q. Тензоры часто определяются именно таким образом.

Мы будем интересоваться главным образом ковариантными тензорами второго порядка, для которых отображение V_q в V_q^*, определяемое T_q, невырождено. С помощью таких тензоров можно преобразовывать ковариантное векторное поле в контравариантное и обратно. В частном случае, когда $T(L, M) = T(M, L)$ и $T(L, L) > 0$ при $L_q \neq 0$, T называется *римановой метрикой*.

Пусть W — некоторое ковариантное векторное поле на S класса C^∞. Для каждой пары L, M контравариантных векторных полей класса C^∞ мы определим функцию $\widetilde{W}(L, M)$ класса C^∞:
$$\widetilde{W}(L, M) = L(W(M)) - M(W(L)) - W([L, M]).$$
Очевидно, что $\widetilde{W}(L, M) = -\widetilde{W}(M, L)$, и почти также очевидно, что

$$\widetilde{W}(L_1 + L_2, M) = \widetilde{W}(L_1, M) + \widetilde{W}(L_2, M).$$

Мы покажем, что для всех $\theta \in \mathcal{E}$ $\widetilde{W}(\theta L, M) = \theta\widetilde{W}(L, M)$ и, следовательно, что W линейна над $\mathcal{E}$ по каждому переменному. Заметим сначала, что

$$\begin{aligned}\theta L(W(M)) - M(W(\theta L)) = \theta L(W(M)) - M(\theta W(L)) = \\ = \theta L(W(M)) - M(\theta)W(L) - \theta M(W(L)) = \theta\{L(W(M)) - M(W(L))\} - M(\theta)W(L).\end{aligned}$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned}[\theta L, M](f) = \theta L(M(f)) - M(\theta L(f)) = \theta L(M(f)) - M(\theta)L(f) - \theta M(L(f)) = \\ = \{\theta[L, M] - M(\theta)L\}(f),\end{aligned}$$

поэтому
$$[\theta L, M] = \theta[L, M] - M(\theta)L,$$

следовательно,
$$W([\theta L, M]) = \theta W([L, M]) - M(\theta)W(L).$$

Итак, оказывается, что $W([L, M])$ и $L(W(M)) - M(W(L))$ линейны над $\mathcal{E}$ с точностью до одного и того же поправочного члена. Поскольку $\widetilde{W}$ представляет собой разность между ними, этот член сокращается, и $\widetilde{W}$ оказывается линейным над $\mathcal{E}$. Из сформулированной выше теоремы мы получаем теперь, что существует единственный ковариантный тензор второго порядка (который мы обозначаем через dW и называем дифференциалом W), такой, что

$$dW(L, M) \equiv \widetilde{W}(L, M) \equiv L(W(M)) - M(W(L)) - W([L, M]).$$

Ясно, что dW антисимметричен по своим двум аргументам.

Вычислим dW в частном случае, когда $W = df$. По определению $[L, M]$ мы имеем

$$\begin{aligned} dW(L, M) \equiv L(W(M)) - M(W(L)) - W([L, M]) = \\ = L(df(M)) - M(df(L)) - df([L, M]) = \\ = L(M(f)) - M(L(f)) - [L, M](f) = 0. \end{aligned}$$

Итак, необходимое условие того, что $W = df$ для некоторой f, есть $dW = 0$. Это условие не является достаточным вообще, но оно достаточно для локального представления W в виде df. Проще всего в этом убедиться, вычислив коэффициенты W в некоторой системе координат. Если $W = a_1\, dq_1 + \ldots + a_k\, dq_k$, то $dW|_{ij} = \partial a_i/\partial q_j - \partial a_j/\partial q_i$. Поэтому $dW = 0$ тогда и только тогда, когда $\partial a_i/\partial q_j = \partial a_j/\partial q_i$; из этого условия, как известно, вытекает, что $a_i = \partial f/\partial q_i$ в некоторой окрестности каждой точки.

Вообще мы говорим, что поле W *замкнуто*, если $dW = 0$. Множество всех замкнутых W есть векторное пространство, в котором точные W составляют некоторое подпространство. Размерность факторпространства зависит только от топологии S и называется первым числом Бетти многообразия S. Это число равно нулю, если S — внутренность единичного шара в E^n, и равно единице, если S — внутренность кольца [6]).

Пусть $t \to q(t)$ — „бесконечно гладкая кривая“ в S, т. е. функция, отображающая открытое связное подмножество I действительной прямой в S, такая что $f(q(t)) \in C^\infty$ для всех $f \in \mathcal{E}$. Для каждого $t_0 \in I$ отображение

$$f \to v_{t_0}(f) = \left.\frac{df(q(t))}{dt}\right|_{t=t_0},$$

очевидно, удовлетворяет условиям, содержащимся в определении касательного вектора в $q(t_0)$. Итак, $v_{t_0} \in V_q(t_0)$; мы называем v_{t_0} *касательным вектором к кривой* $q(t)$ в $q(t_0)$. Заметим, кстати, что если у нас имеется некоторая риманова метрика G_q на S, то $\sqrt{G_{q(t)}(v_t, v_t)}$ — длина вектора v_t и мы можем каждому конечному сегменту нашей кривой поставить в соответствие его длину

$$\int_a^b \sqrt{G_{q(t)}(v_t, v_t)}\, dt.$$

Пусть теперь $t \to U_t$ — некоторая однопараметрическая группа автоморфизмов $(S, \mathcal{E})$; под автоморфизмом α понимается взаимно однозначное отображение S на S, такое что $f \in \mathcal{E}$ тогда и только тогда, когда $f \circ \alpha \in \mathcal{E}$. Предположим, что все орбиты $t \to U_t$ на S — бесконечно гладкие кривые. Тогда поскольку каждая точка $q \in S$ лежит в точности на одной орбите, то, построив касательный вектор к орбите, проходящей через q, мы получим определенный вектор в точке q. Построенное таким образом векторное поле мы будем обозначать через L^U и называть инфинитезимальной образующей группы U. Если L^U — векторное поле класса C^∞, то мы будем говорить, что U — однопараметрическая группа класса C^∞.

Пусть $\mathcal{O}$ — открытое подмножество S, допускающее систему координат $(q_1, \ldots, q_n)$. Тогда части орбит U, лежащие в $\mathcal{O}$, можно записать в конкретной форме: каждая орбита задается n функциями от t. Как и в разд. 1.1, эти функции удовлетворяют системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dq_1}{dt} &= A_1^U(q_1, \ldots, q_n), \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \frac{dq_n}{dt} &= A_n^U(q_1, \ldots, q_n), \end{aligned}$$

[6]) Пусть, например, $W = (x\,dy - y\,dx)/(x^2 + y^2)$, а рассматриваемая область — кольцо $1 < x^2 + y^2 < 2$. В окрестности любой точки $W = d\,\mathrm{arctg}(y/x)$, но $\mathrm{arctg}(y/x)$ нельзя определить как однозначную непрерывную функцию всюду внутри кольца.

где $A_1^U, \ldots, A_n^U$ — компоненты L^U относительно базиса, определяемого системой координат $q_1, \ldots, q_n$. Поэтому, согласно классической теореме единственности дифференциальных уравнений, L^U однозначно определяет U для любой однопараметрической группы U класса C^∞.

Пусть S — многообразие класса C^∞, представляющее собой „конфигурационное пространство" некоторой физической системы [7]. Пусть $f : t \to f(t)$ — кривая класса C^∞ в S. Тогда для каждой точки t_0 вектор $v_{f(t_0)}$, касательный к f в $f(t_0)$, показывает „скорость" системы, „движущейся" по траектории f, при $t = t_0$. Если в некоторой системе координат $f(t) = (q_1(t), q_2(t), \ldots, q_k(t))$, то в этой системе координат вектор $v_{f(t_0)}$ имеет компоненты $\dot{q}_1(t_0), \ldots, \dot{q}_k(t_0)$. Поэтому задать все q и $\dot{q}$ все равно, что задать точку q_0 из S и вектор из V_{q_0}.

Другими словами, многообразие состояний физической системы, у которой состояния определяются заданием пространственных координат и скоростей, имеет специальный вид. Это — многообразие касательных векторов некоторого другого многообразия вдвое меньшей размерности. Более того, как мы увидим, введение импульсов вместо скоростей (p вместо $\dot{q}$) в инвариантной форме означает, что мы выбираем специальное отображение каждого V_q в V_q^* и описываем состояния с помощью элементов V_q^*. Но, прежде чем вернуться к механике, нам нужно обсудить некоторые особые свойства таких многообразий касательных векторов.

Пусть S — многообразие класса C^∞. Обозначим через S_V множество всех пар (q, v), где $v \in V_q$. Если $(q_1, \ldots, q_n)$ — система координат для открытого множества $\mathcal{O} \subset S$, то $\partial/\partial q_1, \ldots, \partial/\partial q_n$ — базис V_q для каждого $q \in \mathcal{O}$. Поэтому каждой точке $\pi^{-1}(\mathcal{O})$ естественным образом ставится в соответствие набор $2n$ действительных чисел; здесь π — отображение S_V на S, которое переводит (q, v) в q.

Мы будем говорить, что функция f, определенная на S_V, принадлежит $\mathcal{E}_V$, если она бесконечно дифференцируема в каждом множестве $\pi^{-1}(\mathcal{O})$ относительно индуцированной системы координат. Мы предоставляем читателю самостоятельно убедиться в том, что $\mathcal{E}_V$ превращает S_V в многообразие класса C^∞. Это многообразие часто называется *касательным пучком* (касательным расслоенным пространством) над S.

Если S_1 и S_2 — любые два многообразия класса C^∞, φ — некоторое отображение S_1 в S_2, то мы говорим, что φ — отображение класса C^∞, если $f \circ \varphi \in C^\infty$ на S_1 для любой функции $f \in C^\infty$ на S_2. Пусть φ — такое отображение, и $q \in S_1$. Для каждого $v \in V_q$ и произвольной функции f класса C^∞ на S_2 мы можем образовать $(f \circ \varphi)_v(q)$. Фиксируя v и меняя f, мы получаем функцию на функциях класса C^∞, определенных на многообразии S_2, которая, как нетрудно убедиться, удовлетворяет условиям, содержащимся в определении касательного вектора в точке $\varphi(q)$. Итак, существует единственный вектор $w \in V_{\varphi(q)}$, для которого $(f \circ \varphi)_v(q) \equiv f_w(\varphi(q))$. Нетрудно видеть, что w линейно зависит от v. Это линейное отображение V_q в $V_{\varphi(q)}$ мы будем называть дифференциалом $d\varphi|_q$ отображения φ в точке q. Если $(q_1, \ldots, q_n)$ — система координат для некоторого открытого множества $\mathcal{O} \subset S_1$, содержащего q, а $(s_1, \ldots, s_m)$ — система координат для некоторого открытого множества $\mathcal{O}' \subset S_2$, содержащего $\varphi(q)$, то φ описывается m функциями n действительных переменных $s_j = f_j(q_1, \ldots, q_n)$. Далее, эти системы координат порождают базисы в V_q и в $V_{\varphi(q)}$. Ясно, что матрица $d\varphi|_q$ относительно этих базисов имеет вид $\| \partial f_j/\partial q_k|_q \|$.

Пусть теперь $S_1 = S_V, S_2 = S$ и $\varphi = \pi$. Тогда для каждой точки $(s, v) \in S_1$ дифференциал $d\pi_{(s,v)}$ отображает $V_{s,v}$ линейно в (в действительности на) V_s. Если L — любое контравариантное векторное поле класса C^∞ на S_V, мы можем применить $d\pi_{(s,v)}$ к $L_{(s,v)}$ и получить некоторый элемент V_s. Для каждого фиксированного s мы имеем, следовательно, некоторое отображение $v \to d\pi_{(s,v)}(L_{(s,v)})$ из V_s в V_s. Обозначим это отображение T_s^L. Мы будем называть контравариантное векторное поле L *специальным*, если это отображение является тождественным для всех s, т. е. если $d\pi_{(s,v)}(L_{(s,v)}) = v$ для всех s и v. Если $(q_1, \ldots, q_n)$ — система координат для открытого подмножества $\mathcal{O} \subset S$, а $q_1, \ldots, q_n, w_1, \ldots, w_n$ — соответствующая система координат для $\pi^{-1}(\mathcal{O})$, то система обыкновенных дифференциальных уравнений, соответствующая наиболее общему

[7]) Конфигурационным пространством механической системы называется совокупность всех возможных положений этой системы (т. е. положений всех ее точек без учета их скоростей), например, для системы, состоящей из жесткого стержня, перемещающегося по плоскости, конфигурационное пространство является произведением плоскости и окружности. — *Прим. ред.*

контравариантному векторному полю L на S_V, имеет следующий вид:

$$\frac{dq_j}{dt} = B_j(q_1, \ldots, q_n, w_1, \ldots, w_n),$$
$$\frac{dw_j}{dt} = A_j(q_1, \ldots, q_n, w_1, \ldots, w_n).$$

Мы предоставляем читателю убедиться в том, что L является специальным тогда и только тогда, когда

$$B_j(q_1, \ldots, q_n, w_1, \ldots, w_n) \equiv w_j \text{ для всех } j.$$

Но системы уравнений первого порядка вида

$$\frac{dq_j}{dt} = w_j, \quad \frac{dw_j}{dt} = A_j(q_1, \ldots, q_n, w_1, \ldots, w_n),$$

— это в точности те системы, которые получаются из систем второго порядка

$$\frac{d^2q_j}{dt^2} = A_j\Big(q_1, \ldots, q_n, \frac{dq_1}{dt}, \ldots, \frac{dq_n}{dt}\Big)$$

введением вспомогательных переменных $w_j = dq_j/dt$. Итак, инвариантно определенным математическим объектом, соответствующим системе дифференциальных уравнений второго порядка класса C^∞ на S, является специальное контравариантное векторное поле класса C^∞ на S_V.

Пусть $\mathcal{L}$ — функция класса C^∞ на S_V, и $t \to \theta(t)$ — некоторая кривая класса C^∞ на S. Для каждого t обозначим касательный вектор к кривой $\theta(t)$ через $\theta'(t)$. Тогда для всех t пара $(\theta(t), \theta'(t))$ принадлежит S_V, и мы можем рассматривать функцию $\mathcal{L}(\theta(t), \theta'(t))$ переменного t и ее интеграл между фиксированными пределами. В координатах этот интеграл имеет вид

$$\int_a^b \mathcal{L}(q_1(t), \ldots, q_n(t), \dot{q}_1(t), \ldots, \dot{q}_n(t))\, dt.$$

Отсюда видно, что понятие касательного пучка S_V, составляет естественную основу для инвариантного описания задач вариационного исчисления, встречающихся в формулировке принципа Гамильтона.

Множество S_{V^*} всех пар (q, w), где $w \in V_q^*$, может быть превращено в многообразие класса C^∞ совершенно тем же образом, как S_V. Это многообразие мы будем называть кокасательным пучком на S; отображение $(q, w) \to q$ класса C^∞ мы по-прежнему обозначаем через π. Используя отображение $d\pi$, мы можем выбрать некоторое специальное векторное поле класса C^∞ на S_{V^*}, которое будет играть центральную роль в формулировке законов механики. Это поле определяется следующим образом. Для каждой точки $(q, w) \in S_{V^*}$ отображение $d\pi_{(q,w)}$ является линейным отображением $V_{(q,w)}$ на V_q. Сопряженное отображение $(d\pi)^*_{(q,w)}(w)$ представляет собой линейное отображение V_q^* на $V^*_{(q,w)}$. Это линейное отображение переводит элемент $w \in V_q^*$ в некоторый элемент поля $V^*_{(q,w)}$. Таким образом мы каждой точке $(q, w) \in S_{V^*}$ ставим в соответствие некоторый элемент $V^*_{(q,w)}$ и получаем тем самым некоторое ковариантное векторное поле. Мы будем называть его *фундаментальным ковариантным векторным полем многообразия* и обозначать через W^0.

Пусть $(q_1, \ldots, q_n)$ — некоторая система координат для открытого множества $\mathcal{O}$ и $(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$ — соответствующая система координат для $\pi^{-1}(\mathcal{O})$. Тогда наиболее общее векторное поле на $\pi^{-1}(\mathcal{O}) \subset S_{V^*}$ можно записать в виде

$$a_1\, dq_1 + \ldots + a_n\, dq_n + b_1\, dp_1 + \ldots + b_n\, dp_n,$$

где все a и b являются функциями p и q. Нетрудно вычислить a и b для W^0. Поскольку

$$\pi(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n) = (q_1, \ldots, q_n),$$

$d\pi$ в каждой точке имеет матрицу

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 1 & 0 & \ldots & 0 \end{pmatrix};$$

матрица $(d\pi)^*$ получается из этой матрицы транспонированием. Следовательно, $(d\pi_{(q,p)})^*(p) = (p, 0)$, т. е. $a_j = p_j$ и $b_j = 0$. Другими словами, $W^0 = p_1\,dq_1 + \ldots + p_n\,dq_n$. Отсюда, в частности, следует, что W^0 является ковариантным векторным полем класса C^∞ и мы можем образовать антисимметрическое ковариантное тензорное поле dW^0 второго порядка класса C^∞. Нетрудно подсчитать, что матрица dW^0 в тех же координатах имеет вид

$$\left(\begin{array}{cccc|cccc} & & & & 1 & & & \\ & 0 & & & & 1 & & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \\ \hline -1 & & & & & & & \\ & -1 & & & & & & \\ & & \ddots & & & 0 & & \\ & & & -1 & & & & \end{array}\right),$$

так что dW^0 нигде не вырождено.

Пусть для каждого контравариантного векторного поля L на S_{V^*} класса C^∞ через $\tilde{L}$ обозначено ковариантное векторное поле, такое, что $\tilde{L}(M) = dW^0(L, M)$ для всех контравариантных векторных полей M класса C^∞. Из невырожденности dW^0 следует, что отображение $L \to \tilde{L}$ множества контравариантных векторных полей класса C^∞ на S_{V^*}, на множество ковариантных векторных полей класса C^∞ на S_{V^*} взаимно однозначно и является отображением на все множество. Мы будем использовать тот же знак $\sim$ для обратного отображения, так что $\tilde{\tilde{L}} = L$. Если

$$L = a_1 \frac{\partial}{\partial q_1} + \ldots + a_n \frac{\partial}{\partial q_n} + b_1 \frac{\partial}{\partial p_1} + \ldots + b_n \frac{\partial}{\partial p_n},$$

то, как нетрудно видеть,

$$\tilde{L} = b_1\,dq_1 + \ldots + b_n\,dq_n - a_1\,dp_1 - \ldots - a_n\,dp_n.$$

Если f и g — функции класса C^∞ на S_{V^*}, то мы можем образовать функцию $dW^0(\widetilde{df}, \widetilde{dg})$, которую мы будем сокращенно обозначать через $[f, g]$. В терминах p и q мы имеем

$$[f, g] = \frac{\partial f}{\partial q_1}\frac{\partial g}{\partial p_1} + \ldots + \frac{\partial f}{\partial q_n}\frac{\partial g}{\partial p_n} - \frac{\partial f}{\partial p_1}\frac{\partial g}{\partial q_1} - \ldots - \frac{\partial f}{\partial p_n}\frac{\partial g}{\partial q_n},$$

т. е. скобку Пуассона функций f и g.

Отображение $L \to \tilde{L}$ контравариантных векторных полей на ковариантные позволяет перенести имеющуюся классификацию ковариантных векторных полей (замкнутые поля — те, для которых $dW = 0$, точные поля — те, для которых $W = dH$) на контравариантные векторные поля. Мы будем называть контравариантное векторное поле L *гамильтоновым в целом, если* $L = \widetilde{dH}$, и *локально гамильтоновым*, если $L = \widetilde{W}$, где $dW = 0$. Локально гамильтоновое векторное поле можно представить в виде $\widetilde{dH}$ в некоторой окрестности каждой точки, но при этом может не существовать функции, которая годилась бы для всего многообразия. Во всяком случае, дифференциальные уравнения, определяемые таким векторным полем, имеют так называемую „форму Гамильтона":

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}.$$

Пусть U и V — однопараметрические группы класса C^∞ автоморфизмов S_{V^*}; предположим, что их инфинитезимальные образующие L^U и L^V являются гамильтоновыми в целом, т. е. $L^U = \widetilde{df}$ и $L^V = \widetilde{dg}$. Тогда скорость изменения g вдоль орбит U равна

$$L^U(g) = \widetilde{df}(g) = dW^0(\widetilde{df}, \widetilde{dg}) = [f, g].$$

Таким образом, скобки Пуассона имеют ту же интерпретацию, что и в разд. 1.2.

Однопараметрические группы U класса C^∞, инфинитезимальные образующие которых L^U являются локально гамильтоновыми, могут быть коротко охарактеризованы следующим образом. Это именно те группы, у которых U_t и оставляют dW^0 инвариантным. Другими словами, назовем автоморфизм A многообразия S_{V^*} класса C^∞ *контактным преобразованием*, если $(dA)_{q,w}$ отображает $V_{q,w}$ на $V_{A(q,w)}$ таким образом, что $(dW^0)_{q,w}$ переходит в $(dW^0)_{A(q,w)}$; тогда имеет место теорема (которую мы не будем доказывать), утверждающая, что инфинитезимальная образующая однопараметрической группы $t \to U_t$ локально гамильтонова тогда и только тогда, когда каждое U_t является контактным преобразованием. Поэтому локально гамильтоновы контравариантные векторные поля на S_{V^*} иногда называют инфинитезимальными контактными преобразованиями.

Мы подготовлены теперь к тому, чтобы вернуться к физике и обобщить законы механики системы точек, сформулированные в разд. 1.2. Вместо того чтобы предполагать, что $3n$ координат наших n точек принадлежат некоторому открытому подмножеству E^{3n}, мы предполагаем только что они принадлежат некоторому подмножеству $\mathcal{M}$, которое становится многообразием класса C^∞, если за $\mathcal{E}$ принять множество всех ограничений на $\mathcal{M}$ функций класса C^∞ в E^{3n}. Например, мы можем задать $n(n-1)/2$ констант c_{ij} и в качестве $\mathcal{M}$ взять множество всех наборов $x_1, y_1, z_1, \ldots, x_n, y_n, z_n$, таких, что

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 = c_{ij}.$$

Для того чтобы допустить еще более общий случай, например такой, когда пространство является не „плоским“, а „кривым“, мы будем просто считать, что задано абстрактное множество $\mathcal{M}$ „возможных конфигураций“, и что $\mathcal{M}$ является многообразием класса C^∞ относительно некоторого множества $\mathcal{E}$ действительных функций на $\mathcal{M}$. Если $t \to \varphi(t)$ — кривая на $\mathcal{M}$, описывающая некоторое возможное изменение конфигурации системы во времени, то касательный вектор $\varphi'(t)$ служит мерой скорости изменения системы в момент времени t. Действительно, если $(q_1, \ldots, q_n)$ — локальная система координат, так что $t \to \varphi(t)$ описывается (локально) n функциями $q_1(t), \ldots, q_n(t)$, то производные этих функций в точке t_0 служат координатами $\varphi'(t_0)$. В соответствии с нашим прежним предположением, что будущее системы определяется координатами и скоростями в один фиксированный момент времени, мы предполагаем теперь, что $\varphi(t_0)$ и $\varphi'(t_0)$ вместе определяют будущее. Это означает, что множество состояний нашей системы можно отождествить с множеством точек касательного пучка $\mathcal{M}_V$. Мы исключаем из рассмотрения так называемые неголономные системы, предполагая, что *каждая* точка $\mathcal{M}_V$ является возможным состоянием. Мы будем по-прежнему предполагать, что наша система обратима и для удобства будем считать, что динамическая группа $t \to U_t$ является однопараметрической группой класса C^∞, хотя столь сильное ограничение и не является необходимым. Конечно, из нашего определения состояний следует, что инфинитезимальная образующая L^U группы $t \to U_t$ будет специальным контравариантным векторным полем на $\mathcal{M}_V$.

В соответствии с нашими предположениями (1)–(3), сделанными в разд. 1.2 относительно ускорений A_j, мы примем здесь одно предположение, которое одновременно и обобщает и включает все существенные требования, содержащиеся в (1)–(3). Пусть T — произвольная риманова метрика на $\mathcal{M}$ класса C^∞. Тогда для каждой точки $q \in \mathcal{M}$ метрика T_q определяет линейное отображение $\widetilde{T}_q$ пространства V_q на V_q^*. Используя эти отображения, мы можем построить взаимно однозначное отображение $B^T : \mathcal{M}_V \to \mathcal{M}_{V^*}$, положив $B^T(q,v) = (q, \widetilde{T}_q(v))$. Ясно, что B^T и обратное отображение принадлежат классу C^∞. Поэтому $t \to U_t^T = B^T U_t (B^T)^{-1}$ — однопараметрическая группа автоморфизмов $\mathcal{M}_{V^*}$ класса C^∞. Наше основное предположение заключается в следующем.

На $\mathcal{M}$ существует такая риманова метрика T, что группа $t \to U_t^T$ имеет гамильтонову в целом инфинитезимальную образующую.

Пусть H — та функция класса C^∞ на $\mathcal{M}_{V^*}$, для которой $\widetilde{dH}$ является требуемой инфинитезимальной образующей; функция H, конечно, определяется однозначно с точностью до аддитивной постоянной и называется гамильтонианом нашей системы. Мы увидим, что она определяет не только U^T, но и метрику T и, следовательно, первоначальную динамическую группу нашей системы.

Пусть $q_1, \ldots, q_n$ — система координат для открытого множества $\mathcal{O} \subset \mathcal{M}$ и $(q_1, \ldots, q_n, v_1, \ldots, v_n)$

— соответствующая система координат для $\pi^{-1}(\mathcal{O}) \subset \mathcal{M}_V$. Пусть

$$T_q(v_1, \ldots, v_n, v'_1, \ldots, v'_n) = \sum_{i,j} \mathrm{g}_{ij}(q_1, \ldots, q_n)\, v_i\, v'_j;$$

тогда

$$(\widetilde{T}_q(v_1, \ldots, v_n))_i = \sum_j \mathrm{g}_{ij}(q_1, \ldots, q_n)\, v_j$$

и

$$(\widetilde{T}_q^{-1}(p_1, \ldots, p_n))_i = \sum_j \mathrm{g}'_{ij}(q_1, \ldots, q_n)\, p_j,$$

где координаты p_i в пространстве V_q^* двойственны к координатам v в пространстве V_q и

$$\|\mathrm{g}'_{ij}(q_1, \ldots, q_n)\| = \|\mathrm{g}_{ij}(q_1, \ldots, q_n)\|^{-1}.$$

Мы имеем

$$(B^T)^{-1}(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n) = \Big(q_1, \ldots, q_n, \sum_j \mathrm{g}'_{1j}\, p_j, \ldots, \sum_j \mathrm{g}'_{nj}\, p_j\Big),$$

поэтому равенство $dq_i/dt = v_i$ превращается в равенство

$$\frac{dq_i}{dt} = \sum_j \mathrm{g}'_{ij}\, p_j.$$

Поскольку, кроме того, $dq_i/dt = \partial H/\partial p_i$, мы имеем

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \sum \mathrm{g}'_{ij}\, p_j,$$

откуда

$$H = \frac{1}{2} \sum \mathrm{g}'_{ij}\, p_i\, p_j + \mathcal{V},$$

где $\mathcal{V}$ — функция только переменных q_i. Пусть для каждого $q \in \mathcal{M}$ символ T_q^0 обозначает контравариантный тензор второго порядка, который переводит w и w' из V_q^* в $\widetilde{T}_q^{-1}(w)(w')$. Тогда мы видим, что H имеет следующий вид:

$$H(q, w) = \frac{1}{2} T_q^0(w, w') + \mathcal{V}(q),$$

где $\mathcal{V}$ — некоторая функция класса C^∞ на $\mathcal{M}$. Конечно, H однозначно определяет функцию $\mathcal{V}(q) = H(q, 0)$; следовательно, H определяет T^0 и вместе с ним метрику T. Задание же T и $\mathcal{V}$ полностью определяет движение системы.

Предположения (1)–(3), как нетрудно видеть, эквивалентны требованию, что метрика T не только существует, но и имеет специальный вид $\sum\limits_{j=1}^{3n} m_j\, v_j\, v'_j$, где m_j — константы. Метрика T, так же как m_j, определяется не единственным образом; несколько различных T могут соответствовать одной и той же системе; другими словами две совершенно различные функции Гамильтона H могут приводить к одной и той же однопараметрической группе в $\mathcal{M}_V$. С другой стороны, во многих важных случаях T определяется однозначно с точностью до постоянного множителя. Более того, во всех случаях, когда в выборе T имеется больший произвол, его можно устранить, допустив, что наша система взаимодействует с некоторыми другими системами. Существенная неоднозначность в выборе T возникает только тогда, когда мы изолируем слишком малую часть физического мира.

Наш основной закон можно сформулировать эквивалентным образом без введения многообразия $\mathcal{M}_{V^*}$. Пусть $\mathcal{L}$ — любая функция класса C^∞ на $\mathcal{M}_V$ и $q:\ t \to q(t)$ — некоторая кривая класса C^∞ на $\mathcal{M}$. Тогда если a и b ($a \leqslant b$) принадлежат области определения функции $q(t)$, то мы можем образовать

$$\int\limits_a^b \mathcal{L}(q(t), q'(t))\, dt.$$

Если на кривой $q(t)$ этот интеграл принимает стационарное значение (в обычном смысле вариационного исчисления) относительно всех кривых q с теми же концами, $q(t)$ является *экстремалью* функции $\mathcal{L}$. Теорема, доказательство которой мы опускаем, утверждает, что проекции на $\mathcal{M}$ орбит нашей гамильтоновой динамической группы U являются экстремалями функции

$$\mathcal{L}(q,v) = \frac{1}{2}T_q(v,v) - \mathcal{V}(q).$$

Обратно, пусть U_t — произвольная однопараметрическая группа автоморфизмов $\mathcal{M}_V$ класса C^∞, и $\mathcal{L}$ — некоторая функция на $\mathcal{M}_V$ класса C^∞ вида

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}T_q(v,v) - \mathcal{V}(q),$$

где T — риманова метрика на $\mathcal{M}$, и $\mathcal{V}$ — действительная функция на $\mathcal{M}$. Если проекции орбит U на $\mathcal{M}$ являются экстремалями $\mathcal{L}$, то $t \to U_t^T$ имеет гамильтонову в целом инфинитезимальную образующую. Действительно, мы можем принять

$$\frac{1}{2}T_q^0(w,w) + \mathcal{V}(q)$$

за функцию Гамильтона на $\mathcal{M}_{V^*}$. Функция $\mathcal{L}$ называется лагранжианом системы, формулировку основного ограничения, налагаемого на U, в терминах экстремальных свойств $\mathcal{L}$ можно рассматривать, конечно, как более общую форму принципа Гамильтона, упомянутого в разд. 1.2. Естественно, мы можем рассматривать экстремальные свойства любых интегралов вида

$$\int_a^b \mathcal{L}(q(t), q'(t))\,dt,$$

где $\mathcal{L}$ — произвольная функция на $\mathcal{M}_V$ класса C^∞, не обязательно квадратичная на V_q. Кроме того, разумеется, существуют гамильтоновы в целом векторные поля класса C^∞ на $\mathcal{M}_{V^*}$, для которых соответствующая функция H не квадратична на V_q^*. Оказывается, что соответствие между экстремалями вариационных задач и интегральными кривыми гамильтоновых в целом векторных полей класса C^∞ имеет место в значительно более общей ситуации, чем рассмотренная выше. Мы ограничимся здесь описанием перехода от $\mathcal{L}$ к H в том частном случае, когда имеется соответствующее взаимно однозначное отображение $\mathcal{M}_V$ на $\mathcal{M}_{V^*}$.

Рассмотрим прежде всего конечномерное векторное пространство V. Касательным пространством многообразия V класса C^∞ в любой точке является само V. Поэтому любое ковариантное векторное поле класса C^∞ на V является в то же время отображением класса C^∞ V в V^* [8]).

Пусть $\mathcal{L}$ — произвольная действительная функция на V класса C^∞, такая, что ковариантное векторное поле $d\mathcal{L}$ класса C^∞ задает взаимно однозначное отображение V на V^* Нетрудно показать, что $(d\mathcal{L})^{-1}$ имеет вид $d\mathcal{L}^0$ для некоторой функции $\mathcal{L}^0$ класса C^∞ на V^* и что произвольную постоянную в $\mathcal{L}^0$ можно выбрать так, чтобы выполнялось равенство

$$\mathcal{L}^0(l) = l(\psi(l)) - \mathcal{L}(\psi(l)),$$

где $\psi = (d\mathcal{L})^{-1}$. При этом мы, конечно, отождествляем V и V^{**}. Далее, $\mathcal{L}^{00} = \mathcal{L}$. Поэтому $\mathcal{L} \to \mathcal{L}^0$ представляет собой взаимно однозначное соответствие между некоторыми функциями класса C^∞ на V и некоторыми функциями класса C^∞ на V^* [9]).

Пусть теперь $\mathcal{L}$ — некоторая функция класса C^∞ на $\mathcal{M}_V$, которая при каждом фиксированном $q \in \mathcal{M}$ как функция на V_q удовлетворяет указанному выше условию. Мы можем образовать функцию $(\mathcal{L}_q)^0$ на V_q^*; тогда $(q,w) \to (\mathcal{L}_q)^0(w)$ будет функцией класса C^∞ на $\mathcal{M}_{V^*}$, которую мы обозначим $\mathcal{L}^0$. По-прежнему $\mathcal{L}^{00} = \mathcal{L}$. Нетрудно усмотреть, что если $\mathcal{L}$ — лагранжиан динамической системы, то $\mathcal{L}^0$ — ее гамильтониан.

Когда мы, используя нашу основную риманову метрику T, отображаем $\mathcal{M}_V$ на $\mathcal{M}_{V^*}$, мы можем рассматривать $\mathcal{M}_{V^*}$ как пространство всех состояний и будем называть его в

[8]) Это отображение принадлежит классу C^∞ но, вообще говоря, не является линейным. — *Прим. ред.*

[9]) Переход от функции $\mathcal{L}$ на V к функции $\mathcal{L}^0$ на V^* называется преобразованием Лежандра; см., например, Гельфанд И. М., Фомин С. В., Вариационное исчисление, Физматгиз, М., 1961. — *Прим. перев.*

этом случае *фазовым пространством* системы. Действительные функции на $\mathcal{M}_{V^*}$ мы будем называть *наблюдаемыми* или *динамическими переменными*.

Теперь мы можем без труда обобщить остальные рассуждения разд. 1.2.

Функции

$$\mathcal{V}(q), \quad \frac{1}{2}T_q(w,w), \quad \mathcal{V}(q)+\frac{1}{2}T_q(w,w)$$

— это наблюдаемые, которые называются соответственно потенциальной, кинетической и полной энергией системы. Наблюдаемая, постоянная на орбитах динамической группы U (которую мы считаем теперь действующей на $\mathcal{M}_{V^*}$), называется интегралом системы. Некоторая наблюдаемая f класса C^∞ является интегралом тогда и только тогда, когда $[f,H]=0$. В частности, $[H,H]=0$, так что полная энергия $H=\mathcal{V}+{}^1/{}_2T$ является интегралом. Вообще если $\widetilde{df}$ — инфинитезимальная образующая группы U^f автоморфизмов $\mathcal{M}_{V^*}$, то f является интегралом тогда и только тогда, когда H постоянна на орбитах U^f.

Пусть $t\to A_t$ — произвольная однопараметрическая группа автоморфизмов $\mathcal{M}$, и L^A — ее инфинитезимальная образующая. Каждое преобразование A_t является автоморфизмом $\mathcal{M}$, т. е. $(dA_t)_q$ отображает V_q линейно на $V_{A_t(q)}$. $((dA_t)^*_q)^{-1}$ отображает V^*_q линейно на $V^*_{A_t(q)}$. Поэтому

$$(q,w)\to(A_t(q),((dA_t)^*_q)^{-1}(w))$$

является взаимно однозначным отображением A^0_t многообразия $\mathcal{M}_{V^*}$ на $\mathcal{M}_{V^*}$. Очевидно, что $t\to A^0_t$ — однопараметрическая группа автоморфизмов $\mathcal{M}_{V^*}$. Мы называем ее группой, порожденной A_t.

Рассмотрим теперь инфинитезимальную образующую L^A группы A_t. Она сопоставляет каждой точке q из $\mathcal{M}$ вектор v из V_q. Будем рассматривать вектор v как линейную функцию на V^*_q. Таким образом, L^A определяет некоторую функцию на $\mathcal{M}_{V^*}$: $(q,w)\to L^A_q(w)$, которую мы обозначим φ^{L^A}. Имеет место теорема, согласно которой $\widetilde{d\varphi}^{L^A}=L^{A^0}$ (доказательство мы предоставляем читателю). Другими словами, инфинитезимальная образующая группы A^0, порожденной группой A, гамильтонова в целом, а та функция на $\mathcal{M}_{V^*}$, дифференциал которой определяет эту образующую, совпадает с φ^{L^A}. Функции на $\mathcal{M}_{V^*}$, которые линейны на всех V^*_q, называются обобщенными импульсами. Мы можем получить интеграл нашей системы, линейный на каждом V^*_q, из любой однопараметрической группы A в $\mathcal{M}$, которая оставляет T и $\mathcal{V}$ неизменными. Такие интегралы мы будем, как и выше, называть линейными интегралами импульсов.

Из всего изложенного следует, что для того, чтобы описать реальную физическую систему, достаточно описать пространство $\mathcal{M}$ всех конфигураций и задать риманову метрику T на $\mathcal{M}$ и потенциал $\mathcal{V}$. После этого сразу же может быть выписана инфинитезимальная образующая системы, и предсказание будущего поведения системы сводится к задаче (часто весьма сложной) интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

В заключение этого раздела приведем несколько примеров.

В небесной механике $\mathcal{M}$ является $3n$-мерным евклидовым пространством всех координат n рассматриваемых планет, а кинетическая и потенциальная энергия выражаются так:

$$T(x_1,y_1,z_1,\ldots,x_n,y_n,z_n,v_1,\ldots,v_{3n})=m_1(v_1^2+v_2^2+v_3^2)+\ldots+m_n(v_{3n-2}^2+v_{3n-1}^2+v_{3n}^2),$$

$$\mathcal{V}(x_1,y_1,z_1,\ldots,x_n,y_n,z_n)=-\sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{n} G\,\frac{m_i m_j}{\sqrt{(x_i-x_j)^2+(y_i-y_j)^2+(z_i-z_j)^2}}.$$

где m_i и G — константы, определяемые из опыта [10]). Строго говоря, сформулированная выше теория не применима к этому случаю, поскольку функция $\mathcal{V}$ имеет особенности. Однако этот недостаток можно устранить, изменив $\mathcal{V}$ при очень малых значениях расстояний так, чтобы сделать столкновение невозможным. При $n=2$ получающиеся дифференциальные уравнения могут быть полностью проинтегрированы. В результате оказывается, что планеты двигаются по фиксированным орбитам около общего центра тяжести. Эти орбиты являются в зависимости от начальных условий эллипсами, параболами или гиперболами. Для $n>2$ известны только отдельные частные результаты.

[10]) В действительности m_i — половина массы i-й точки, а G — учетверенная гравитационная постоянная. — *Прим. ред.*

В обычной механике наклонных плоскостей, рычагов, блоков, волчков и т. д. мы снова имеем конечную систему материальных частиц с координатами $x_1, y_1, z_1, \ldots, x_n, y_n, z_n$, но здесь имеются определенные связи, так что $\mathcal{M}$ является подмногообразием E^{3n} класса C^∞. Если ось z выбрана перпендикулярно к поверхности Земли, то функция $\mathcal{V}$ является ограничением на $\mathcal{M}$ функции

$$m_1 z_1 + \ldots + m_n z_n,$$

а T — ограничением на $\mathcal{M}_V$ функции

$$m_1(v_1^2 + v_2^2 + v_3^2) + \ldots + m_n(v_{3n-2}^2 + v_{3n-1}^2 + v_{3n}^2).$$

В динамике обычного „твердого тела“ $\mathcal{M}$ — шестимерное многообразие, которое получается при пересечении $n(n-1)/2$ $(3n-1)$-мерных гиперповерхностей вида

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 = d_{ij},$$

где все d_{ij} — константы.

1.4 Колебания, волны и гильбертово пространство

Пусть (q, w) — стационарная точка фазового пространства динамической системы, т. е. $U_t(q, w) = (q, w)$ для всех t. Это имеет место тогда и только тогда, когда $w = 0$ и $(d\mathcal{V})_q = 0$. Точки многообразия $\mathcal{M}$, в которых $d\mathcal{V}$ обращается в нуль, называются *точками равновесия* системы. Условие $(d\mathcal{V})_q = 0$ необходимо (но недостаточно) для того, чтобы $\mathcal{V}$ имела локальный максимум или локальный минимум в точке q. Чтобы узнать, имеет ли $\mathcal{V}$ максимум или минимум, нужно рассмотреть билинейную форму B_q на V_q, матрица которой в некоторой системе координат имеет вид $\|\partial^2\mathcal{V}/\partial q_i \partial q_j\|$. [В инвариантной форме $B(L, M) = L(M(\mathcal{V}))$. Значение $B(L, M)$ в точке q зависит только от L_q и M_q.]

Если $B_q(v, v) > 0$ при всех $v \neq 0$, то форма называется положительно определенной, и $\mathcal{V}$ имеет локальный минимум в точке q. В этом случае кинетическая энергия в точке q будет больше, чем в любой близкой точке; если систему слегка вывести из состояния равновесия q, она не сможет уйти далеко от этого состояния, так как при этом ее кинетическая энергия и, следовательно, вектор скорости должны были бы обратиться в нуль. В соответствии с этим мы будем называть q точкой *устойчивого* равновесия. Если движение начнется вблизи такой точки (с достаточно малой начальной скоростью), то система будет оставаться около этой точки в течение всего движения.

Далее, многообразие вблизи каждой точки можно аппроксимировать касательным пространством; если же $\mathcal{M}$ представляет собой линейное пространство, и точка q расположена в начале координат, то T можно аппроксимировать тензором с постоянными коэффициентами, а функцию $\mathcal{V}$ — квадратичной формой, входящей в разложение этой функции по формуле Тейлора. Другими словами „малые“ колебания произвольной системы около точки устойчивого равновесия можно изучать как движение системы со следующими свойствами:

(1) $\mathcal{M}$ — конечномерное векторное пространство,

(2) $\mathcal{V}$ — положительно определенная квадратичная форма,

(3) T_q не зависит от q.

Такую механическую систему мы будем называть *линейной системой.*

Пусть $\mathcal{M}, \mathcal{V}, T$ образуют линейную систему. Тогда V_q в каждой точке q можно естественным образом отождествить с $\mathcal{M}$, и, следовательно, $\mathcal{M}_V = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}$ тоже является векторным пространством. Аналогично $\mathcal{M}_{V^*} = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^*$. Поскольку $\mathcal{M}_{V^*}$ является векторным пространством, оно может быть отождествлено со своим касательным пространством в произвольной точке, и ковариантное тензорное поле dW^0 сопоставляет каждой точке $\mathcal{M}_{V^*}$ некоторый билинейный функционал на $\mathcal{M}_{V^*}$. Нетрудно установить, что dW^0 постоянно и переводит (x_1, l_1, x_2, l_2) в $l_1(x_2) - l_2(x_1)$.

Если принять положительно определенную билинейную форму T за внутреннее произведение, то $\mathcal{M}$ становится конечномерным гильбертовым пространством. Пусть $\mathcal{V}^0(\varphi, \psi)$ — билинейная форма, соответствующая квадратичной форме $\mathcal{V}(\varphi) = \mathcal{V}^0(\varphi, \varphi)$. Мы можем обычным способом привести квадратичную форму $\mathcal{V}^0(\varphi, \varphi)$ „к главным осям“ относительно скалярного произведения $T(\varphi, \psi)$. Для этого заметим, что для каждого фиксированного $\varphi \in \mathcal{M}$ соответствие $\psi \to \mathcal{V}^0(\psi, \varphi)$ — линейный функционал по ψ, поэтому существует вектор φ', для которого $T(\psi, \varphi') = \mathcal{V}^0(\psi, \varphi)$; ясно, что φ' линейно зависит от φ, так что мы можем положить $\varphi' = {}^1/_2 F(\varphi)$, где F — некоторый однозначно определенный линейный оператор из $\mathcal{M}$ в $\mathcal{M}$. Поскольку

$$\mathcal{V}(\varphi) = \frac{1}{2}\, T(F(\varphi), \varphi) = \frac{1}{2}\, T(\varphi, F(\varphi)),$$

мы видим, что наша система вполне определяется заданием T и оператора F. Далее, поскольку

$$T(F(\varphi), \psi) = T(F(\psi), \varphi) = T(\varphi, F(\psi)),$$

оператор F *самосопряжен* относительно скалярного произведения T. Согласно известной теореме из линейной алгебры, в $\mathcal{M}$ существует базис $\varphi_1, \ldots, \varphi_n$, для которого $T(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_i^j$ и $F(\varphi_j) = \lambda_j \varphi_j$, где λ_j действительны и положительны; положительность, конечно, следует из положительной определенности $T(F(\varphi), \psi)$. В системе координат на $\mathcal{M}$, определенной этим базисом, имеем

$$\mathcal{V}(q_1, \ldots, q_n) = \frac{1}{2}\, \lambda_1 q_1^2 + \ldots + \frac{1}{2}\, \lambda_n q_n^2$$

и

$$\begin{aligned} H(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n) &= \\ &= \frac{1}{2}\, p_1^2 + \ldots + \frac{1}{2}\, p_n^2 + \frac{1}{2}\, \lambda_1 q_1^2 + \ldots + \frac{1}{2}\, \lambda_n q_n^2 = \\ &= \frac{1}{2}\, (p_1^2 + \lambda_1 q_1^2) + \ldots + \frac{1}{2}\, (p_n^2 + \lambda_n q_n^2). \end{aligned}$$

Поэтому уравнения Гамильтона имеют вид

$$\dot{p}_i = -\lambda_i q_i, \quad \dot{q}_i = p_i.$$

Отсюда $\ddot{q}_i = -\lambda_i q_i$ и $q_i = a_i \sin(\sqrt{\lambda_i} t - \theta_i)$, где a_i и θ_i зависят от начальных условий.

Отметим несколько следствий. В любой линейной системе:

(1) координаты q_i изменяются независимо друг от друга; система представляет собой объединение n независимых систем, у каждой из которых пространство конфигураций одномерно;

(2) координата q_i колеблется от $-a_i$ до a_i и обратно с частотой ν_i, не зависящей от начальных условий и равной $\sqrt{\lambda_i}/2\pi$;

(3) изменение начальных условий вызывает изменение только амплитуд a_i, (величин колебаний) и фаз (моментов времени, когда q_i достигает максимума и минимума), но не влияет на форму этих „простых гармонических" колебаний.

Частоты $\nu_i = \sqrt{\lambda_i}/2\pi$ называются основными, или характеристическими, частотами системы.

Следует подчеркнуть, что „нормальные координаты", которые совершают независимые простые гармонические колебания, никаким естественным образом не связаны с ортогональными координатами первоначальных частей. С другой стороны, полная энергия первоначальной системы в состоянии с нормальными координатами $(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$ равна

$$\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} (p_j^2 + \lambda_j q_j^2) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \lambda_j\, a_j^2\, [\sin^2(\sqrt{\lambda_j}\, t - \theta_j) + \cos^2(\sqrt{\lambda_j}\, t - \theta_j)] = \sum_{j=1}^{n} 2\pi^2 \nu_j^2\, a_j^2$$

и зависит только от амплитуд колебаний нормальных координат. Заметим вдобавок, что на каждой орбите движения постоянна не только полная энергия, но и каждая ее часть $2\pi^2 \nu_j^2 a_j^2$, соответствующая определенной нормальной координате. Мы можем говорить поэтому о „спектральном разложении" энергии системы на каждой определенной орбите (или в определенном состоянии). Это часто выражают с помощью *меры*, заданной на положительной части действительной оси: мера множества E равна

$$\sum_{\nu_j \in E} 2\pi^2 \nu_j^2\, a_j^2.$$

Теперь мы хотим вернуться к заданной нам линейной системе и изучить ее движение в целом, не прибегая к помощи нормальных координат. Из уравнений $\dot{q}_i = p_i$, $\dot{p}_i = -\lambda_i q_i$

мы получаем, что $\ddot{q}_i = -\lambda_i q_i$, или, в инвариантной форме, $\ddot{\varphi} = -F(\varphi)$. Это уравнение можно получить, конечно, в любой системе координат или сразу в инвариантной форме. Соответствующее уравнение первого порядка на $\mathcal{M}_V = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}$ имеет вид

$$\frac{d}{dt}(\varphi, \theta) = (\theta, -F(\varphi)).$$

Если векторное пространство рассматривается как многообразие класса C^∞, то контравариантными векторными полями на нем являются просто функции, отображающие это векторное пространство в себя; поэтому можно говорить о линейных контравариантных векторных полях. Из последнего уравнения мы видим, что динамическая группа в $\mathcal{M} \oplus \mathcal{M}$ имеет *линейную* инфинитезимальную образующую $(\varphi, \theta) \to (\theta, -F(\varphi))$. Отсюда сразу же следует, что динамическая группа в $\mathcal{M}_{V^*} = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^*$ также линейна (поскольку каноническое отображение $\mathcal{M}_V$ в $\mathcal{M}_{V^*}$ линейно).

Пусть X — конечномерное действительное векторное пространство, и A — произвольное линейное преобразование X в X. Для любого полинома P с действительными коэффициентами мы можем образовать $P(A)$ с помощью формальной подстановки и получим таким образом гомоморфизм $P \to P(A)$ кольца всех полиномов на подкольцо кольца всех линейных преобразований X в X.

Более общим образом для любой действительной функции $f(x)$, разлагающейся во всюду сходящийся степенной ряд $a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots$ соответствующий ряд $a_0 I + a_1 A + a_2 A^2 + \ldots$, как нетрудно видеть, также сходится и дает нам вполне определенный оператор $f(A)$. Соответствие $f \to f(A)$ — снова гомоморфизм колец. В частности, e^{tA} имеет смысл для всех действительных t и удовлетворяет тождеству $e^{(t_1+t_2)A} = e^{t_1 A} \cdot e^{t_2 A}$. Таким образом, $t \to e^{tA}$ — однопараметрическая группа невырожденных линейных преобразований X в X. Она, конечно, является группой класса C^∞, если рассматривать X как многообразие класса C^∞, и ее инфинитезимальной образующей служит *линейное* контравариантное векторное поле $\varphi \to A(\varphi)$.

Таким образом, группа $t \to e^{At}$ дает явное решение дифференциального уравнения, определяемого произвольным линейным контравариантным векторным полем A. Почти очевидно, что любая однопараметрическая группа класса C^∞ невырожденных линейных преобразований имеет линейную инфинитезимальную образующую; на самом деле можно показать, что любая однопараметрическая группа линейных преобразований, по крайней мере измеримая по t, принадлежит классу C^∞.

В рассматриваемом случае наша динамическая группа сохраняет некоторое положительно определенное скалярное произведение [11]):

$$((\varphi, \theta)|(\varphi, \theta)) = H(\varphi, \theta) = \frac{1}{2}\,T(F(\varphi), \varphi) + \frac{1}{2}\,T(\theta, \theta).$$

Мы можем вообще найти условия, при которых e^{At} сохраняет некоторое скалярное произведение $(\varphi|\psi)$ в X. Из элементарной теории векторных пространств известно, что $(B\varphi|B\psi) = (\varphi|\psi)$ для всех φ и ψ тогда и только тогда, когда $B^* = B^{-1}$; оператор B, обладающий этим свойством, называется ортогональным (относительно заданного скалярного произведения). Далее, как всегда в операторном исчислении, $f(A^*) = (f(A))^*$, так что оператор e^{At} ортогонален тогда и только тогда, когда $e^{A^* t} = (e^{At})^{-1} = e^{(-A)t}$. Итак, $t \to e^{At}$ — однопараметрическая группа ортогональных преобразований тогда и только тогда, когда $A^* = -A$, т. е. когда A *кососимметричен*.

Пусть A — произвольный невырожденный кососимметрический оператор. Тогда A^2 симметричен, т. е. самосопряжен. Более того,

$$(-A^2\varphi|\psi) = (-A\varphi|A^*\varphi) = (A^*\varphi|A^*\varphi) > 0,$$

т. е. $-A^2$ не только самосопряжен, но имеет только положительные собственные значения. Поэтому $-A^2 = B^2$, где B самосопряжен, имеет только положительные собственные значения и коммутирует со всеми операторами, которые коммутируют с A. Положим $J = AB^{-1}$; тогда $J^2 = -I, J^* = -J$ и J коммутирует с A. Превратим X в комплексное

[11]) Скалярное произведение векторов ξ и η в гильбертовом пространстве всюду в этой книге обозначается символом $(\xi|\eta)$. — *Прим. перев.*

векторное пространство, положив $i\varphi = J(\varphi)$; тогда A будет линейным оператором в этом комплексном пространстве. Положим

$$(\varphi|\psi)_1 = (\varphi|\psi) - i(J\varphi|\psi);$$

тогда

$$(\varphi|\psi)_1 = \overline{(\psi|\varphi)}_1, \quad (\varphi|\varphi)_1 = (\varphi|\varphi) > 0 \text{ для } \varphi \neq 0,$$

и

$$(i\varphi|\psi)_1 = (J\varphi|\psi) - i(J^2\varphi|\psi) = i(\varphi|\psi) + (J\varphi|\psi) = i(\varphi|\psi)_1.$$

Поэтому $(\varphi|\psi)_1$ — скалярное произведение, которое превращает X в *комплексное* конечномерное гильбертово пространство. Поскольку

$$(Je^{At}\varphi|e^{At}\psi) = (e^{At}J\varphi|e^{At}\psi) = (J\varphi|\psi),$$

группа e^{At} оставляет форму $(\varphi|\varphi)_1$ инвариантной и является, таким образом, однопараметрической группой *унитарных преобразований*. Инфинитезимальный оператор A кососопряжен (т. е. $A^* = -A$) относительно $(\varphi|\varphi)_1$, и мы можем положить $A = iB$, где B самосопряжен.

Подведем итог. Инфнитезимальной образующей однопараметрической группы ортогональных преобразований в конечномерном действительном гильбертовом пространстве X является кососимметрический линейный оператор A. Если A невырожден, то можно превратить X в комплексное гильбертово пространство таким образом, что старое действительное скалярное произведение будет действительной частью нового комплексного скалярного произведения, а A по-прежнему будет кососимметричным и линейным. Умножение на i в X можно определить так, что $-iA$ будет положительно определенным самосопряженным оператором, и этим условием комплексная структура определяется однозначно.

Мы можем считать, что наша динамическая система определяется заданием конечномерного действительного гильбертова пространства X и самосопряженного оператора F на $\mathcal{M}$, причем гамильтонианом системы служит функция

$$(\varphi, \theta) \to \frac{1}{2}(\theta|\theta) + \frac{1}{2}(F(\varphi)|\varphi) \text{ на } \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}.$$

В действительном векторном пространстве мы можем, конечно, не учитывать разницу между $\mathcal{M}$ и $\mathcal{M}^*$. Кососимметричная инфинитезимальная образующая A динамической группы переводит (φ, θ) в $(\theta, -F(\varphi))$, так что A^2 переводит (φ, θ) в $(\theta, -F(\theta))$. Таким образом, $-A^2$ есть в точности оператор F, очевидным образом распространенный с $\mathcal{M}$ на $\mathcal{M} \oplus \mathcal{M}$. Если $\varphi_1, \ldots, \varphi_n$ — попарно ортогональные векторы в $\mathcal{M}$, для которых $F(\varphi_j) = \lambda_j\varphi_j$, то $B^2(\varphi_j, 0) = \lambda_j(\varphi_j, 0)$ и $B(\varphi_j, 0) = \sqrt{\lambda_j}(\varphi_j, 0)$. Далее, $(\varphi_j, 0)$ ортогональны в пространстве $\mathcal{M} \oplus \mathcal{M}$, рассматриваемом как комплексное гильбертово пространство. Поэтому самосопряженный оператор $-iA$ имеет числа $\sqrt{\lambda_j} = 2\pi\nu_j$ своими собственными значениями. Таким образом, мы можем превратить фазовое пространство нашей системы в комплексное гильбертово пространство так, что

(1) значение гамильтониана на каждом векторе равно половине квадрата нормы;

(2) динамическая группа является однопараметрической группой унитарных преобразований;

(3) если записать эту группу в форме $t \to e^{2\pi itB}$, то собственными значениями самосопряженного оператора B будут основные частоты системы.

Если бы мы попытались распространить содержание разд. 1.3 на системы с бесконечным числом степеней свободы — колеблющиеся струны, мембраны и т. п., — то мы встретили бы трудности технического характера, возникающие из-за отсутствия достаточно общей теории единственности для уравнений с частными производными, а также из-за отсутствия очевидной „естественной“ топологии в соответствующих бесконечномерных пространствах. С другой стороны, сравнительно высоко развитая теория линейных операторов в бесконечномерных векторных пространствах позволяет провести достаточно полное обобщение результатов, полученных выше в настоящем разделе. Получающаяся при этом теория применима к описанию „малых“ колебаний в сплошных средах, а также электромагнитного поля и, по крайней мере формально, очень близко примыкает к квантовой механике.

Мы начнем с краткого обзора (без доказательств) некоторых основных фактов математической теории линейных операторов в гильбертовом пространстве. Пусть X — вещественное или комплексное гильбертово пространство, которое теперь уже не предполагается обязательно конечномерным. Пусть $(\varphi|\psi)$ — скалярное произведение в X, т. е. функция двух переменных, линейная по первому переменному и такая, что $(\varphi|\varphi) > 0$ для $\varphi \neq 0$ и $(\varphi|\psi) = \overline{(\psi|\varphi)}$. Мы будем предполагать, что X — *сепарабельное* гильбертово пространство в том смысле, что оно является полным и сепарабельным метрическим пространством относительно метрики $\rho(\varphi,\psi) = \sqrt{(\varphi-\psi|\varphi-\psi)}$. Эти условия, конечно, автоматически удовлетворяются, если X конечномерно. Нам будут нужны линейные операторы, которые не определены всюду на X и не непрерывны. Однако мы будем обычно рассматривать только такие операторы, область определения которых плотна в X (т. е. имеет своим замыканием все X). Нетрудно проверить, что линейный оператор непрерывен тогда и только тогда, когда он ограничен в том смысле, что отношение $\|T(\varphi)\|/\|\varphi\|$ ограничено, когда φ пробегает все ненулевые элементы X. Если ограниченный линейный оператор определен на плотном множестве, то он имеет единственное ограниченное расширение на все пространство X. Мы будем поэтому предполагать, если не оговорено противное, что все линейные ограниченные операторы определены всюду.

Для фиксированного $\psi \in X$ соответствие $\varphi \to (\varphi|\psi)$ задает непрерывное линейное отображение X во множество комплексных чисел, т. е. непрерывный линейный функционал на X. Можно доказать, обратно, что каждый непрерывный линейный функционал на X представляется в таком виде, причем соответствующий элемент ψ определяется однозначно. Таким образом, имеется естественное взаимно однозначное отображение X на X^* — множество всех непрерывных функционалов на X. Пусть T — любой ограниченный оператор на X; тогда функция $\varphi \to (T(\varphi)|\psi)$ линейна и непрерывна при каждом фиксированном ψ. Поэтому для каждого ψ существует единственный элемент ψ^*, такой что $(T(\varphi)|\psi) = (\varphi|\psi^*)$ для всех $\varphi \in X$; элемент ψ^* линейно зависит от ψ; это линейное преобразование обозначается через T^* и называется сопряженным к T. Ясно, что оператор T^* ограничен и что $T^{**} = T$. Как и в конечномерном случае T называется самосопряженным, если $T^* = T$, и кососопряженным, если $T^* = -T$. Так же, как и в конечномерном случае, T является взаимно однозначным отображением на все пространство, сохраняющим норму, тогда и только тогда, когда $T^*T = TT^* = I$, т. е. $T^* = T^{-1}$. Такие операторы T называются *унитарными*.

Интересно рассмотреть обобщение понятия самосопряженности (и кососопряженности) на такие операторы, которые не определены на всем X и не ограничены. Пусть T линеен и определен на плотном в X подпространстве D. Тогда произведение $(T(\varphi)|\psi)$ определено для всех ψ в X и всех φ в D, но уже не обязано быть непрерывным по φ при каждом фиксированном ψ, поскольку оператор T не непрерывен. С другой стороны, это произведение может оказаться непрерывным для некоторых ψ даже в том случае, когда оператор T не непрерывен.

Пусть D^* — множество всех ψ, для которых функционал $(T(\varphi)|\psi)$ непрерывен по φ. Для каждого $\psi \in D^*$ этот линейный непрерывный функционал, определенный на D, может быть однозначно продолжен на все пространство и поэтому определяет некоторый элемент ψ^* в X: $(T(\varphi)|\psi) = (\varphi|\psi^*)$. По-прежнему мы принимаем ψ^* за $T^*(\psi)$, но оператор T^* теперь не обязательно определен всюду. Если $D^* = D$ и $T(\varphi) = T^*(\varphi)$ для всех φ из $D = D^*$, мы говорим, что T самосопряжен. Кососопряженность определяется аналогично. Заметим, что выполнения условия $(T(\varphi)|\psi) = (\varphi|T(\psi))$ для всех φ и ψ из D не достаточно для самосопряженности. Из него следует только, что $D \subseteq D^*$ и $T(\varphi) = T^*(\varphi)$ для всех $\varphi \in D$. Такие операторы T называются *симметричными*.

Не всегда бывает возможно расширить область определения симметричного оператора так, чтобы он стал самосопряженным; в тех случаях, когда такое продолжение возможно, оно не всегда единственно. Симметричный оператор, который имеет единственное самосопряженное расширение, называется *существенно самосопряженным*. Если $X = \mathfrak{L}^2(-\infty,+\infty)$, и T — оператор, который ставит в соответствие каждой непрерывно дифференцируемой функции, равной нулю вне конечного интервала, ее производную, умноженную на i, то T симметричен, но не самосопряжен. Он становится самосопряженным, если распространить его на все абсолютно непрерывные функции из $\mathfrak{L}^2(-\infty,+\infty)$, производные которых также принадлежат $\mathfrak{L}^2(-\infty,+\infty)$. Можно доказать, что самосопряженный оператор, определенный на всем X, ограничен.

Под ортогональным дополнением $M^{\perp}$ замкнутого подпространства $M \subseteq X$ понимается множество всех таких векторов θ, для которых $(\theta|\varphi) = 0$ для всех $\varphi \in M$. Можно показать, что $M^{\perp\perp} = M$ и что каждый вектор $\theta \in X$ можно единственным образом представить в виде $\theta = \theta_1 + \theta_2$, где $\theta_1 \in M$ и $\theta_1 \in M^{\perp}$. Ясно, что θ_1, „составляющая“ вектора θ в M, линейно зависит от θ. Мы пишем $\theta_1 = P_M(\theta)$. Читатель без труда докажет, что P_M — ограниченный самосопряженный оператор, который является „идемпотентным“, т. е. $P_M^2 = P_M$.

Обратно, пусть P — ограниченный линейный самосопряженный идемпотентный оператор. Тогда множество значений P совпадает с нулевым подпространством оператора $I - P$ и является замкнутым подпространством M пространства X. Поскольку

$$\varphi = P(\varphi) + (\varphi - P(\varphi))$$

и

$$(\varphi - P(\varphi)|P(\theta)) = (P(\varphi) - P^2(\varphi)|\theta) = 0,$$

мы видим, что $P = P_M$. Поэтому имеется естественное взаимно однозначное соответствие между ограниченными самосопряженными идемпотентами, с одной стороны, и замкнутыми подпространствами — с другой. По очевидным причинам самосопряженный идемпотентный оператор, ассоциированный с данным замкнутым подпространством, называется (ортогональным) *проектором* на это подпространство, и произвольный ограниченный самосопряженный идемпотентный оператор называется проектором.

Пусть P_1 и P_2 — проекторы на M_1 и M_2 соответственно. Тогда $M_1 \perp M_2$ (т. е. $M_1 \subseteq M_2^{\perp}$ и $M_2 \subseteq M_1^{\perp}$) тогда и только тогда, когда $P_1 P_2 = P_2 P_1 = 0$. Мы говорим тогда, что P_1 и P_2 ортогональны. Более общим образом, если $P_1 P_2 = P_2 P_1$, то $P_1 P_2 = P_3, P_1 - P_3, P_2 - P_3$ тоже являются проекторами: эти три проектора попарно ортогональны. Вообще если $P_1, \ldots, P_n$ — проекторы, которые попарно коммутируют между собой, то, образуя всевозможные произведения из P_j и $I - P_k$, мы получаем семейство проекторов $P_1', \ldots, P_r'$, которые попарно ортогональны, и каждый из проекторов P_j однозначно представляется в виде суммы $P_{i_1}' + \ldots + P_{i_s}'$. Отсюда следует, что каждое семейство коммутирующих проекторов порождает булеву алгебру проекторов, в которой $P_1 \cap P_2 = P_1 P_2$, $P_1 \cup P_2 = P_1 + P_2 - P_1 P_2$ и $P' = I - P$.

Пусть теперь $P_1, \ldots, P_n$ — попарно ортогональные проекторы, такие что $I = P_1 + \ldots + P_n$. Тогда каждый вектор φ в X можно однозначно представить в виде $\varphi_1 + \ldots + \varphi_n$, где φ_j лежит в подпространстве M_j, на которое проектирует P_j, именно $\varphi_j = P_j(\varphi)$. Пусть $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ — произвольные различные действительные числа. Тогда

$$A = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j P_j$$

— ограниченный самосопряженный оператор. Нетрудно видеть, что для некоторого комплексного числа λ ненулевой вектор $\theta \in X$, для которого $A(\theta) = \lambda\theta$, существует тогда и только тогда, когда λ равно одному из λ_j, и все соответствующие векторы составляют множество значений P_j. Поэтому для оператора A, представленного в указанной выше форме, λ_j и P_j определены однозначно. Когда X конечномерно, каждый самосопряженный оператор может быть представлен в такой форме, но для бесконечномерного пространства это далеко не так, даже если пользоваться бесконечными суммами. Пусть $X = \mathcal{L}^2(S, \mu)$, где μ — мера на множестве S. Пусть g — некоторая ограниченная измеримая вещественная функция на S и $A_{\mathrm{g}}(f) = \mathrm{g}f$. Тогда A_{g} — ограниченный самосопряженный оператор, причем $A_{\mathrm{g}}(f) = \lambda f$ тогда и только тогда, когда $(\mathrm{g} - \lambda)f = 0$ почти всюду на S. Если g принимает каждое свое значение только на множестве меры нуль, то $f = 0$ почти всюду и является нулевым элементом пространства X. Отсюда сразу видно, что существует много примеров ограниченных самосопряженных операторов, не имеющих ни одного собственного вектора. С другой стороны, нетрудно обобщить разложение $A = \sum \lambda_j P_j$ на любой самосопряженный оператор, если представить его несколько иначе.

Для каждого борелевского [12]) множества E на действительной прямой обозначим через P_E сумму $P_{i_1} + P_{i_2} + \ldots + P_{i_r}$, где $\lambda_{i_1}, \ldots, \lambda_{i_r} \in E$, а остальные λ_j не входят в E. Тогда соответствие $E \to P_E$ вполне определяет проекторы P_j и собственные числа λ_j.

---

[12]) Борелевские множества по определению представляют собой элементы наименьшего семейства множеств, которое содержит все открытые множества и обладает следующими двумя свойствами:

(1) дополнение любого множества из этого семейства принадлежит семейству;

(2) пересечение $A_1 \cap A_2 \cap \ldots$ любой счетной последовательности множеств из этого семейства также принадлежит семейству.

Действительно, если $\{\lambda\}$ означает множество, состоящее из одной точки λ, то $P_{\{\lambda\}} \neq 0$ тогда и только тогда, когда $\lambda = \lambda_j$ для некоторого j, и соответствующий проектор $P_{\{\lambda_j\}}$ равен P_j. Далее, это соответствие обладает следующими свойствами:

(1) $P_E P_F = P_{E \cap F}$ для всех E и F;

(2) $P_\varnothing = 0$; $P_R = I$, где R — вся действительная прямая;

(3) $P_E = P_{E_1} + P_{E_2} + \ldots$, если $E = E_1 \cup E_2 \cup \ldots$ и $E_i \cap E_j = 0$ при $i \neq j$.

Здесь $P_{E_1} + P_{E_2} + \ldots$ означает проектор P, определенный равенством $P\varphi = P_{E_1}\varphi + P_{E_2}\varphi + \ldots$ для всех $\varphi \in X$, или, что эквивалентно, проектор на замкнутое линейное пространство, порожденное подпространствами, на которые проектируют $P_1, P_2, \ldots$. Любая функция, которая ставит в соответствие борелевским множествам проекторы в некотором гильбертовом пространстве и обладает свойствами (1)–(3), называется *проекторной мерой*. Пусть $P : E \to P_E$ — произвольная проекторная мера. Тогда для каждого вектора φ из X соответствие $E \to (P_E(\varphi)|\varphi)$ будет обычной неотрицательной мерой на действительной прямой, и мы можем образовать интегралы $\int f(x)\,d\alpha(x)$, где $\alpha(E) = (P_E(\varphi)|\varphi)$. Мы будем записывать этот интеграл так: $\int f(x)\,d(P_x(\varphi)|\varphi)$. Нетрудно видеть, что для рассмотренной выше проекторной меры P, соответствующей оператору $A = \sum\limits_{j=1}^{n} \lambda_j P_j$,

$$\int x\,d(P_x(\varphi)|\varphi) = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j (P_j(\varphi)|\varphi) = (A(\varphi)|\varphi).$$

Поскольку оператор A однозначно определяется квадратичной формой $(A(\varphi)|\varphi)$, мы получили формулу, выражающую A непосредственно через проекторную меру P без введения проекторов P_j.

Пусть теперь $P : E \to P_E$ — произвольная проекторная мера, ограниченная в том смысле, что P_J — тождественный оператор для некоторого конечного интервала J. Мы можем задать квадратичную форму $B(\varphi,\varphi)$ на X, положив

$$B(\varphi,\varphi) = \int x\,d(P_x(\varphi)|\varphi)$$

для всех $\varphi \in X$. Далее можно показать, что существует единственный ограниченный самосопряженный оператор в X, такой, что

$$(A^P(\varphi)|\varphi) = B(\varphi,\varphi) = \int x\,d(P_x(\varphi)|\varphi) \text{ для всех } \varphi \text{ из } X.$$

Вообще для любой неограниченной проекторной меры P существует единственный неограниченный самосопряженный оператор A^P, определенный на множестве всех φ, для которых $\int x^2\,d(P_x(\varphi)|\varphi) < \infty$ и такой, что для всех векторов φ из этого множества

$$(A^P\varphi|\varphi) = B(\varphi,\varphi) = \int x\,d(P_x(\varphi)|\varphi).$$

Спектральная теорема представляет собой обращение этого утверждения, а именно: любой самосопряженный оператор имеет вид A^P для некоторой однозначно определенной проекторной меры P (спектральной меры данного оператора). Нетрудно показать, что оператор A^P ограничен тогда и только тогда, когда ограничена мера P. В частном случае, когда X имеет ортогональный базис $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$, состоящий из собственных векторов оператора A, т. е. $A(\varphi_j) = \lambda_j\varphi_j$, мера P сосредоточена на множестве $E = \{\lambda_1, \lambda_2, \ldots\}$, т. е. P_E — тождественный оператор в X. Обратно, если существует счетное множество $E = \{\lambda_1, \lambda_2, \ldots\}$, такое, что $P_E = I$, то X имеет базис, состоящий из собственных векторов оператора A с собственными значениями λ_j. В этом случае говорят, что A имеет *чисто точечный спектр*.

Часто бывает полезным представлять себе спектральную теорему несколько иначе. В частном случае, когда $X = \mathcal{L}^2(S,\mu)$ и $A(f) = \mathrm{g}f$, где g — действительная измеримая функция, доказательство спектральной теоремы сравнительно тривиально. Действительно, можно непосредственно убедиться в том, что соответствующая проекторная мера P сопоставляет каждому множеству E проектор $f \to \psi f$, где $\psi(s) = 1$, если $\mathrm{g}(s) \in E$, и $\psi(s) = 0$, если $\mathrm{g}(s) \notin E$. С другой стороны, этот случай не является слишком частным, как это может показаться. Можно доказать, что для заданного самосопряженного оператора A в X существует такая линейная изометрия $V : X \to \mathcal{L}^2(S, \mu)$, что VAV^{-1} имеет вид $f \to f\mathrm{g}$. Это утверждение можно рассматривать как усиленную форму спектральной теоремы, поскольку спектральная теорема непосредственно из него вытекает, но провести доказательство в обратном направлении не так просто. Читателю будет полезно убедиться в справедливости этой формы спектральной теоремы в частном случае, когда оператор A имеет чисто точечный спектр.

Пользуясь спектральной теоремой, нетрудно придать смысл выражению $\mathrm{g}(A)$, где g — действительная борелевская функция действительного переменного и оператор A самосопряжен. Пусть P — проекторная мера, соответствующая оператору A. Для каждого борелевского множества на действительной прямой положим $P'_E = P_{\mathrm{g}^{-1}(E)}$. Тогда $E \to P'_E$ — проекторная мера, и мы определяем $\mathrm{g}(A)$, как соответствующий самосопряженный оператор. Можно показать, что отображение $\mathrm{g} \to \mathrm{g}(A)$ сохраняет суммы и произведения и что оператор $\mathrm{g}(A)$ ограничен тогда и только тогда, когда функция g ограничена на дополнении некоторого множества E, для которого $P_E = 0$. В частности, $\sin tA$ и $\cos tA$ ограничены для всех действительных t и всех самосопряженных A. Поэтому оператор

$$e^{itA} = \cos tA + i \sin tA$$

определен в любом комплексном гильбертовом пространстве. Ясно, что e^{itA} — однопараметрическая группа унитарных операторов, непрерывная в том смысле, что $(e^{itA}(\varphi)|\psi)$ непрерывная функция t для всех φ и ψ из X.

Обратно, пусть $t \to U_t$ — произвольная однопараметрическая унитарная группа. Согласно фудаментальной теореме Стона, существует единственный самосопряженный оператор A, такой, что $e^{itA} = U_t$ для всех t. Итак, в бесконечномерном комплексном гильбертовом пространстве сохраняется взаимно однозначное соответствие между однопараметрическими унитарными группами и самосопряженными операторами (при этом допускаются и неограниченные операторы).

Если X — действительное гильбертово пространство, то умножение на i не имеет смысла, и мы не можем образовать e^{itA}. С другой стороны, если оператор A кососопряжен, то оператор A^2 самосопряжен, и мы можем построить $\mathrm{g}(A)$, где g — любая четная функция. Но поскольку любую функцию можно представить в виде $\mathrm{g}(x) = h_1(x) + xh_2(x)$, где h_1 и h_2 — четные, то мы можем положить $\mathrm{g}(A) = h_1(A) + Ah_2(A)$. В частности, можно построить e^{tA} и показать, что эти операторы образуют однопараметрическую группу ортогональных преобразований.

Обратно, мы можем применить теорему Стона и показать, что каждая непрерывная однопараметрическая группа ортогональных преобразований в действительном гильбертовом пространстве имеет вид e^{tA}, где оператор A кососопряжен. Наконец, если A имеет обратный оператор и самосопряжен, можно, так же как и в конечномерном случае, дополнить X до комплексного гильбертова пространства так, что A будет комплексно линейным кососопряженным оператором, и новая норма векторов будет равна старой.

Возвращаясь к физике, мы начнем изучение систем с бесконечномерным конфигурационным пространством с изучения системы, состоящей из счетного множества независимых систем, рассматриваемых как единая система. Пусть $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2, \ldots$ — конфигурационные пространства этих независимых систем, которые мы для определенности и для простоты будем считать линейными. Тогда фазовым пространством, соответствующим каждому $\mathcal{M}_j$, будет $\mathcal{M}_j \oplus \mathcal{M}_j^*$, и динамическая группа U^j будет однопараметрической группой линейных преобразований $t \to U_t^j$ в $\mathcal{M}_j \oplus \mathcal{M}_j^*$. Конфигурационным пространством объединенной системы будет при этом множество $\mathcal{M}$ всех бесконечных последовательностей $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$, где $\varphi_j \in \mathcal{M}_j$; движения в $\mathcal{M}$ описываются однопараметрической группой $t \to U_t$ в фазовом пространстве Λ всех бесконечных последовательностей $\varphi_1, l_1, \varphi_2, l_2, \ldots$, где $(\varphi_j, l_j) \in \mathcal{M}_j \oplus \mathcal{M}_j^*$, причем, конечно,

$$U_t(\varphi_1, l_1, \varphi_2, l_2, \ldots) = (U_t^1(\varphi_1, l_1), U_t^2(\varphi_2, l_2), \ldots).$$

До сих пор все обстоит благополучно. Однако, если мы пойдем дальше простого описания движения системы и попытаемся ввести гамильтониан системы или рассматривать Λ как кокасательный пучок над $\mathcal{M}$, мы встретимся с затруднениями. Пространство $\mathcal{M}$ естественным образом является векторным, но $\mathcal{M}^*$ — сопряженное пространство к $\mathcal{M}$ — не совпадает со множеством всех последовательностей $l_1, l_2, \ldots$, где $l_j \in \mathcal{M}_j^*$. Действительно,

$l_1(\varphi_1)+l_2(\varphi_2)+\ldots$ имеет смысл для всех $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ из $\mathcal{M}$ тогда и только тогда, когда $l_j = 0$ для всех j, кроме конечного числа. Таким образом, Λ, естественное фазовое пространство, не есть $\mathcal{M}\oplus\mathcal{M}^*$. Если бы у нас было только конечное число систем $(\mathcal{M}_j, U^j)$, и функция H^j была бы гамильтонианом системы $(\mathcal{M}_j, U^j)$, то функция

$$H(\varphi_1, l_1, \varphi_2, l_2, \ldots, \varphi_n, l_n) = H^1(\varphi_1, l_1) + H^2(\varphi_2, l_2) + \ldots + H^n(\varphi_n, l_n)$$

была бы гамильтонианом системы $(\mathcal{M}, U)$. Однако в нашем случае имеется бесконечное число слагаемых, и ряд, вообще говоря, не будет сходиться. Конечно, функция Гамильтона определена только с точностью до аддитивной постоянной и, подбирая эту постоянную специальным образом для каждой функции H^j, мы можем добиться того, чтобы ряд из H^j сходился на подмножестве Λ, включающем траекторию любой заданной точки. Однако, по-видимому, не существует функции H, которая бы описывала движение всей системы в целом. Лучшее, что мы можем сделать, это разложить Λ на непересекающиеся множества, которые инвариантны относительно движений, и на каждом из которых определена некоторая функция Гамильтона.

Однако теперь, чтобы перейти от одного подмножества Λ, имеющего функцию Гамильтона, к другому, придется менять полную энергию системы на „бесконечную величину". Это наводит на мысль, что только одно из этих непересекающихся множеств имеет физический смысл и что нужно принять за фазовое пространство подмножество, содержащее $0, 0, 0, \ldots$. Если это сделать, то конфигурационное пространство также сузится и станет подмножеством $\widetilde{\mathcal{M}} \subseteq \mathcal{M}$, состоящим из всех последовательностей $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$, для которых

$$\mathcal{V}^1(\varphi_1, \varphi_1) + \mathcal{V}^2(\varphi_2, \varphi_2) + \ldots < \infty,$$

где $\mathcal{V}^j$ — скалярное произведение в $\mathcal{M}_j$, определяемое потенциальной энергией. Фазовым пространством становится $\widetilde{\mathcal{M}} \oplus \widetilde{\widetilde{\mathcal{M}}}$, где $\widetilde{\widetilde{\mathcal{M}}}$ — множество всех последовательностей $l_1, l_2, \ldots$, для которых

$$T^1(l_1, l_1) + T^2(l_2, l_2) + \ldots < \infty,$$

где T^j — скалярное произведение в M_j^*, определяемое кинетической энергией. При этом $\widetilde{\widetilde{\mathcal{M}}}$ еще нельзя отождествить с сопряженным пространством к $\widetilde{\mathcal{M}}$, и мы не можем без дальнейших изменений провести рассуждения, связанные с функцией Гамильтона в конечномерном случае.

Самым существенным во всех этих рассуждениях является, конечно, тот факт, что они дают алгоритм перехода от единственной функции на фазовом пространстве к инфинитезимальной образующей динамической группы. Мы дадим сейчас такой алгоритм, применимый к некоторому классу линейных систем; этот класс включает рассматриваемый случай, а также все конечномерные линейные системы.

Пусть $\mathcal{M}$ — действительное векторное пространство, которое мы будем считать „плотным" в нашем пока еще не определенном конфигурационном пространстве. Пусть $\mathcal{V}$ и T — положительно определенные скалярные произведения на $\mathcal{M}$, которые мы считаем потенциальной и кинетической энергией соответственно. Пополняя $\mathcal{M}$ по нормам $\sqrt{\mathcal{V}(\varphi,\varphi)}$, $\sqrt{T(\varphi,\varphi)}$, $\sqrt{\mathcal{V}(\varphi,\varphi)+T(\varphi,\varphi)}$, получим соответственно гильбертовы пространства $\mathcal{M}_{\mathcal{V}}$, $\mathcal{M}_T$, $\overline{\mathcal{M}}$. Поскольку третья норма больше первых двух, каждое из первых двух пространств естественным образом является расширением $\overline{\mathcal{M}}$. Если оба эти расширения положительно определены (мы рассмотрим только этот случай), то $\mathcal{M}_{\mathcal{V}}$ и $\mathcal{M}_T$ можно рассматривать как пополнения $\overline{\mathcal{M}}$.

Пусть $\mathcal{H}$ — действительное гильбертово пространство $\mathcal{M}_{\mathcal{V}} \oplus \mathcal{M}_T$, и пусть оператор J определен следующим образом: $J(\varphi)$ определен, если $\varphi \in \overline{\mathcal{M}} \subseteq \mathcal{M}_T$, причем $J(\varphi) = \varphi$, где φ в правой части рассматривается как элемент $\mathcal{M}_{\mathcal{V}}$. Таким образом, оператор J имеет плотные область определения и множество значений, лежащие соответственно в $\mathcal{M}_T$ и $\mathcal{M}_{\mathcal{V}}$. Тогда J^* — сопряженный оператор — определен на множестве таких $\theta \in \mathcal{M}_{\mathcal{V}}$, для которых функционал $\varphi \to \mathcal{V}(J(\varphi), \theta)$ непрерывен по норме $\mathcal{M}_T$. Таким образом, $J^*(\theta)$ — единственный вектор $\theta^* \in \mathcal{M}_T$, такой, что $\mathcal{V}(J(\varphi), \theta) = T(\varphi, \theta^*)$. Нетрудно убедиться, что J^* определен на плотном подмножестве $\mathcal{M}_{\mathcal{V}}$ и что $J^{**} = J$. Заметим, что, поскольку скалярные произведения T и $\mathcal{V}$ различны, J^* ни в каком смысле не является тождественным оператором. Легко проверить, что оператор A в $\mathcal{H}$, который переводит

(φ, ψ) в $(J(\varphi), -J^*(\psi))$ (если J и J^* определены на этих векторах), кососопряжен. Группа $t \to e^{At}$, действующая в фазовом пространстве $\mathcal{H}$, и является той динамической группой, которую наш алгоритм сопоставляет „лагранжиану“ $\mathcal{V}$, T.

Нетрудно видеть, что для всех φ из $\overline{\mathcal{M}}$ мы имеем $\mathcal{V}(\varphi, \varphi) = T(J^*(\varphi), \varphi)$; поэтому ограничение J^* на $\overline{\mathcal{M}}$ — это тот самый оператор, который позволяет выразить $\mathcal{V}$ через T и который мы в конечномерном случае (см. стр. 29) обозначали через F. Для того чтобы подробнее выяснить связь предложенного выше алгоритма с нашими прежними результатами, нам удобнее будет рассмотреть другой оператор, а именно единственный самосопряженный оператор в $\overline{\mathcal{M}}$, такой, что $(K(\varphi)|\varphi) = \mathcal{V}(\varphi, \varphi)$; скалярное произведение в левой части равенства берется в смысле пространства $\overline{\mathcal{M}}$. Рассмотрим частный случай, когда K имеет чисто точечный спектр. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ — ортонормированный базис собственных векторов оператора K. Тогда для любого вектора $\varphi = q_1\varphi_1 + q_2\varphi_2 + \ldots$ из $\overline{\mathcal{M}}$, как нетрудно вычислить,

$$\mathcal{V}(\varphi, \varphi) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{q_j^2}{\mu_j},$$

где μ_j определяются из условия $K(\varphi_j) = (1/\mu_j)\varphi_j$, и

$$T(\varphi, \varphi) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{q_j^2}{m_j},$$

где m_j определяются из равенств $1/m_j + 1/\mu_j = 1$. Таким образом, мы можем выбрать базис в $\overline{\mathcal{M}}$, в котором и T и $\mathcal{V}$ приводятся к диагональному виду, и, следовательно, нашу систему можно рассматривать как совокупность независимых гармонических осцилляторов. Можно непосредственно убедиться в том, что динамическая группа, которую мы определили с помощью операторов J и J^*, совпадает с той, которая получается путем соединения динамических групп отдельных осцилляторов и сужения фазового пространства до множества тех точек $(q_1, q_2, \ldots)$, в которых полная энергия конечна.

Если $(\varphi, \psi) \in \overline{\mathcal{M}} \oplus \overline{\mathcal{M}}$ и U_t — динамическая группа, то $U_t(\varphi, \psi)$ будет дифференцируема при $t = 0$ и

$$\frac{d}{dt}(U_t(\varphi, \psi))\bigg|_{t=0} = A(\varphi, \psi) = (\psi, -J^*(\varphi)).$$

В более привычной и более краткой форме мы имеем

$$\frac{d}{dt}(\varphi, \psi) = (\psi, -J^*(\varphi)) \text{ или } \frac{d\varphi}{dt} = \psi, \quad \frac{d\psi}{dt} = -J^*(\varphi).$$

Таким образом, „вектор конфигурации“ φ удовлетворяет дифференциальному уравнению второго порядка: $d^2\varphi/dt^2 = -J^*(\varphi)$. В приложениях φ обычно является скалярной или векторной функцией в трехмерном пространстве, а J^* — дифференциальным оператором. Когда φ рассматривается как функция от переменных x, y, z, t, а не как функция от t со значениями в $\mathcal{M}$, уравнение $d^2\varphi/dt^2 = -J^*(\varphi)$ становится дифференциальным уравнением в частных производных, принимая вид $\partial^2\varphi/\partial t^2 = -J^*(\varphi)$, именно в таком виде обычно формулируются физические законы.

В таком общем виде, в каком мы получили это уравнение, его нельзя считать удовлетворительным. Для того чтобы получить из него вполне определенную динамическую группу, нужно ограничить рассматриваемый класс φ и $\partial\varphi/\partial t$ таким образом, чтобы можно было доказать соответствующие теоремы существования и единственности.

В качестве примера рассмотрим малые колебания струны, скрепленной в двух конечных точках. Здесь $\mathcal{M}$ — пространство всех дважды дифференцируемых функций на $0 \leqslant x \leqslant l$. таких, что $f(0) = f(l) = 0$; элемент $f \in \mathcal{M}$ описывает отклонение струны от прямой как функцию расстояния от левого закрепленного конца;

$$\mathcal{V}(f, f) = k \int_0^1 \left(\frac{df}{dx}\right)^2 dx$$

и

$$T(f, f) = \mu \int_0^1 f^2\, dx,$$

где k и μ — положительные константы, зависящие от материала, из которого сделана струна, и от ее натяжения. Эти выражения можно получить из законов механики системы точек, рассматривая струну как предельный случай последовательности материальных точек, расположенных вдоль прямой и определенным образом взаимодействующих между собой. Поскольку

$$\mathcal{V}(f,f) = k\int\limits_0^1 \left(\frac{df}{dx}\right)^2 dx = -k\int\limits_0^1 \frac{d^2f}{dx^2}\cdot f\,dx = -\frac{k}{\mu}\,T\left(\frac{d^2f}{dx^2}, f\right),$$

мы видим, что ограничение оператора J^* на $\mathcal{M}$ имеет вид

$$f \to -\frac{k}{\mu}\,\frac{d^2f}{dx^2}.$$

Считая теперь f функцией x и t, получаем классическое уравнение колебаний струны:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = -\frac{k}{\mu}\,\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}.$$

При изучении колебаний упругого твердого тела, занимающего конечный объем R в E^3, конфигурационное пространство $\mathcal{M}$ является множеством всех дважды дифференцируемых функций на R с векторными значениями, которые на границе R ортогональны к нормали к граничной поверхности. Элемент $f = (l_1, l_2, l_3) \in \mathcal{M}$ описывает (векторное) отклонение от положения равновесия или функцию положения точки в R. В этом случае

$$T(f,f) = \mu\int\!\!\int\limits_R\!\!\int (l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)\,dx\,dy\,dz,$$

$$\begin{aligned}\mathcal{V}(f,f) = c_1\int\!\!\int\limits_R\!\!\int &\left(\frac{\partial l_1}{\partial x} + \frac{\partial l_2}{\partial y} + \frac{\partial l_3}{\partial z}\right)^2 dx\,dy\,dz + \\ &+ c_2\int\!\!\int\limits_R\!\!\int \left[\left(\frac{\partial l_1}{\partial z} + \frac{\partial l_3}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial l_2}{\partial z} + \frac{\partial l_3}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial l_1}{\partial y} + \frac{\partial l_2}{\partial x}\right)^2 + \right. \\ &\qquad\left. +2\left(\frac{\partial l_1}{\partial x}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial l_2}{\partial y}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial l_3}{\partial z}\right)^2\right] dx\,dy\,dz,\end{aligned}$$

где μ, c_1 и c_2 зависят от материала, из которого состоит тело. Мы предоставляем читателю вывести отсюда классические уравнения колебаний.

Полученные выше формулы очевидным образом образом обобщаются на тот случай, когда имеется несколько соприкасающихся упругих сред или одна, в которой μ, c_1 и c_2 меняются от точки к точке. Аналогичные формулы описывают колебания жидкостей и газов.

Возвращаясь к общей теории, отметим, что точно так же, как в конечномерном случае, мы можем ввести умножение на t в фазовом пространстве таким образом, что динамическая группа $t \to U_t$ станет однопараметрической унитарной группой e^{itB}, где B — самосопряженный оператор.

Когда оператор B имеет чисто точечный спектр, как это обычно бывает для колебаний конечной среды, мы можем решить задачу Коши, т. е. задачу „предсказания“, следующим образом. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ — ортогональный базис собственных векторов B:

$$B(\varphi_j) = \lambda_j \varphi_j;$$

тогда

$$U_t(\varphi_j) = e^{i\lambda_j t}\varphi_j.$$

Поэтому, если состояние системы при $t = 0$ задается вектором $\theta \in \mathcal{M}_{\mathcal{V}} \oplus \mathcal{M}_T$, то вектор θ_t, соответствующий состоянию системы в момент времени t, равен $\theta_t = e^{itB}(\theta)$. Разложим вектор θ по базису $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$:

$$\theta = c_1\theta_1 + c_2\theta_2 + \ldots.$$

Тогда θ_t — единственный вектор, коэффициенты разложения которого по этому базису суть $c_1 e^{it_1 t}, c_2 e^{it_2 t}, \ldots$. Конечно, все зависит от того, удается ли на самом деле провести спектральный анализ оператора B и найти φ_j. В ряде классических задач это можно проделать совершенно явно, причем соответствующие φ_j составляют различные известные семейства ортогональных функций. Итак, когда B имеет чисто точечный спектр, движение можно проанализировать, разложив его на независимые простые гармонические колебания, точно так же, как в конечномерном случае. Однако важное отличие состоит в том, что теперь имеется бесконечное множество таких независимых колебаний.

Когда B не имеет чисто точечного спектра, мы можем применить спектральную теорему и считать, что наше гильбертово пространство отображено линейно и изометрично на конкретное пространство $\mathcal{L}^2(S,\mu)$ так, что оператор B перешел в оператор $\mathrm{g}(s) \to \lambda(s)\,\mathrm{g}(s)$, где λ — некоторая действительная функция на S. Оператор U_t при этом перейдет в оператор

$$\mathrm{g}(s) \to e^{i\lambda(s)t}\mathrm{g}(s),$$

и мы можем дать следующее правило для решения задачи Коши. Для заданного вектора θ найдем соответствующий вектор в $\mathcal{L}^2(S,\mu)$ и обозначим его $\hat{\theta}$. Тогда состоянию $U_t(\theta)$ в $\mathcal{L}^2(S,\mu)$ соответствует вектор $\hat{\theta}(s)\,e^{i\lambda(s)t}$. Во многих случаях, представляющих интерес, элементы $\mathcal{M}_T \oplus \mathcal{M}_\mathcal{V}$ являются комплексными функциями на E^3 и оператор $\theta \to \hat{\theta}$ имеет обратный „интегральный оператор“, т. е. существует функция K на $E^3 \times S$, такая, что

$$\theta(x,y,z) = \int K(x,y,z,s)\,\hat{\theta}(s)\,d\mu(s)$$

для всех θ на плотном подпространстве $\mathcal{M}_T \oplus \mathcal{M}_\mathcal{V}$. Если это имеет место, то многие траектории нашей системы, т. е. функции x, y, z и t вида $U_t(\theta)(x,y,z)$, могут быть записаны в форме

$$\int K(x,y,z,s)\,e^{i\lambda(s)t}\hat{\theta}(s)\,ds$$

и могут рассматриваться как „непрерывные суперпозиции“ функций вида

$$K(x,y,z,s_0)\,e^{i\lambda(s_0)t}.$$

Если T и $\mathcal{V}$ инвариантны относительно переноса вращений пространства, то эти основные функции принимают вид

$$e^{i[ax+by+cz-G(a^2+b^2+c^2)t]};$$

в этом случае S — множество всех троек a, b, c, а функция G зависит от B. С помощью соответствующего поворота функцию

$$e^{i[ax+by+cz-G(a^2+b^2+c^2)t]}$$

можно привести к виду

$$e^{i[lx-G(l^2)t]},$$

где $a^2+b^2+c^2=l^2$. При фиксированном x это — простое гармоническое колебание с частотой $G(l^2)/2\pi$. При фиксированном t действительная и мнимая части этого выражения — косинусоидальная и синусоидальная „волны“ с длиной волны $2\pi/l$; при изменении t эти „волны“ движутся в направлении возрастания x со скоростью $G(l^2)/l$. В общем случае эти функции

$$e^{i[ax+by+cz-G(a^2+b^2+c^2)t]}$$

называются „плоскими волнами“, распространяющимися в направлении вектора (a,b,c) со скоростью

$$G(a^2+b^2+c^2)/\sqrt{a^2+b^2+c^2},$$

и имеющими длину волны

$$2\pi/\sqrt{a^2+b^2+c^2}.$$

Таким образом, движение нашей системы можно представить в виде суперпозиции плоских волн, распространяющихся в различных направлениях и имеющих разную длину волны.

Вообще говоря, скорость будет также меняться с изменением длины волны, но есть несколько важных частных случаев, когда $G(v) = \sqrt{v}$, и, следовательно, имеется единственная „скорость волны“. В этом случае „центр“ локального возмущения рассматриваемой среды будет двигаться с той же самой скоростью. Если скорость распространения зависит от длины волны, то центр локального возмущения может двигаться со скоростью, отличной от скоростей всех волн, входящих в суперпозицию, даже если все эти скорости близки друг к другу. В этом случае „групповая“ скорость w равна

$$w = v - \lambda \frac{dv}{d\lambda},$$

где $v(\lambda)$ — волновая скорость плоской волны длины λ. Все эти утверждения можно обосновать с помощью строгого анализа, который, однако, увел бы нас слишком далеко в сторону.

Если мы рассматриваем волны в бесконечной упругой среде, то все эти результаты сохраняют силу, но основные плоские волны имеют своими значениями векторы. Оказывается, что здесь возможны два случая. Когда вектор перпендикулярен направлению распространению волны, волна называется *поперечной*, а когда параллелен — *продольной*. Волновая скорость не зависит от длины волны, но различна для продольной и поперечной волн.

В заключение этого раздела мы вкратце расскажем, как следует обобщить эти рассуждения, чтобы включить электромагнитную теорию света. Природа света являлась предметом споров на протяжении всей истории физики. В 1800 г. казалось, что можно большинство явлений объяснить и с помощью гипотезы о свете как о потоке быстро движущихся чрезвычайно малых частиц, и с помощью гипотезы о волновой природе света. С другой стороны, ни одна из гипотез не давала вполне удовлетворительного объяснения всех явлений. Однако главным образом благодаря работе Юнга и Френеля в 1801–1827 гг. все должны были в большей или меньшей степени согласиться с тем, что свет представляет собой поперечные волны в некоторой неизвестной среде.

В следующие сорок лет было потрачено много усилий на то, чтобы определить природу этой среды, которая была названа эфиром. Тот факт, что волны должны были быть поперечными, было очень трудно согласовать с тем фактом, что среда, в которой распространяется свет, совершенно отлична от упругого тела. Далее, в соответствии с теорией распространения волн в упругой среде каждый раз, когда поперечная волна пересекает границу раздела двух сред, должна возникать также продольная волна, но никаких экспериментальных подтверждений существования продольных волн найдено не было. Эта трудность была лишь одной из тех, с которыми столкнулся — по крайней мере с математической точки зрения — Мак-Куллоф в 1839 г. Он показал, что волны будут распространяться в упругой твердой среде так же, как распространяются, судя по наблюдениям, световые волны, если принять, что функция потенциальной энергии имеет вид, отличный от указанного выше, а именно равна

$$a \int\!\!\int\!\!\int \left[\left(\frac{\partial l_z}{\partial y} - \frac{\partial l_y}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial l_x}{\partial z} - \frac{\partial l_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial l_y}{\partial x} - \frac{\partial l_x}{\partial y} \right)^2 \right] dx\, dy\, dz.$$

В частности, в этом случае на поверхности раздела не возникает продольных волн. Однако физические трудности оставались, и работа Мак-Куллофа долгое время не была признана. Мы упомянули ее потому, что по математической форме ее результат совпадает с полученным в окончательной теории. Заметим, что потенциал Мак-Куллофа отличается от потенциала настоящего упругого твердого тела тем, что в нем вместо компонент симметрической части тензора перемещений

$$\begin{Vmatrix} \dfrac{\partial l_x}{\partial x} & \dfrac{\partial l_x}{\partial y} & \dfrac{\partial l_x}{\partial z} \\ \dfrac{\partial l_y}{\partial x} & \dfrac{\partial l_y}{\partial y} & \dfrac{\partial l_y}{\partial z} \\ \dfrac{\partial l_z}{\partial x} & \dfrac{\partial l_z}{\partial y} & \dfrac{\partial l_z}{\partial z} \end{Vmatrix}$$

используются компоненты антисимметрической части этого тензора.

Окончательный ответ в девятнадцатом веке на вопрос о природе света был дан только после развития Фарадеем и Максвеллом теории электромагнитного поля.

К 1800 г. были известны факты о притяжении и отталкивании заряженных тел и магнитов и разработаны отдельные математические теории электростатики и магнитостатики. Однако то важнейшее открытие, что изменяющееся электрическое поле индуцирует магнитное поле и обратно, было еще впереди. Только в 1800 г. Вольта построил электрическую батарею и тем самым дал возможность экспериментаторам пользоваться постоянным электрическим током. Двадцать лет спустя Эрстед открыл, что ток, идущий по проволоке, может вызывать отклонение магнитной стрелки, а в 1825 г. Ампер опубликовал известный мемуар, в котором давалась полная количественная теория этого явления.

Следующий значительный шаг был сделан Фарадеем, который в 1832 г. показал, что в проволоке, передвигаемой вблизи магнита, возбуждается электрический ток. Фарадей играл основную роль в развитии физики в течение длительного последующего периода вплоть до 1855 г., когда этими вопросами начал заниматься Максвелл. И Фарадей и Максвелл рассматривали электромагнитные явления с точки зрения „полей“, т. е. в центре их внимания находились силовые поля, вызываемые зарядами, магнитами и. т. д., а не сами эти объекты. Оказалось, что потенциальную энергию системы, в которой силы вызываются взаимодействием зарядов, можно выразить в виде интеграла

$$\frac{k}{8\pi}\iiint(E_x^2+E_y^2+E_z^2)\,dx\,dy\,dz,$$

где E_x, E_y, E_z — компоненты электрического поля, а k — диэлектрическая постоянная окружающей среды. Аналогичным образом потенциальную энергию, соответствующую системе магнитов, можно записать в виде интеграла

$$\frac{\mu}{8\pi}\iiint(H_x^2+H_y^2+H_z^2)\,dx\,dy\,dz,$$

где H_x, H_y, H_z — компоненты магнитного поля, а μ — магнитная проницаемость среды.

Максвелл и Фарадей рассматривали электромагнитное поле как некоторую возмущенную упругую среду и показали, что электромагнитные явления можно описывать как взаимодействие между веществом и полем, причем последнее рассматривается как механическая система с бесконечным числом степеней свободы, подобная упругому твердому телу.

Максвелл сделал чрезвычайно важное теоретическое открытие, предугадав, что так же, как существует магнитное поле, индуцированное электрическим током, должно существовать магнитное поле, индуцированное меняющимся электрическим полем E. Он пришел к выводу, что поле H должно определяться формулой

$$\mathrm{rot}H=\frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t}.$$

Если добавить это соотношение к уже известным, то получится знаменитая система уравнений Максвелла, определяющая изменение во времени электромагнитного поля. В пустом пространстве, свободном от зарядов и токов, она имеет вид

$$\begin{aligned} &\mathrm{rot}E=-\frac{1}{c}\frac{\partial H}{\partial t}, &\qquad &\mathrm{rot}H=\frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t},\\ &\mathrm{div}E=0, & &\mathrm{div}H=0, \end{aligned}$$

где c — константа. Нетрудно исключить E или H из этих уравнений и получить следующие уравнения:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial^2 x}+\frac{\partial^2 H}{\partial^2 y}+\frac{\partial^2 H}{\partial^2 z}=\frac{1}{c}\frac{\partial^2 H}{\partial^2 t}$$

и

$$\frac{\partial^2 E}{\partial^2 x}+\frac{\partial^2 E}{\partial^2 y}+\frac{\partial^2 E}{\partial^2 z}=\frac{1}{c}\frac{\partial^2 E}{\partial^2 t}.$$

Отсюда нетрудно видеть, что электромагнитное возмущение распространяется волновым образом со скоростью c. Величина c оказалась равной скорости света, и Максвелл предположил, что свет на самом деле представляет собой колебания электромагнитного поля. Эта точка зрения (с модификациями, обусловленными квантовой механикой) является общепринятой до настоящего времени.

Нетрудно связать теорию Максвелла свободного электромагнитного поля с основным содержанием этого раздела. Обозначим через $\mathcal{M}\{E\}$ векторное пространство всех дважды дифференцируемых функций с векторными значениями на трехмерном пространстве, таких, что

$$\frac{1}{4}\pi\iiint(E_x^2+E_y^2+E_z^2)\,dx\,dy\,dz<\infty \text{ и } \mathrm{div}E=0.$$

Положим

$$\mathcal{V}(E,E)=\frac{1}{4}\pi\iiint(E_x^2+E_y^2+E_z^2)\,dx\,dy\,dz$$

и

$$T(H,H)=\frac{1}{4}\pi\iiint(H_x^2+H_y^2+H_z^2)\,dx\,dy\,dz,$$

где H — векторное поле, однозначно определяемое следующими условиями:

$$\mathrm{rot}H=\frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t},\quad \iiint(H_x^2+H_y^2+H_z^2)\,dx\,dy\,dz<\infty,$$
$$\mathrm{div}H=0,$$

Действительное гильбертово пространство и однопараметрическая группа ортогональных преобразований этого пространства, построенные так же, как на стр. 36, приводят к „законам движения“ для E, которые превращаются в уравнения Максвелла, если при дифференцировании мы по определению примем за H величину

$$\frac{1}{c}\,\mathrm{rot}^{-1}\frac{\partial E}{\partial t}.$$

В определенной таким образом „механической системе“ энергия электрического поля превращается в потенциальную энергию, энергия магнитного поля — в кинетическую энергию. Вместо того, чтобы принимать за основу E, мы можем выразить все величины через $A=\mathrm{rot}^{-1}(E)$, где $\mathrm{div}A=0$. Тогда кинетическая энергия будет равна

$$\frac{1}{4}\pi\iiint\left[\left(\frac{\partial A_y}{\partial z}-\frac{\partial A_z}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial A_z}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial z}\right)^2+\left(\frac{\partial A_x}{\partial y}-\frac{\partial A_y}{\partial x}\right)^2\right]dx\,dy\,dz.$$

Таким образом, мы видим, почему приемлем метод Мак-Куллофа.

Для нас очень важно, что математический анализ динамической группы механической системы оказывается вполне применимым и к изучению электромагнитного поля, поскольку он зависит только от того, что инфинитезимальная образующая этой группы имеет некоторую определенную форму. В частности, мы можем говорить об импульсе и моменте импульса поля и, если поле сосредоточено в конечной области пространства, рассматривать его как систему (бесконечного числа) независимых гармонических осцилляторов.

1.5 Статистическая механика

При изучении механической системы с очень большим числом частиц, например макроскопической физической системы, состоящей из огромного количества чрезвычайно малых „атомов“, движущихся по законам классической механики, невозможно определить состояние системы в обычном смысле слова, т. е. найти все координаты и скорости частиц. Эксперименты, которые мы можем ставить, дают нам только частичную информацию о состоянии системы, и самое большее, на что мы можем рассчитывать, — это найти вероятность, с которой система находится в произвольной заданной области фазового пространства $\mathcal{M}_{V^*}$. Мы должны расширить понятие состояния таким образом, чтобы включить в него эти вероятностные распределения и заменить механическую задачу — изучить, как перемещаются с течением времени точки в $\mathcal{M}_{V^*}$, — задачей „статистической механики“ — изучить, как меняются со временем вероятностные меры в $\mathcal{M}_{V^*}$.

Обозначим через $\mathcal{A}(\mathcal{M}_{V^*})$ множество всех вероятностных мер на $\mathcal{M}_{V^*}$, т. е. счетно аддитивных мер α, определенных на всех борелевских подмножествах $\mathcal{M}_{V^*}$ и таких, что мера всего $\mathcal{M}_{V^*}$ равна 1. Если $\alpha \in \mathcal{A}(\mathcal{M}_{V^*})$ задает состояние нашей системы при $t = 0$, и $t \to U_t$ — диинамическая группа нашей системы, то вероятность того, что состоянию нашей системы при $t = t_1$ соответствует точка q из борелевского множества E, в точности равна вероятности того, что состоянию системы при $t = 0$ соответствовала точка q из множества $U_{t_1}^{-1}(E)$; таким образом, состояние при $t = t_1$ задается вероятностной мерой $E \to \alpha\left(U_{t_1}^{-1}(E)\right)$. Обозначим эту меру $\hat{U}_{t_1}(\alpha)$. Тогда мы получим однопараметрическую группу $t \to \hat{U}_t$ взаимно однозначных преобразований обобщенного фазового пространства $\mathcal{A}(\mathcal{M}_{V^*})$ на себя. В статистической механике вместо U_t изучают $\hat{U}_t$.

На $\mathcal{M}_{V^*}$ определена некоторая естественная мера, которую мы будем называть мерой Лиувилля и которая играет важную роль в этой теории. Если $(q_1, \ldots, q_n)$ — система координат для открытого подмножества $\mathcal{O} \subset \mathcal{M}_{V^*}$ и $(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$ — соответствующая система координат для $\pi^{-1}(\mathcal{O})$, то обычная лебегова мера в E^{2n} определяет некоторую меру в $\pi^{-1}(\mathcal{O})$. Можно проверить, что эта мера не зависит от выбора координат q_i; единственной мерой на $\mathcal{M}_{V^*}$, которая совпадает с такой мерой на каждом множестве $\pi^{-1}(\mathcal{O})$, является мера Лиувилля. Мы будем обозначать ее λ. Ее можно определить, конечно, сразу же инвариантным образом, исходя из основного тензора dW^0. Из этого определения почти непосредственно следует, что λ инвариантна при контактных преобразованиях, т. е. $\lambda(E) = \lambda(A(E))$, если A — некоторое контактное преобразование. В частности, если $t \to U_t$ — динамическая группа нашей системы, то $\lambda(U_t(E)) = \lambda(E)$ для всех t и E.

Пусть ρ — произвольная неотрицательная борелевская функция на $\mathcal{M}_{V^*}$, такая что

$$\int\limits_{\mathcal{M}_{V^*}} \rho \, d\lambda = 1.$$

Положим

$$\alpha_\rho(E) = \int\limits_E \rho \, d\lambda.$$

Тогда α_ρ является вероятностной мерой на $\mathcal{M}_{V^*}$ и, следовательно, определяет некоторое состояние. Состояния такого вида называются состояниями с вероятностной плотностью ρ. Имеется достаточно оснований считать, что они имеют „большую физическую реальность" по сравнению с другими состояниями. Из теоремы Лиувилля (т. е. из инвариантности λ) сразу же следует, что $\hat{U}_t(\alpha)$ имеет вероятностную плотность для всех t, если ее имеет α. Действительно, непосредственные вычисления показывают, что $\hat{U}_t(\alpha_\rho) = \alpha_{\rho'}$, где $\rho'(q) = \rho(U_t^{-1}(q))$. Если ρ_0 дифференцируема, и мы положим

$$\rho(t, q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n) = \rho_0(U_t^{-1}(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)),$$

то ρ удовлетворяет дифференциальному уравнению с частными производными

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho}{\partial q_1}\frac{\partial H}{\partial p_1} - \ldots - \frac{\partial \rho}{\partial q_n}\frac{\partial H}{\partial p_n} + \frac{\partial \rho}{\partial p_1}\frac{\partial H}{\partial q_1} + \ldots + \frac{\partial \rho}{\partial p_n}\frac{\partial H}{\partial q_n}.$$

Дифференциальный оператор, стоящий в правой части равенства, является инфинитезимальной образующей однопараметрической группы преобразований функций ρ, которую порождает $\hat{U}$. Это уравнение является аналогом в классической статистической механике уравнения Шредингера в квантовой механике.

Нас будут особенно интересовать „стационарные" состояния, т. е. состояния, которые не меняются со временем. Если, например, вероятностная плотность ρ является одновременно интегралом, то α_ρ будет стационарным состоянием. Мы введем теперь некоторое однопараметрическое семейство состояний, которые называются *каноническими ансамблями Гиббса* и играют основную роль в статистической термодинамике. Мы приходим к этому семейству состояний, отвечая на следующий вопрос: какое состояние соответствует минимуму информации, которую мы можем получить о нашей системе, при заданном ожидаемом значении энергии, т. е. при заданном значении интеграла $\int \rho H \, d\lambda$. Такой вопрос имеет смысл только в том случае, когда у нас есть какой-то способ измерения степени неопределенности состояния. Этот способ подсказывается теорией информации, в которой степень неопределенности, соответствующая множеству из n возможностей, j-я из которых осуществляется с вероятностью p_j, измеряется величиной

$$p_1 \log \frac{1}{p_1} + \ldots + p_n \log \frac{1}{p_n}.$$

Те же соображения, которые приводят в теории информации к этой формуле, позволяют использовать для наших целей выражение $\int \rho \log(1/\rho)\, d\lambda$, если принять, быть может, несколько сомнительное предположение, что (бесконечная) мера λ характеризует полную и абсолютную неопределенность. Мы, во всяком случае, будем следовать этому общепринятому предположению (которое оправдывается получаемыми с его помощью результатами) и примем указанный выше интеграл за меру неопределенности.

Легко показать, что функция ρ, максимизирующая интеграл $\int \rho \log(1/\rho)\, d\lambda$ при заданном $\int \rho H\, d\lambda = E$, имеет вид $\rho = Ae^{-H/B}$, где A и B — константы. Конечно, поскольку α_ρ должна быть вероятностной мерой, должно выполняться равенство $A\int e^{-H/B}\, d\lambda = 1$, так что плотность ρ должна иметь вид

$$\frac{e^{-H/B}}{\int e^{-H/B}\, d\lambda},$$

где B выбирается так, чтобы выполнялось условие

$$E = \frac{\int He^{-H/B}\, d\lambda}{\int e^{-H/B}\, d\lambda}.$$

В системах, которые нас в первую очередь будут интересовать, H будет удовлетворять следующим условиям:

(a) $H \geqslant 0$;

(b) $P(B) = \int e^{-H/B}\, d\lambda$ и существует при всех $B > 0$;

(c) $\int He^{-H/B}\, d\lambda$ существует при всех $B > 0$;

(d) $\dfrac{\int He^{-H/B}\, d\lambda}{P(B)}$ — неограниченная неубывающая функция от B.

При этих предположениях, положив

$$E(B) = \frac{\int He^{-H/B}\, d\lambda}{P(B)},$$

мы увидим, что для каждого значения E существует в точности одно значение B, такое, что $\rho = e^{-H/B}/P(B)$ удовлетворяет требуемым условиям. Мы будем называть его *каноническим состоянием Гиббса* для заданного значения E. Значение $\int \rho \log(1/\rho)\, d\lambda$ при $\rho = e^{H/B}/P(B)$ оказывается равным $\log P(B) + E(B)/B$. Если система удовлетворяет условиям (a)–(d), можно вычислить действительные функции $P(B), E(B)$ и $S(B) = \log P(B) + E(B)/B$, и возникает вопрос относительно физического смысла этих функций и в особенности параметра B.

Предположим, что мы имеем две независимые системы с гамильтонианами H_1 и H_2 в состояниях, определяемых параметрами B_1 и B_2 соответственно. Тогда объединенная система будет находиться в состоянии с плотностью

$$\frac{e^{-(H_1/B_1+H_2/B_2)}}{P_1(B_1)\, P_2(B_2)},$$

которое будет каноническим состоянием Гиббса тогда и только тогда, когда $B_1 = B_2$. Если $B_2 > B_1$, то единственное состояние Гиббса

$$\frac{e^{(H_1+H_2)/B}}{P(B)},$$

для которого $E(B) = E_1(B_1) + E_2(B_2)$, будет определяться параметром B, таким, что $B_2 > B > B_1$, т. е. мы будем иметь $E_1(B) > E_1(B_1)$ и $E_2(B) < E_2(B_2)$. Для того чтобы получилось состояние Гиббса, энергия должна перетекать из второй системы в первую до тех пор, пока B не сравняются. Таким образом, отношение B и $E(B)$ напоминает отношение температуры и количества тепла, содержащегося в материальном теле.

Напомним вкратце основные факты, относящиеся к понятиям температуры и количества тепла. Наше обычное представление о тепле и холоде можно уточнить, используя свойство большинства веществ расширяться при нагревании. Выбрав произвольно одно из веществ (например, ртуть) как некоторый стандарт, можно измерить разность температур по расширению или сокращению образца из выбранного вещества в „термометре“. То, что построенная таким образом шкала может зависеть от природы выбранного вещества, представляет собой лишь временную трудность; ниже будет показано, как ее можно преодолеть. Когда вещества с различной температурой приходят в соприкосновение, то их температуры меняются до тех пор, пока они не достигнут некоторого общего среднего значения. Это среднее значение зависит от относительного количества данных веществ: чем больше будет вещества с более высокой температурой, тем выше будет конечная температура, и обратно.

Точные измерения доказывают целесообразность введения более или менее точного понятия количества тепла, причем за единицу количества тепла принято тепло, требуемое для нагревания стандартного количества стандартного вещества от некоторой стандартной температуры до другой стандартной температуры. Когда тепло переходит от одного тела к другому, количество тепла, потерянное одним телом, равно количеству тепла, полученному другим. Заметим, что если мы для измерения количества тепла используем стандартное вещество, температуру которого нужно поднять в некотором стандартном интервале, то нам нигде не приходится сталкиваться с тем, что из-за произвольности в выборе температурной шкалы мы располагаем только сомнительным способом сравнения двух разностей температур.

Сказанное выше относительно сохранения количества тепла применимо только постольку, поскольку потенциальная энергия механических систем не меняется в процессе расширения и сжатия. Например, если газ, расширяясь, поднимает некоторый груз, он будет охлаждаться, хотя никакое другое тело при этом не нагревается. С другой стороны, когда некоторая система, консервативная в других отношениях, теряет энергию из-за „трения“, то трущиеся материальные тела всегда нагреваются, а ни одно из окружающих тел не охлаждается. Одним из величайших открытий середины девятнадцатого века является количественный закон сохранения энергии, связывающий изменения тепловой и механической энергии. Когда энергия теряется при трении, количество выделившегося тепла прямо пропорционально количеству потерянной энергии. Более того, та же самая константа пропорциональности появляется при переходе тепловой энергии в механическую при расширении. Это открытие, естественно, весьма укрепило позиции тех, кто связывал повышение температуры с усилением невидимого движения атомов вещества, и эта точка зрения стала общепринятой.

Хотя тепловая энергия является одной из форм механической энергии, ее нельзя свободно превратить в последнюю, и она представляет собой сравнительно „бесполезную“ форму энергии. Тепловую энергию можно обратить в механическую, только „заплатив“ за это некоторым образом; в частности, нельзя построить систему, меняющуюся по замкнутому циклу так, что единственным результатом этого изменения служит переход тепловой энергии в механическую. Этот принцип можно точно сформулировать несколькими различными способами, которые в совокупности известны как *второй закон термодинадинамики.*

Можно утверждать, что если некоторая „обратимая тепловая машина“ работает в интервале между двумя температурами, поглощая тепло при более высокой температуре T_1', отдавая некоторую его часть при более низкой температуре T_2' и превращая некоторую его часть f в механическую энергию, то f не зависит от устройства машины, а зависит только от рассматриваемых температур. Нетрудно убедиться, что существует некоторая монотонная функция φ, единственная с точностью до постоянного множителя и такая, что

$$f(T_1', T_2') = \frac{\varphi(T_1') - \varphi(T_2')}{\varphi(T_1')},$$

Полагая $T = \varphi(T')$, мы получаем естественную абсолютную шкалу температур, не зависящую от свойств какого-либо отдельного вещества и такую, что

$$f(T_1, T_2) = \frac{T_1 - T_2}{T_1}.$$

Обычно нормируют φ так, чтобы между точками замерзания и кипения воды содержалось 100 единиц разности температур (100 градусов).

Инвариантность f имеет строгое количественное выражение, описывающее связь между степенью расширения материального тела и его способностью поглощать тепло; любое отклонение от этой связи можно было бы использовать для построения так называемого „вечного двигателя второго рода“. Эту инвариантность можно записать в форме требования, что некоторый определенный дифференциал, заданный на многообразии „равновесных состояний“, является дифференциалом функции. Эта функция, единственная с точностью до аддитивной константы, называется энтропией системы и играет центральную роль во всей теории.

В конце девятнадцатого века делались попытки вывести второй закон термодинамики и его следствия из законов механики, опираясь на гипотезу о том, что тепловая энергия является обычной механической энергией атомов, из которых состоит тело. Кульминацией этих попыток явилась статистическая механика Гиббса и гипотеза, что бесполезность тепловой энергии количественно соответствует степени нашего незнания точных движений, вызывающих эту энергию. Точнее, было найдено, что модель термодинамических явлений можно получить, считая, что состояния атомных движений являются каноническими ансамблями Гиббса, и интерпретируя B как абсолютную температуру, $E(B)$ — как количество тепла, $S(B)$ — как энтропию. Конечно, для того чтобы перевести B, выраженное в единицах энергии, в единицы температуры — градусы, его нужно умножить на некоторый множитель. Соответствующая „универсальная постоянная“ называется постоянной Больцмана и обозначается обычно через k; $B = kT$.

Любая гипотеза о структуре вещества, представляющая его как систему взаимодействующих частиц, гамильтониан которых удовлетворяет условиям (a)–(d), сформулированным выше, дает формулы $T \to E(kT)$ и $T \to S(kT)$ для тепловой энергии и энтропии как функций абсолютной температуры; эти формулы можно сравнить с результатами эксперимента.

Мы закончим этот раздел изучением некоторых частных случаев, которые имеют важное значение для перехода к квантовой механике. Вначале, однако, мы сделаем несколько общих замечаний о методе вычисления P, B и S. Прежде всего, нам на самом деле не нужно интегрировать по $\mathcal{M}_{V^*}$. Все операции можно перенести на действительную прямую следующим образом. Положим для каждого борелевского подмножества F действительной прямой $\beta(F) = \lambda(H^{-1}(F))$. Тогда нетрудно показать, что

$$P(B) = \int_0^\infty e^{-x/B}\, d\beta(x)$$

и

$$E(B) = \frac{1}{P(B)} \int_0^\infty x\, e^{-x/B}\, d\beta(x),$$

где β — только что определенная мера на действительной прямой. Далее, используя обычную теорию преобразования Лапласа, мы можем продифференцировать $P(B)$ по правилу Лейбница и получить следующий результат:

$$P'(B) = \int_0^\infty e^{-x/B} \frac{x}{B^2}\, d\beta(x) = \frac{1}{B^2} \int_0^\infty x\, e^{-x/B}\, d\beta(x) = \frac{E(B)\, P(B)}{B^2}.$$

Таким образом,

$$E(B) = B^2 \frac{d}{dB} \log P(B),$$

и, поскольку

$$S(B) = \log P(B) + E(B)/B,$$

нам остается вычислить только один интеграл. Функция $P(B)$, через которую можно выразить все остальные, называется разделяющей функцией. Из теории преобразования Лапласа следует, что P и β определяют друг друга однозначно.

В качестве первого примера вычислим β, P, E и S для „идеального газа“, который считается состоящим из n точечных масс, заключенных в некоторой замкнутой части пространства объема V и не взаимодействующих между собой. Тогда

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \ldots + \frac{p_{3n}^2}{2m_{3n}},$$

если q_i таковы, что все частицы расположены в заданной части пространства, и H равно бесконечности, если хотя бы одна из частиц находится вне этой части. Вычисление $\beta([0, x])$

является простым упражнением в многомерном интегрировании и дает результат

$$\beta([0,x]) = V^n \sqrt{m_1 \cdot \ldots \cdot m_{3n}}\, C_n\, x^{3n/2},$$

где C_n зависит только от n. Положим

$$D_n = C_n \sqrt{m_1 \cdot \ldots \cdot m_{3n}};$$

тогда

$$P(B) = \frac{3n}{2} D_n V^n \int\limits_0^\infty e^{-x/B} x^{3n/2-1}\, dx.$$

Полагая $x = yB$, получаем

$$\begin{aligned} P(B) &= \frac{3n}{2} D_n V^n \int\limits_0^\infty e^{-y} y^{3n/2-1} B^{3n/2}\, dy = \\ &= \frac{3n}{2} D_n B^{3n/2} V^n \int\limits_0^\infty e^{-y} y^{3n/2-1}\, dy = V^n B^{3n/2} A_n, \end{aligned}$$

где A_n зависит только от n и m_j. Наконец,

$$\begin{aligned} E(B) &= B^2 \frac{d}{dB} \log P(B) = \\ &= B^2 \frac{d}{dB} \left(\log A_n + n \log V + \frac{3n}{2} \log B \right) = \\ &= B^2 \frac{3n}{2} \frac{1}{B} = \frac{3}{2} nB, \end{aligned}$$

т. е. $E(kT) = \dfrac{3}{2} nkT$, и мы получаем классический результат, что удельная теплоемкость (т. е. $dE(kT)/dT$) идеального одноатомного газа не зависит от объема и температуры и прямо пропорциональна числу имеющихся атомов. Измеряя экспериментально $dE(kT)/dT$, можно найти nk и, следовательно, определить одно из чисел k или n (число атомов в заданной массе газа), когда другое известно. Мы имеем также

$$\begin{aligned} kS(kT) &= k \log A_n + nk \log V + \frac{3}{2} nk \log kT + \frac{3}{2} nk = \\ &= nk \log V + \frac{3}{2} nk \log T + A'_n, \end{aligned}$$

где A'_n зависит только от n. В классической теории энтропия определяется только с точностью до аддитивной постоянной и зависит от T и V так же, как в полученном нами равенстве.

В качестве второго примера мы рассмотрим модель твердого тела — систему n атомов, взаимодействующих таким образом, что их движения представляют собой малые колебания около некоторой конфигурации устойчивого равновесия. Мы вычислим для такой системы $E(kT)$ и выведем зависимость удельной теплоемкости от температуры.

Как мы уже видели, в линейной системе всегда можно выбрать координаты так, что она распадается на независимые системы, имеющие одномерные конфигурационные пространства, единственная координата которых совершает простые гармонические колебания. Нетрудно показать, что величина P для произведения двух независимых систем равна произведению соответствующих P. Поэтому, если обозначить через P^ν функцию P для простого гармонического колебания с частотой ν, а частоты простых гармонических колебаний, на которые разлагается движение нашей системы, положить равными $\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_{3n}$, то P для нашей системы будет иметь вид

$$P(B) = P^{\nu_1}(B) \cdot \ldots \cdot P^{\nu_{3n}}(B).$$

Далее, гамильтониан простого гармонического осциллятора имеет вид

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{\mu}{2}\,q^2,$$

поэтому $\beta([0,x])$ равняется площади фигуры

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{\mu}{2}\,q^2 \leqslant x,$$

т. е. площади внутренности эллипса

$$\frac{p^2}{(\sqrt{2mx})^2} + \frac{q^2}{(\sqrt{2x/\mu})^2} = 1;$$

эта площадь равна

$$\pi(\sqrt{2mx})\left(\sqrt{\frac{2x}{\mu}}\right) = x\,2\pi\sqrt{\frac{m}{\mu}} = \frac{x}{\nu},$$

где ν — частота осциллятора. Другими словами, P отличается только множителем $1/\nu$ от лебеговой меры на прямой. Отсюда получаем

$$P^{\nu}(B) = \frac{1}{\nu}\int\limits_0^{\infty} e^{-x/B}\,dx = \frac{B}{\nu},$$

следовательно,

$$P(B) = \frac{B^{3n}}{\nu_1\cdot\nu_2\cdot\ldots\cdot\nu_{3n}};$$

поэтому

$$E(B) = B^2\,\frac{d}{dB}\left[\log B^{3n} - \log(\nu_1\cdot\ldots\cdot\nu_{3n})\right] = 3nB,$$

так что $E(kT) = 3nkT$. Мы доказали, что удельная теплоемкость не зависит от характеристических частот и от температуры, а зависит только от числа атомов. Эмпирический закон, открытый в 1819 г. Дюлонгом и Пти, заключался в том, что все элементы в твердом состоянии имеют одинаковую атомную удельную теплоемкость, т. е. одинаковую удельную теплоемкость с поправкой на различие количества атомов в единице веса (т. е. на различный атомный вес). Существует много исключений из этого закона, но он, как правило, выполняется при достаточно высоких температурах. Статистическая механика объясняет этот закон, но не объясняет его нарушение при низких температурах.

Тот факт, что на каждое независимое колебание приходится одинаковая часть $E(B)$ независимо от его частоты называется *законом равномерного распределения энергии*. Если попытаться применить его к системе с бесконечным числом степеней свободы, для того чтобы изучить влияние температуры на излучение, то возникают некоторые серьезные противоречия. В первом разделе следующей главы мы расскажем об этих противоречиях и покажем, как их частичное объяснение привело к возникновению квантовой механики.

Глава 2

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

2.1 Старая квантовая теория

В конце девятнадцатого века у физиков было достаточно причин испытывать удовлетворение. Единая теория, сводящая все явления к ньютоновой механике, шагала от успеха к успеху и уже включала свет, электромагнетизм и тепло. Казалось, что физика в основном завершена — осталось только найти еще несколько десятичных знаков основных констант. Однако на горизонте собирались тучи: постепенно накапливались данные экспериментов, которые должны были почти совершенно разрушить традиционную схему.

Хотя макроскопические явления объяснялись в конечном счете движением сверхмикроскопических частиц, только к концу девятнадцатого века стало возможным исследовать свойства отдельных частиц, и, взятые по отдельности, эти частицы оказались во многом неньютоновыми. Интересно отметить, что Максвелл, которому во многом обязаны своим развитием теория электромагнетизма н статистическая термодинамика, был также организатором и первым директором Кавендишской лаборатории в Кембридже (Англия), где было поставлено много важнейших опытов с элементарными частицами. Максвелл возглавлял эту лабораторию со времени ее основания (1871 г.) до своей смерти (1879 г.). Его преемником был Рэлей, которого в 1884 г. сменил двадцативосьмилетний Дж. Дж. Томсон. Томсон руководил работами лаборатории до 1919 г., когда этот пост занял его ученик Резерфорд. Именно в этой лаборатории Томсон открыл электрон, Вильсон изобрел свою камеру и было сделано много других выдающихся открытий.

Хотя наиболее полное нарушение ньютоновой физики происходит на атомном уровне, имеются и макроскопические явления, в которых это нарушение дает себя знать, и именно из попыток объяснить такие явления возникла квантовая теория.

Рассмотрим электромагнитное поле в некоторой конечной части пространства. Мы видели, что его можно описать как линейную механическую систему и, следовательно, как совокупность независимых осцилляторов. Поэтому в любом данном состоянии имеется некоторое распределение его энергии между этими осцилляторами, и это распределение экспериментально измеряется спектроскопическими методами. Естественно ожидать, что для каждой температуры существует некоторое состояние Гиббса „термодинамического равновесия“ и что это можно наблюдать экспериментально. При надлежащих условиях спектральное распределение энергии излучения зависит только от температуры, а не от рассматриваемого вещества. С другой стороны, попытки теоретически объяснить получающееся при опыте распределение приводят к парадоксальным результатам, которые мы сейчас будем обсуждать.

Здесь с самого начала возникает некоторое затруднение, связанное с тем, что мы исследуем систему с бесконечным числом степеней свободы. Это означает, с одной стороны, что у нас нет теперь меры Лиувилля, с помощью которой мы строили состояния Гиббса, с другой стороны, что, разлагая систему на независимые гармонические колебания, мы получаем теперь бесконечное число осцилляторов с частотами $\nu_1, \nu_2, \ldots$, стремящимися к бесконечности.

Можно попробовать обойти это первое затруднение непосредственно применяя к случаю бесконечномерной системы результаты, полученные при исследовании конечномерных линейных систем. Именно это сделал Рэлей в 1900 г. Он предположил, что закон равномерного распределения энергии сохраняет силу, и, не обращая внимания на то, что отсюда следует бесконечность полной энергии, вывел некоторый закон спектрального распределения. Для прямоугольной части пространства основные частоты $\nu_1, \nu_2, \ldots$ можно получить непосредственно из разложения Фурье; вообще для достаточно большого объема V существует примерно $(8\pi\nu^2/c^3)V\delta\nu$ частот ν_j в интервале между ν и $\nu+\delta\nu$. Здесь c — скорость света, и $\delta\nu$ мало по сравнению с ν, но достаточно велико для того, чтобы содержать значительное число основных частот ν_j.

При возрастании ν частоты располагаются все более плотно, приближаясь к непрерывному распределению с плотностью $8\pi\nu^2/c^3$. Применяя закон равномерного распределения энергии, мы приписываем каждой частоте ν_j энергию kT и получаем *формулу Рэлея*, в соответствии с которой энергия излучения, отнесенная к единице объема в интервале частот $(\nu, \nu+\delta\nu)$ при температуре T в состоянии „ термодинамического равновесия“ равна

$$\frac{8\pi\nu^2 kT\,\delta\nu}{c^3}.$$

Рэлей был вознагражден за свою смелость, когда он убедился, что его формула согласуется с опытом при малых частотах и высоких температурах,— точнее, когда отношение ν/T достаточно мало. Как и следовало ожидать, это совпадение нарушалось при больших значениях ν/T — опыты не могли подтвердить бесконечность полной энергии. Однако Вином на несколько лет раньше был предложен другой закон, который согласовался с экспериментальными данными при больших значениях ν/T. Мы не будем пытаться восстановить несколько путаное физическое обоснование, данное Вином, а просто приведем его формулу, заменяющую формулу Рэлея при больших ν/T; Она имеет вид

$$A\nu^3 e^{-b\nu/T}\delta\nu,$$

где A и b — константы, которые должны определяться из опыта. Эта формула противоречит закону равномерного распределения энергии и не подтверждается опытом при малых ν/T. С другой стороны, она позволяет избежать парадокса бесконечности полной энергии — так называемой ультрафиолетовой катастрофы. Устранение противоречия между двумя дополняющими друг друга законами Рэлея и Вина было одной из важнейших задач, стоящих перед физиками в 1900 г., и с этой задачей успешно справился Макс Планк.

Мы выведем сейчас закон Планка с помощью рассуждений, аналогичных тем, которые использовал сам Планк, но облеченных в несколько иную форму.

Предположим, что, выражая P через β для случая гармонического осциллятора, мы заменим β аппроксимирующей ее дискретной мерой. Напомним, что β равна лебеговой мере, умноженной на $1/\nu$. Ее можно аппроксимировать мерой β_h, сосредоточенной в отдельных равноотстоящих друг от друга точках, каждая из которых имеет одну и ту же малую меру h. Если расстояние между соседними точками равно a, то интервал $0 \leqslant t \leqslant Na = x$ будет иметь меру Nh. Если эта мера равна x/ν, то $Na/\nu = Nh$, т. е. $a = h\nu$. Теперь мы можем вычислить

$$P_h(B) = \int\limits_0^\infty e^{-x/B}\,d\beta_h(x) = h + h\,e^{-a/B} + h\,e^{-2a/B} + \ldots = h(1 + e^{-h\nu/B} + e^{-2h\nu/B} + \ldots).$$

Мы имеем геометрическую прогрессию со знаменателем $e^{-h\nu/B}$, сумма которой равна

$$\frac{h}{1 - e^{-h\nu/B}}.$$

Соответствующее E равно

$$E_h(B) = B^2\frac{P_h'(B)}{P_h(B)} = \frac{h\nu\,e^{-h\nu/B}}{1 - e^{-h\nu/B}} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/B} - 1}.$$

Для систем, которые допускают разложение на независимые осцилляторы с частотами $\nu_1, \nu_2, \ldots$ мы получаем *сходящийся* ряд

$$E_h(B) = \frac{h\nu_1}{e^{h\nu_1/B} - 1} + \frac{h\nu_2}{e^{h\nu_2/B} - 1} + \ldots,$$

и формула Рэлея принимает вид

$$\frac{8\pi\nu^3}{c^3}\frac{h}{e^{h\nu/kT}-1}\,\delta\nu.$$

Конечно, при h, стремящемся к нулю, $E_h(B)$ стремится к бесконечности, и новая формула Рэлея превращается в старую. С другой стороны, независимо от того, какое значение мы придадим h, если взять ν/T настолько малым, что $e^{h\nu/kT}$ можно аппроксимировать первыми двумя членами тейлоровского разложения, то $e^{h\nu/kT}-1$ превращается в $h\nu/kT$, и мы снова приходим к старой формуле Рэлея. Наоборот, если мы будем считать ν/T настолько большим, что можно будет пренебречь единицей по сравнению с $e^{h\nu/kT}$, то формула принимает вид

$$\frac{8\pi\nu^3}{c^3}\,h\,e^{-h\nu/kT}\delta\nu,$$

т. е. будет совпадать с формулой Вина при $A = 8\pi h/c^3$ и $b = h/k$. Из этих уравнений однозначно определяются h и k, и оказывается, что найденное таким образом значение k совпадает со значением, полученным ранее другими методами. Планк, считавший сначала, что h стремится к нулю, заметил, что можно получить универсальную формулу, если положить h равным значению, определяемому из написанных выше равенств. Эта новая физическая константа, так же как и получающийся закон излучения, носит его имя.

Мы видели, что закон Планка содержит законы Вина и Рэлея в качестве частных случаев. Он также совпадает с экспериментом во всех интервалах частот. Единственным его недостатком является произвольный характер замены β на β_h; это равносильно предположению, что энергия гармонического осциллятора с частотой ν может принимать только кратные $h\nu$ значения.

Способ Планка можно применить также для вывода более точной формулы удельной теплоемкости. Если в формуле энергии, содержащейся в твердом теле, заменить kT на $h\nu/(e^{h\nu/kT}-1)$, то вместо $E(kT) = 3nkT$ получится

$$E(kT) = \sum_{j=1}^{3n}\frac{h\nu_j}{e^{h\nu_j/kT}-1},$$

т. е. удельная теплоемкость на самом деле зависит от ν_j довольно сложным образом. Если бы удалось определить ν_j, то получилась бы совершенно точная формула для удельной теплоемкости. Во всяком случае, мы видим, что при $h\nu_j/kT$, значительно меньших единицы (для всех j), $E(kT)$ приблизительно равна $3nkT$. Отсюда ясно, почему закон Дюлонга и Пти выполняется при высоких температурах и нарушается при низких. Такое исследование удельной теплоемкости было начато Эйнштейном в 1906 г. и продолжено многими другими учеными, в частности Дебаем.

В 1905 г. Эйнштейн показал, что развивая идеи Планка, можно дать количественное объяснение так называемого „фотоэлектрического эффекта“, открытого в 1899 г. Дж. Дж. Томсоном и П. Ленардом. Эти физики независимо друг от друга установили, что ультрафиолетовые лучи, падающие на металлическую пластинку, выбивают из нее электроны. Более того, в 1902 г. Ленард показал, что начальная энергия этих электронов совершенно не зависит от интенсивности падающего света, а зависит только от его длины волны. По классической теории взаимодействия зарядов с электромагнитным полем энергия электронов должна существенно зависеть от интенсивности падающего света и при малой интенсивности должна возникать большая задержка во времени, в течение которой электрон сможет накопить достаточную энергию. Эта задержка не наблюдалась. Эйнштейн показал, что если в соответствии с формулой излучения Планка считать энергию электромагнитного поля с основными частотами $\nu_1, \nu_2, \ldots$ распадающейся на „пакеты“ с энергиями $h\nu_1, h\nu_2, \ldots$, то нетрудно объяснить фотоэлектрический эффект как результат столкновения этих пакетов с электронами. Количественные следствия этой гипотезы были подтверждены рядом экспериментов, и давно умершая корпускулярная теория света вновь вернулась к жизни.

Одно из наиболее замечательных применений квантовых идей принадлежит Н. Бору, который в 1913 г. с их помощью вывел теоретическую формулу для спектральных линий водорода. Каждый химический элемент при достаточном возбуждении испускает лучи, спектр которых состоит из определенных тонких линий, характерных для данного элемента.

Очевидная задача заключалась в том, чтобы найти зависимость между этими линиями и внутренней структурой атомов рассматриваемого элемента. Однако об этой внутренней структуре было известно слишком мало до тех пор, пока в 1911 г. Резерфорд не сделал своего важнейшего открытия.

Работая в Манчестере над рассеиванием α-частиц, испускаемых радиоактивными веществами, Резерфорд пришел к выводу, что атом должен состоять из чрезвычайно малого положительно заряженного ядра, окруженного электронами в количестве, достаточном для нейтрализации заряда ядра. Эти электроны, как считал Резерфорд, должны быть распределены в пределах расстояния, примерно в 300 раз превышающего диаметр ядра. Он предположил, далее, что число электронов приблизительно равно половине атомного веса (исключая водород, для которого это невозможно), и что это число определяет химические свойства соответствующего элемента. Эта модель, которая позднее была уточнена и приведена в соответствие с квантовой механикой, теперь является общепринятой.

Применяя выводы классической механики к модели Резерфорда одноэлектронного атома водорода и учитывая из всех электромагнитных эффектов только электростатические, мы находим, что если энергия электрона меньше некоторого определенного предела, то он будет вращаться по эллиптической орбите вокруг центра масс его самого и ядра. На каждой орбите электрон имеет постоянную энергию, но для различных орбит имеется целый континуум возможных энергий.

Бор заметил, что можно предсказать основные свойства спектра водорода, если принять следующие предположения:

(a) возможны только такие орбиты, на которых значение момента импульса кратно $h/2\pi$;

(b) когда электрон перескакивает с одной орбиты на другую, разность энергий $E_1 - E_2$ превращается в излучение с частотой $(E_1 - E_2)/h$, т. е. в „фотон“ или квант электромагнитной энергии с энергией $E_1 - E_2 = h\nu$.

Идеи Бора были позднее развиты таким образом, что с их помощью стало возможным объяснить спектры более сложных атомов; многочисленные данные спектроскопии за короткое время были упорядочены и поняты, хотя еще совсем недавно эта задача казалась совершенно безнадежной.

Описанный прием сочетания законов классической механики со взятыми с потолка „правилами квантования“, несмотря на его многочисленные успешные применения был, очевидно, неудовлетворительным. Не было не только теоретического обоснования, но даже общего способа получения этих правил. Правила, указывающие, какой дискретный ряд значений может принимать та или иная переменная, становились все более сложными и детализированными по мере усложнения изучавшихся систем. Более того, во многих случаях новые правила вступали в резкое противоречие с классической физикой и в то же время не могли полностью заменить ее. Для объяснения одних явлений приходилось использовать волновую теорию света, для объяснения других — новую корпускулярную теорию. Далее, в соответствии с классической электродинамикой электрон, движущийся по орбите Бора, должен непрерывно излучать энергию и в конце концов упасть на ядро, но этого не происходит.

Наконец в 1925 г. Гейзенберг и Шредингер независимо друг от друга открыли общие правила квантования, которые значительно отличались по форме, но, как скоро выяснилось, были эквивалентны друг другу. Это открытие дало мощный толчок развитию физики, и за какие-нибудь пять лет объединенными усилиями Гейзенберга, Шредингера, Дирака, Бора, Борна, фон Неймана и других ученых была создана новая, более совершенная механика, которая

(a) включала классическую механику в качестве предельного случая для больших масс и расстояний;

(b) устанавливала существование правил квантования и их точную форму;

(c) объясняла, каким образом вещество и излучение могут быть одновременно волнами и частицами, и доказывала стабильность орбит Бора;

(d) позволяла понять много ранее не объяснимых явлений, в частности валентность и законы образования химических соединений.

Эта новая механика называется квантовой механикой. Прежде чем переходить к ее изложению, мы хотели бы подчеркнуть, что правила квантования являются в квантовой механике следствием теории, а не основным средством ее формулировки. В этом смысле название квантовой механики является неудачным. Она является, скорее, измененным вариантом статистической механики, в котором при изучении изменения вероятностных мер во времени уже не предполагается, что движение этих мер порождается движением точек в фазовом пространстве. Законы квантовой механики накладывают некоторые ограничения на возможные одновременно распределения вероятностей различных наблюдаемых, а также дают дифференциальные уравнения, интегрируя которые можно найти изменение этих распределений со временем. Все остальное является следствием этих законов.

2.2 Квантовомеханический аналог фазового пространства

В классической статистической механике наблюдаемая является борелевской функцией на фазовом пространстве $\mathcal{M}_{V^*}$, состояние — вероятностной мерой на $\mathcal{M}_{V^*}$; тем самым каждой паре (f, α), где f — наблюдаемая и α — состояние, можно поставить в соответствие вероятностную меру α_f на прямой, приписав борелевскому множеству E меру $\alpha(f^{-1}(E))$. Величина $p(f, \alpha, E)$, по определению равная $\alpha(f^{-1}(E))$, есть вероятность того, что измерение наблюдаемой f у системы, находящейся в состоянии α, будет принадлежать множеству E.

В квантовой механике мы также будем оперировать некоторой функцией $p(A, \alpha, E)$, приписывающей определенную вероятность каждой тройке, состоящей из наблюдаемой A, состояния α и борелевского множества E действительных чисел, но не будем предполагать, что p получается как вероятностная мера на классическом фазовом пространстве.

Развитие квантовой механики привело к необходимости строгого анализа процесса измерения; результатом этого анализа явилось утверждение (в количественной формулировке известное как принцип неопределенности Гейзенберга), согласно которому принципиально не имеет смысла говорить об одновременных *точных* значениях координат и скоростей частицы. Измерения координат и скоростей связаны друг с другом таким образом, что оказываются бесплодными все попытки придумать эксперимент, который позволил бы приписать точный смысл утверждению: в момент времени t частица P находится в точке x, y, z и имеет скорость v_x, v_y, v_z.

С другой стороны, можно приписать точный смысл утверждению: в момент времени t состояние системы таково, что измерения x, y, z, v_x, v_y, v_z имеют статистические распределения, соответствующие вероятностным мерам $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ на действительной прямой. Это объясняется тем, что для определения вероятностных распределений можно производить измерения на большом числе копий данной системы, выбирая различные множества экземпляров системы для измерения значений различных наблюдаемых. Процесс измерения, конечно, существенно меняет состояние системы, и полученную информацию можно применять только к тем экземплярам из нашей совокупности, которые не подвергались испытаниям. Подробное обсуждение этой важной особенности квантовой механики читатель может найти в книге фон Неймана.

Поскольку не имеет физического смысла понятие точки фазового пространства, понятие вероятностной меры на фазовом пространстве также теряет смысл. С другой стороны, как мы видели, по-прежнему сохраняет смысл сопоставление каждой наблюдаемой в данном состоянии некоторой вероятностной меры на прямой. Это позволяет перенести с некоторыми уточнениями понятие состояния из классической статистической механики в квантовую механику.

Нам будет удобно ввести основные понятия квантовой механики аксиоматически. Мы построим строго определенную математическую модель и опишем ее физический смысл настолько точно, насколько это возможно. Читатель убедится в том, что наши аксиомы имеют различную степень физической достоверности: пока еще не представляется возможным построить квантовую механику в ее современной форме, основываясь на вполне достоверных и естественных аксиомах.

Пусть $\mathcal{B}$ — множество всех борелевских подмножеств действительной прямой $\mathbb{R}$. Мы предполагаем, что нам заданы два абстрактных множества $\mathcal{A}$ и $\mathcal{S}$, и функция p, которая каждой тройке (A, α, E), где $A \in \mathcal{A}$, $\alpha \in \mathcal{S}$ и $E \in \mathcal{B}$, ставит в соответствие некоторое действительное число $p(A, \alpha, E)$, $0 \leqslant p(A, \alpha, E) \leqslant 1$. Мы предполагаем, что p обладает некоторыми определенными свойствами, которые мы перечисляем в виде аксиом. Физически $\mathcal{A}$ нужно представить себе как множество всех наблюдаемых нашей физической системы, а $\mathcal{S}$ — как множество всех ее состояний. Величина $p(A, \alpha, E)$ есть вероятность того, что измерение наблюдаемой A в состоянии α будет иметь значение, принадлежащее множеству E. Время мы пока считаем фиксированным; изменение состояний в зависимости от времени мы рассмотрим в дальнейшем.

А к с и о м а 1. *$p(A, \alpha, \varnothing) = 0$, $p(A, \alpha, \mathbb{R}) = 1$; $p(A, \alpha, E_1 \cup E_2 \cup \ldots) = \sum\limits_{j=1}^{\infty} p(A, \alpha, E_j)$, если E_j — попарно непересекающиеся борелевские множества.*

Положим $\alpha_A(E) = p(A, \alpha, E)$. Аксиома 1 заключается просто в том, что α_A для каждого $A \in \mathcal{A}$ и каждого $\alpha \in \mathcal{S}$ должна быть вероятностной мерой.

А к с и о м а 2. *Если $p(A, \alpha, E) = p(A', \alpha, E)$ для всех α и E, то $A = A'$. Аналогично, если $p(A, \alpha, E) = p(A, \alpha', E)$ для всех A и E, то $\alpha = \alpha'$.*

Аксиома 2, таким образом, гласит, что двум различным состояниям должны соответствовать различные вероятностные распределения хотя бы одной из наблюдаемых, и две различные наблюдаемые должны иметь различные вероятностные распределения хотя бы в одном состоянии.

А к с и о м а 3. *Пусть A — произвольный элемент $\mathcal{A}$, и f — любая действительная борелевская функция на прямой. Тогда существует наблюдаемая $B \in \mathcal{A}$, такая, что $p(B, \alpha, E) = p(A, \alpha, f^{-1}(E))$ для всех $\alpha \in \mathcal{S}$ и $E \in \mathcal{B}$.*

Из аксиомы 2 следует, что B однозначно определяется по A; мы будем обозначать ее через $f(A)$. Физически наблюдаемая $f(A)$ строится следующим образом: чтобы измерить $f(A)$, нужно измерить A и к результату применить функцию f. Если изложить этот способ построения наблюдаемой B в терминах вероятностей $p(A, \alpha, E)$, то мы придем к аксиоме 3.

В силу аксиомы 3 все такие выражения, как $A^2, A^3 + A, 1 - A, e^A$ и т. д., имеют смысл, если A — наблюдаемая. В частности, если $f(x) \equiv \lambda$, где λ — некоторое действительное число, то $f(A)$ не зависит от A и будет называться постоянной наблюдаемой со значением λ или просто наблюдаемой λ.

А к с и о м а 4. *Если $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ — элементы $\mathcal{S}$, и $t_1 + t_2 + \ldots = 1$, $0 < t_j < 1$, то существует состояние $\alpha \in \mathcal{S}$, такое, что*

$$p(A, \alpha, E) = \sum_{j=1}^{\infty} t_j\, p(A, \alpha_j, E)$$

для всех $E \in \mathcal{B}$ и $A \in \mathcal{A}$.

Из аксиомы 2 следует, что состояние α однозначно определяется по α_j и t_j; мы будем обозначать его через $\sum\limits_{j=1}^{\infty} t_j \alpha_j$. Физически оно соответствует состоянию, в котором мы знаем, что находимся в состоянии α_j с вероятностью t_j. Оно называется *смесью* состояний α_j. Если состояние α нельзя получить как смесь двух состояний, отличных от него самого, то α называют *чистым состоянием*. (Мы предупреждаем читателя-физика, что аксиома 4 не является формулировкой „принципа суперпозиции“. В этом принципе речь идет о чистых состояниях, а в аксиоме 4 — о смешанных.)

Прежде чем перечислять дальнейшие аксиомы, нам нужно будет ввести некоторые новые понятия, основанные на уже сформулированных аксиомах. Мы будем называть наблюдаемую A вопросом, если в каждом состоянии α мера α_A сосредоточена в точках 0 и 1, т. е. если $\alpha_A(0, 1) = 1$ для всех α. Мы предоставляем читателю убедиться в том, что A является вопросом тогда и только тогда, когда $A^2 = A$. Мы будем обозначать множество всех вопросов $\mathcal{Q}$. В том, что существует огромное количество вопросов, можно убедиться следующим образом. Пусть E — произвольное борелевское подмножество действительной прямой, и $\varphi_E(x)$ — функция, равная 1 при $x \in E$ и 0 при $x \notin E$. Тогда $\varphi_E(A)$, как нетрудно видеть, будет вопросом; мы будем обозначать этот вопрос через Q_E^A. Это наблюдаемая, которая принимает значение 1, когда измерение A приводит к значению в E, и равна 0 в противном случае. В этом смысле она соответствует вопросу: принадлежит ли измеренное значение A множеству E?

Если фиксировать A, то Q_E^A будет совокупностью вопросов, параметризованной борелевскими множествами E. Для нас будет важно, что эта параметризованная совокупность вопросов однозначно определяет A, т. е., как читатель может без труда проверить, из того, что $Q_E^A = Q_E^{A'}$ для всех $E \in \mathcal{B}$, следует, что $A = A'$. Пусть Q — произвольный вопрос, и α — произвольное состояние, причем $\alpha_Q(\{1\}) = s$; тогда $\alpha_Q(\{0\}) = 1 - s$, и для любого множества $E \in \mathcal{B}$ $\alpha_Q(E)$ равно 0, 1, s или $1 - s$ тогда и только тогда, когда ни 0, ни 1 не принадлежат E; и 0 и 1 принадлежат E; $1 \in E$, а $0 \notin E$; $0 \in E$, а $1 \notin E$ соответственно.

Поэтому α_Q вполне определяется числом $s = \alpha_Q(\{1\})$. Мы определим $m_\alpha(Q)$ как $\alpha_Q(\{1\})$. Тогда m_α — некоторая действительная функция на множестве всех вопросов, и читатель без особого труда может убедиться в том, что если $m_{\alpha_1}(Q) = m_{\alpha_2}(Q)$ для всех Q, то $\alpha_1 = \alpha_2$.

Функции m_α естественным образом определяют частичную упорядоченность на $\mathcal{Q}$ тогда и только тогда, когда $m_\alpha(Q_1) \leqslant m_\alpha(Q_2)$ для всех состояний α. Нетрудно установить, что определенное таким образом отношение удовлетворяет условиям, входящим в определение частичной упорядоченности:

(1) если $Q_1 \leqslant Q_2$ и $Q_2 \leqslant Q_3$, то $Q_1 \leqslant Q_3$;

(2) $Q \leqslant Q$ для всех Q;

(3) если $Q_1 \leqslant Q_2$ и $Q_2 \leqslant Q_1$, то $Q_1 = Q_2$.

Для любого вопроса Q наблюдаемая $1 - Q$ также является вопросом. Это вопрос, ответ на который всегда противоположен ответу на вопрос Q. Вопросы Q и $1 - Q$ в отличие от произвольной пары вопросов являются функциями одной и той же наблюдаемой (а именно Q), и поэтому их можно задавать одновременно.

Пусть Q_1 и Q_2 — вопросы. Если $Q_1 \leqslant 1 - Q_2$ или, что эквивалентно, если $m_\alpha(Q_1) + m_\alpha(Q_2) \leqslant 1$ для всех состояний α, то мы будем говорить, что Q_1 и Q_2 не пересекаются, и писать $Q_1 \mathbin{\circ\!\!\!\!\mid\,} Q_2$. Физически это означает, что на вопросы Q_1 и Q_2 невозможно одновременно ответить „да“.

Чтобы глубже понять смысл соотношений $Q_1 \leqslant Q_2$ и $Q_1 \mathbin{\circ\!\!\!\!\mid\,} Q_2$ рассмотрим случай, в котором $Q_1 = Q^A_{E_1}$, и $Q_2 = Q^A_{E_2}$, где A — некоторая наблюдаемая. Тогда $E_1 \subset E_2$ эквивалентно соотношению $Q^A_{E_1} \leqslant Q^A_{E_2}$, а $E_1 \cap E_2 = 0$ эквивалентно соотношению $Q^A_{E_1} \mathbin{\circ\!\!\!\!\mid\,} Q^A_{E_2}$.

Теперь мы покажем, что все сформулированные до сих пор аксиомы выполняются в классической механике, и посмотрим, к чему сводятся наши построения в классическом случае. Наблюдаемая в этом случае представляет собой просто борелевскую функцию g на $\mathcal{M}_{V^*}$. Читатель без труда установит, что наблюдаемая $f(\mathrm{g})$, определенная в аксиоме 3, является обычной композицией функций $f \circ \mathrm{g}$. Вопрос — это борелевская функция, которая принимает только значения 0 и 1; она однозначно определяется борелевским множеством точек, в которых она принимает значение 1, и ее удобно отождествить с этим множеством. Если это сделать, то операция $Q \to 1 - Q$ окажется переходом от множества к его дополнению, $Q_1 \leqslant Q_2$ будет означать теоретико-множественное включение, а $Q_1 \mathbin{\circ\!\!\!\!\mid\,} Q_2$ будет означать, что множества не пересекаются. Функция m_α, отображающая вопросы во множество действительных чисел между 0 и 1, станет мерой α на $\mathcal{M}_{V^*}$, а функция $E \to Q^{\mathrm{g}}_E$, где g — борелевская функция на $\mathcal{M}_{V^*}$, будет отображением $E \to \mathrm{g}^{-1}(E)$.

Возвращаясь к общему случаю, заметим, что если A — некоторая наблюдаемая, и $E_1, E_2, \ldots$ — непересекающиеся борелевские множества, $E = E_1 \cup E_2 \cup \ldots$, то для каждого состояния $\alpha \in \mathcal{S}$ мы имеем

$$m_\alpha(Q^A_E) = p(A, \alpha, E) = \sum_{j=1}^{\infty} p(A, \alpha, E_j) = \sum_{j=1}^{\infty} m_\alpha(Q^A_{E_j}).$$

Более того, в силу аксиомы 2, Q^A_E однозначно определяется из следующего условия:

$$m_\alpha(Q^A_E) = \sum_{j=1}^{\infty} m_\alpha(Q^A_{E_j}) \text{ для всех } \alpha.$$

Естественно называть Q^A_E суммой вопросов $Q^A_{E_1}, Q^A_{E_2}, \ldots$ и писать $Q^A_E = Q^A_{E_1} + Q^A_{E_2} + \ldots$. Вообще мы будем говорить, что вопрос Q является суммой непересекающихся вопросов $Q_1, Q_2, \ldots$:

$$Q = Q_1 + Q_2 + \ldots,$$

если для всех α из $\mathcal{S}$ $m_\alpha(Q) = m_\alpha(Q_1) + m_\alpha(Q_2) + \ldots$. Согласно аксиоме 2, существует не более одного такого вопроса Q для данной последовательности $Q_1, Q_2, \ldots$; однако, вообще говоря, нет никакой гарантии, что Q всегда существует. Мы гарантируем это существование нашей следующей аксиомой.

А к с и о м а 5. *Пусть $Q_1, Q_2, \ldots$ — произвольная последовательность вопросов, такая что $Q_i \mathbin{\circ\!\!\!\!\mid\,} Q_j$ при $i \neq j$. Тогда вопрос $Q_1 + Q_2 + \ldots = Q$ существует.*

Этот вопрос Q можно интерпретировать как вопрос, ответ на который утвердителен в том и только в том случае, когда утвердителен ответ хотя бы на один из вопросов $Q_1, Q_2, \ldots$.

Полезно также заметить, что Q является наименьшим вопросом, который больше каждого из Q_i или равен ему, так что его можно было определить исходя только из упорядоченности множества вопросов. Этот факт не вполне очевиден, и мы дадим его доказательство (принадлежащее Р. В. Кадисону).

Т е о р е м а. *Если $R \geqslant Q_j$ при всех j, и $Q_i \perp Q_j$ при $i \neq j$, то $R \geqslant Q_1 + Q_2 + \ldots$.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Покажем сначала, что если $Q' \perp Q''$, $R \perp Q'$ и $R \perp Q''$, то $R \perp (Q' + Q'')$. Действительно, $R + Q' + Q''$ также должно быть вопросом, который мы обозначим через Q'''. Тогда для всех α

$$m_\alpha(R) + m_\alpha(Q') + m_\alpha(Q'') = m_\alpha(Q''') \leqslant 1,$$

следовательно,

$$m_\alpha(R) + m_\alpha(Q' + Q'') \leqslant 1,$$

откуда $R \perp (Q' + Q'')$. Далее, поскольку $R \geqslant Q_j$ для всех j, то $(1 - R) \perp Q_j$ для всех j, и по индукции получаем, что $(1-R) \perp (Q_1 + \ldots + Q_n)$ для всех n. Следовательно, $R \geqslant Q_1 + \ldots + Q_n$ для всех n. Поэтому

$$m_\alpha(R) \geqslant m_\alpha(Q_1 + \ldots + Q_n) = m_\alpha(Q_1) + \ldots + m_\alpha(Q_n)$$

для всех n и α, т. е.

$$m_\alpha(R) \geqslant m_\alpha(Q_1) + m_\alpha(Q_2) + \ldots$$

для всех α. Следовательно, $R \geqslant Q_1 + Q_2 + \ldots$.

Используя понятие суммы непересекающихся вопросов, мы можем записать основные свойства отображения $E \to Q_E^A$ множества $\mathcal{B}$ в $\mathcal{Q}$ и функции $Q \to m_\alpha(Q)$, отображающей $\mathcal{Q}$ во множество действительных чисел. Рассмотрим сначала отображение $E \to Q_E^A$. Для каждого A отображение Q_E^A имеет следующие свойства:

(a) если $E \cap F = \varnothing$, то $Q_E^A \perp Q_F^A$;

(b) если $E_i \cap E_j = \varnothing$ при всех $i \neq j$, то $Q^A_{E_1 \cup E_2 \cup \ldots} = Q^A_{E_1} + Q^A_{E_2} + \ldots$;

(c) $Q^A_\varnothing = 0$, $Q^A_\mathbb{R} = 1$.

Произвольную функцию $q : E \to q_E$, отображающую множество $\mathcal{B}$ в $\mathcal{Q}$, удовлетворяющую условиям (a)–(c), мы будем называть *мерой со значениями во множестве вопросов или вопросной мерой*. Из доказанной теоремы следует, что каждая наблюдаемая однозначно определяется соответствующей вопросной мерой $E \to Q_E^A$, так что мы имеем естественное взаимно однозначное соответствие между наблюдаемыми и *некоторыми* вопросными мерами. Наша следующая аксиома позволяет опустить слово „некоторыми“.

А к с и о м а 6. *Если q — произвольная вопросная мера, то существует такая наблюдаемая A, $Q_E^A = q_E$ для всех $E \in \mathcal{B}$.*

Значение этой аксиомы можно объяснить следующим образом. Предположим сначала, что она не выполняется. Пусть $\mathcal{A}'$ — множество всех вопросных мер, и пусть $p'(q, \alpha, E) = m_\alpha(q_E)$ для каждого $q \in \mathcal{A}'$, каждого $\alpha \in \mathcal{S}$ и каждого $E \in \mathcal{B}$. Тогда, как нетрудно видеть, множество $\mathcal{A}'$ (заменяющее $\mathcal{A}$), множество $\mathcal{S}$ и функция p' удовлетворяют аксиомам 1–5, а также аксиоме 6.

Далее, если мы отождествим $A \in \mathcal{A}$ с $Q_E^A \in \mathcal{A}'$, то $\mathcal{A}$ станет частью $\mathcal{A}'$, и функция p', рассматриваемая на $\mathcal{A}$, совпадет с p. Другими словами, выполнение аксиомы 6 всегда можно обеспечить, расширив множество $\mathcal{A}$.

Нетрудно пенять физический смысл этого расширения. Если мы имеем множество вопросов $E \to q_E$, поставленных в соответствие борелевским подмножествам действительной прямой так, что выполняются условия (a)–(c), то мы можем задать наблюдаемую, отождествив вопрос q_E с таким вопросом: принадлежит ли измеренное значение наблюдаемой множеству E ?

Рассмотрим теперь функцию $Q \to m_\alpha(Q)$. Для каждого $\alpha \in \mathcal{S}$ функция m_α обладает следующими свойствами:

(a) если $Q_1, Q_2, \ldots$ — вопросы, такие что $Q_i \perp Q_j$ при $i \neq j$, то $m_\alpha(Q_1 + Q_2 + \ldots) = m_\alpha(Q_1) + m_\alpha(Q_2) + \ldots$;

(b) $m_\alpha(0), m_\alpha(1) = 1$;

(c) $0 \leqslant m_\alpha(Q) \leqslant 1$ для всех Q.

Произвольную действительную функцию, определенную на множестве $\mathcal{Q}$ всех вопросов и обладающую свойствами (a)–(c), мы будем называть вероятностной мерой на вопросах.

Отображение $\alpha \to m_\alpha$ устанавливает взаимно однозначное соответствие между состояниями и некоторыми вероятностными мерами на вопросах.

Было бы очень соблазнительно добавить аксиому, устанавливающую, что каждая вероятностная мера на вопросах есть m_α для некоторого $\alpha \in \mathcal{S}$. Это утверждение, очевидно, выполняется в классической механике. Оно также выполняется (что уже далеко не очевидно) в той модели квантовой механики, которую мы в конце концов получим. Если бы мы добавили такую аксиому, то наша система вполне определялась бы частично упорядоченным множеством $\mathcal{Q}$ и операцией $Q \to 1 - Q$, мы могли бы тогда отождествить $\mathcal{A}$ со множеством всех вопросных мер, $\mathcal{S}$ — со множеством всех вероятностных мер на вопросах и восстановить p как функцию, переводящую тройку Q, m, E в $m(Q_E)$. Наконец, если бы эта аксиома не выполнялась, мы могли бы расширить $\mathcal{S}$ так, чтобы в полученной системе аксиома была верна. Однако мы все-таки не поддадимся такому соблазну. Дело в том, что состояния нельзя конструировать физически так, как мы это делали с наблюдаемыми, и поэтому было бы очень трудно дать правдоподобное физическое объяснение этой аксиомы.

Во всяком случае, наша система может быть описана теперь заданием трех элементов: частично упорядоченного множества $\mathcal{Q}$, операции $Q \to 1 - Q$ на нем и некоторого подмножества вероятностных мер на $\mathcal{Q}$. Для того чтобы убедиться в этом, проведем обратное построение: построим тройку $\mathcal{A}, \mathcal{S}, p$, отправляясь от абстрактного частично упорядоченного множества, в котором определено „дополнение“, и заданных на нем „вероятностных мер“.

Пусть $\mathcal{L}$ — произвольное частично упорядоченное множество, и $a \to a'$ — инволютивный антиавтоморфизм в $\mathcal{L}$, т. е. отображение $\mathcal{L}$ в $\mathcal{L}$ такое, что $a'' = a$ и из $a_1 \leqslant a_2$ следует $a_2' \leqslant a_1'$. Будем писать $a_1 \perp a_2$, если $a_1 \leqslant a_2'$. Мы будем называть отображение $a \to a'$ *ортогональным дополнением*, если оно обладает следующими дополнительными свойствами:

(a) если $a_1, a_2, \ldots$ — элементы $\mathcal{L}$ такие, что $a_i \perp a_j$ при $i \neq j$, то существует единственный наименьший элемент a, такой, что $a \geqslant a_j$ при всех j (мы будем обозначать его через $a_1 \cup a_2 \cup \ldots$);

(b) $a_1 \cup a_1' = a_2 \cup a_2'$ для всех a_1 и a_2 (мы будем обозначать $a \cup a'$ через 1);

(c) если $a \leqslant b$, то $b = a \cup (b' \cup a)'$.

Ясно, что $Q \to 1 - Q$ есть ортогональное дополнение в $\mathcal{Q}$.

Если $a \to a'$ — произвольное ортогональное дополнение в $\mathcal{L}$, то мы определим вероятностную меру на $\mathcal{L}$ (относительно операции $'$) как функцию m, отображающую $\mathcal{L}$ в отрезок [0,1], для которой $m(1) = 1$, $m(1') = 0$ и

$$m(a_1 \cup a_2 \cup \ldots) = m(a_1) + m(a_2) + \ldots,$$

если $a_i \perp a_j$ при $i \neq j$.

Если $a_1 \leqslant a_2$, и m — вероятностная мера, то

$$m(a_2) = m(a_1 \cup (a_2' \cup a_1)') = m(a_1) + m((a_2' \cup a_1)') \geqslant m(a_1).$$

Если для некоторого семейства $\mathcal{F}$ вероятностных мер верно обратное, т. е. если из того, что $m(a_1) \leqslant m(a_2)$ для всех $m \in \mathcal{F}$, следует, что $a_1 \leqslant a_2$, то $\mathcal{F}$ называется *полным* семейством. Если для каждой последовательности $m_i \in \mathcal{F}$ мера $\sum\limits_{i=1}^{\infty} t_i m_i$, где $t_i \geqslant 0$ и $\sum\limits_{i=1}^{\infty} t_i = 1$, также принадлежит $\mathcal{F}$, то $\mathcal{F}$ называется строго *выпуклым*. Ясно, что все m_α при $\alpha \in \mathcal{S}$ образуют строго выпуклое полное множество вероятностных мер на $\mathcal{Q}$. Наконец, определим меру L на действительной прямой со значениями в $\mathcal{L}$ как функцию $E \to L_E$, отображающую $\mathcal{B}$ в $\mathcal{L}$ и обладающую следующими свойствами:

(a) если $E \cap F = 0$, то $L_E \perp L_F$;

(b) если $E_i \cap E_j = 0$ при $i \neq j$, то $L_{E_1 \cup E_2 \cup \ldots} = L_{E_1} \cup L_{E_2} \cup \ldots$

(c) $L_\varnothing = 1'$, $L_\mathbb{R} = 1$.

Нетрудно доказать следующую теорему.

Т е о р е м а. *Пусть $a \to a'$ — ортогональное дополнение на произвольном частично упорядоченном множестве $\mathcal{L}$, пусть $\mathcal{S}$ — произвольное полное строго выпуклое семейство вероятностных мер на $\mathcal{L}$ (относительно операции $'$) и пусть $\mathcal{A}$ — множество всех мер на действительной прямой со значениями в $\mathcal{L}$. Для каждой тройки L, m, E, где $L \in \mathcal{A}, m \in \mathcal{S}, E \in \mathcal{B}$, положим $p(L, m, E) = m(L_E)$. Тогда $\mathcal{A}, \mathcal{S}$ и p удовлетворяют аксиомам 1–6.*

Более того, существует взаимно однозначное соответствие между $\mathcal{L}$ и $\mathcal{Q}$, сохраняющее порядок, при котором операции $a \to a'$ соответствует операция $Q \to 1 - Q$.

Говоря менее формально, понятие системы $\mathcal{A}, \mathcal{S}, p$, удовлетворяющей аксиомам 1–6, эквивалентно понятию частично упорядоченного множества $\mathcal{L}$ с ортогональным дополнением и с заданным на нем полным строго выпуклым семейством вероятностных мер. Эта замена оправдывается тем, что системы $\mathcal{L}, \mathcal{S}$ проще исследовать, чем системы $\mathcal{A}, \mathcal{S}, p$. Мы будем называть $\mathcal{Q} = \mathcal{L}$ *логикой* нашей системы [1]). Частично упорядоченное множество $\mathcal{L}$ всех вопросов играет такую же роль в нашей системе, как фазовое пространство в классической механике. Эта аналогия станет еще более полной, если мы будем представлять себе классическое фазовое пространство как булеву алгебру всех борелевских подмножеств, а не как множество точек.

До сих пор наши аксиомы были одинаково применимы и к классической, и к квантовой механике. Сейчас, наконец, мы выделим квантовую механику, приняв некоторое предположение относительно структуры $\mathcal{Q}$. Сначала, однако, мы введем некоторые понятия, которые можно обсудить, не делая дополнительных предположений относительно $\mathcal{Q}$.

Пусть A — наблюдаемая, и пусть E — борелевское подмножество действительной прямой. Если $Q_E^A = 0$, т. е. если $\alpha_A(E) = 0$ при всех $\alpha \in S$, мы скажем, что E имеет меру нуль относительно A. Обозначим через $\mathcal{O}_A$ объединение всех открытых интервалов, имеющих меру нуль относительно A. Доказательство того факта, что $\mathcal{O}_A$ само имеет меру нуль относительно A и содержит любое открытое множество меры нуль относительно A, является простым упражнением из теории функций действительного переменного. Замкнутое множество, состоящее из всех действительных чисел, не принадлежащих $\mathcal{O}_A$, мы будем называть *спектром* A и обозначать через S_A. Каждая точка x, для которой $Q_{\{x\}}^A \neq 0$, конечно, принадлежит S_A. Множество всех таких точек будем называть *точечным спектром* A. Если точечный спектр A является борелевским множеством, дополнение которого имеет меру нуль относительно A, то мы будем говорить, что A имеет *чисто точечный спектр*. Мы увидим, что правила квантования вытекают из того, что некоторые основные наблюдаемые имеют непустой точечный спектр. Мы будем говорить, что наблюдаемая A *ограничена*, если ее спектр S_A содержится в конечном интервале. Наименьшее положительное число N такое, что $|x| \leqslant N$ для всех $x \in S_A$, будет называться *нормой* наблюдаемой A и обозначаться через $\|A\|$.

Пусть A — произвольная ограниченная наблюдаемая, α — произвольное состояние. Тогда α_A — некоторая вероятностная мера, которая сконцентрирована на интервале $-\|A\| \leqslant x \leqslant \|A\|$; поэтому интеграл

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} x\, d\alpha_A(x)$$

существует. Мы будем в соответствии с обычной терминологией теории вероятностей называть значение этого интеграла *математическим ожиданием*, или *средним значением* наблюдаемой A в состоянии α. Мы будем обозначать его через $m_\alpha(A)$. Если A — вопрос, то α_A сконцентрирована в двух точках 0 и 1 и

$$m_\alpha(A) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x\, d\alpha_A(x) = 0 \cdot \alpha_A(\{0\}) + 1 \cdot \alpha_A(\{1\}) = \alpha_A\{1\}.$$

Таким образом, m_α в применении к вопросу дает то же значение, что и символ m_α в его прежнем смысле.

Предположим теперь, что в нашей системе выполняется следующая аксиома, связанная с аксиомой 2.

А к с и о м а 2'. *Если $m_\alpha(A) = m_\alpha(B)$ для всех состояний α, то $A = B$.*

Тогда для двух заданных ограниченных наблюдаемых A_1 и A_2 будет существовать не более одной наблюдаемой A_3, такой, что $m_\alpha(A_3) = m_\alpha(A_1) + m_\alpha(A_2)$ для всех состояний α. Если наблюдаемая A_3 существует, то ее естественно назвать *суммой* $A_1 + A_2$ наблюдаемых A_1 и A_2. Таким образом, при наличии аксиомы 2 мы можем определить, что мы понимаем под суммой $A_1 + A_2$, хотя эта сумма и не всегда существует. Если $A_1 = f_1(B)$ и $A_2 = f_2(B)$,

[1]) См. статью Биркгофа и фон Неймана [Birkhoff G., von Neumann J., The Logic of quantum mechanics, *Annals of Math.*,37 (1936), 835].

то нетрудно показать, что $A_1 + A_2$ существует и равна $(f_1 + f_2)(B)$. Не слишком трудно доказать, что всегда, когда $A_1 + A_2$ существует, $\|A_1 + A_2\| \leqslant \|A_1\| + \|A_2\|$. Далее, очевидно, что если соответствующие суммы существуют, то $(A + B) + C = A + (B + C), A + B = B + A$, и, кроме того, выполняются обычные тождества для умножения наблюдаемых на вещественные числа. Поэтому, если $A_1 + A_2$ существует всегда, то ограниченные наблюдаемые образуют нормированное линейное пространство.

Предположение, что $A + B$ существует всегда, является основным при том построении квантовой механики, которое принято Сигалом [2]). Отправным пунктом его теории служит нормированное векторное пространство всех ограниченных наблюдаемых. Из наших аксиом следует, что $m_\alpha(A^2) \geqslant 0$ для каждого состояния α и для всех наблюдаемых A, из определения суммы следует, что

$$m_\alpha(\lambda A + \mu B) = \lambda m_\alpha(A) + \mu m_\alpha(B).$$

У Сигала состояние по определению есть действительная функция на множестве ограниченных наблюдаемых, которая обладает этими двумя свойствами. С нашей точки зрения, это определение допускает слишком много состояний. Не каждое состояние в смысле Сигала ставит в соответствие каждой ограниченной наблюдаемой некоторое распределение вероятностей. Состояния Сигала — это, по-видимому, все пределы таких состояний, которые действительно ставят в соответствие каждой наблюдаемой вероятностное распределение; в применениях такие идеальные „предельные состояния“ часто бывают удобными.

Если сумма $A + B$ всегда существует, то мы можем определить „симметризованное произведение“ двух ограниченных наблюдаемых, положив $A \circ B = [(A + B)^2 - A^2 - B^2]/2$. В той модели, которую действительно использует квантовая механика, $A \circ B$ дистрибутивно относительно сложения, и множество всех ограниченных наблюдаемых образует коммутативную неассоциативную алгебру такого типа, который алгебраисты называют йордановой алгеброй (Йордан — физик, который начал изучение этих алгебр именно в связи с квантовой механикой). К сожалению, нет никакого известного физического оправдания предположению, что $A \circ B$ всегда дистрибутивно, а Лауденслагер и Шерман привели примеры, показывающие, что дистрибутивность не вытекает из аксиом Сигала.

Пусть Q_1 и Q_2 — вопросы в классической механике, т. е. борелевские подмножества $\mathcal{M}_{V^*}$. Положим

$$R_1 = Q_1 \setminus Q_1 \cap Q_2, \quad R_2 = Q_2 \setminus Q_1 \cap Q_2, \quad Q_3 = Q_1 \cap Q_2;$$

тогда R_1, R_2 и Q_3 попарно не пересекаются, и $Q_1 = R_1 + Q_3$, $Q_2 = R_2 + Q_3$. В общем случае может и не существовать трех вопросов R_1, R_2 и Q_3, таких, что

$$R_1 \between R_2, \quad R_1 \between Q_3, \quad R_2 \between Q_3, \quad Q_1 = R_1 + Q_3, \quad Q_2 = R_2 + Q_3.$$

Если такие вопросы существуют, то мы будем говорить, что Q_1 и Q_2 совместны или *допускают одновременные ответы*. Оправданием такой терминологии служит легко доказываемая теорема, утверждающая, что Q_1 и Q_2 допускают одновременные ответы (в этом смысле) в том и только в том случае, когда существует наблюдаемая A и борелевские множества E_1 и E_2 на прямой, такие, что $Q^A_{E_1} = Q_1$ и $Q^A_{E_2} = Q_2$. Более общим образом, мы назовем две наблюдаемые A и B допускающими одновременное наблюдение, если Q^A_E и Q^B_F допускают одновременные ответы для любой пары E и F из $\mathcal{B}$. В нашей конечной системе аксиом можно будет доказать, что две наблюдаемые A и B допускают одновременное наблюдение тогда и только тогда, когда существуют наблюдаемая C и борелевские функции f и g, такие, что $A = f(C)$ и $B = g(C)$. Вполне возможно, что это можно получить из уже имеющихся аксиом.

Предположим, что наша система такова, что любые два вопроса Q_1 и Q_2 допускают одновременные ответы. Тогда, как нетрудно видеть, наша система является *структурой*, т. е. для любых двух вопросов Q_1 и Q_2 существует наименьший из вопросов, больших каждого из Q_i или равных ему (он обозначается через $Q_1 \cup Q_2$), и наибольший из вопросов, меньших каждого из Q_i или равных ему (он обозначается через $Q_1 \cap Q_2$). Далее, эта структура является булевой алгеброй в том смысле, что на ней задан инволютивный

[2]) Segal I. E. *Annals of Math.*, 48 (1947), 930–948; A mathematical approach to elementary particles and their fields, Lecture notes, University of Chicago, 1955, Ch. 1.

антиавтоморфизм $Q \to 1 - Q$, для которого $Q \cap (1 - Q) = 0$, $Q \cup (1 - Q) = 1$, а также выполняется *дистрибутивный закон*:

$$Q_1 \cap (Q_2 \cup Q_3) = (Q_1 \cap Q_2) \cup (Q_1 \cap Q_3)$$

Обратно, нетрудно видеть, что если наша система является булевой алгеброй, то любые два вопроса допускают одновременные ответы.

Даже если у нас имеются вопросы, не допускающие одновременных ответов, то будет по крайней мере два вопроса — 0 и 1, — совместных с любым вопросом. Мы будем называть множество всех таких вопросов *центром* $\mathcal{Q}$, обозначать его через $C(\mathcal{Q})$. Ясно, что $C(\mathcal{Q})$ всегда является булевой алгеброй. Предположим, что $C(\mathcal{Q})$ содержит элемент Q_0, отличный от 0 и 1. Тогда $1 - Q_0$ также принадлежит $C(\mathcal{Q})$, и любой другой вопрос $R \in \mathcal{Q}$ однозначно представляется в виде $R_1 + R_2$, где $R_1 \leqslant Q_0$ и $R_2 \leqslant 1 - Q_0$. Таким образом, $\mathcal{Q}$ есть „прямая сумма“ двух частично упорядоченных множеств $\mathcal{Q}_1$ и $\mathcal{Q}_2$, где

$$\mathcal{Q}_1 = \{Q : Q \leqslant Q_0\}, \quad \mathcal{Q}_2 = \{Q : Q \leqslant 1 - Q_0\}.$$

Множества $\mathcal{Q}_1$ и $\mathcal{Q}_2$ удовлетворяют всем нашим аксиомам, и мы можем рассмотреть их центры и разложить их дальше, если это возможно. Мы можем попытаться разложить таким образом $\mathcal{Q}$ в прямую сумму $\mathcal{Q}_1 \oplus \mathcal{Q}_2 \oplus \ldots$, где $\mathcal{Q}_j$ *неразложимы* в том смысле, что их центры тривиальны. Конечно, как показывает пример классической механики, вообще говоря, может не существовать такого дискретного разложения. С другой стороны, достаточно ясно, что с помощью современной теории непрерывных прямых сумм можно показать, что каждое $\mathcal{Q}$ является „прямым интегралом“ или „непрерывной прямой суммой“ неразложимых $\mathcal{Q}_j$. При этом, конечно, такая непрерывная сумма будет булевой алгеброй в том и только в том случае, когда все ее неразложимые компоненты тривиальны, т. е. являются одноточечными множествами.

С точки зрения, принятой в этом курсе, основное различие между классической и квантовой механикой состоит в том, что в квантовой механике имеются вопросы, не допускающие одновременных ответов, т. е. $\mathcal{Q}$ не является булевой алгеброй. Можно пойти дальше и установить не только то, чем $\mathcal{Q}$ не является, но и то, чем оно является. Почти все современные теории квантовой механики основываются более или менее явно на следующем предположении, которое мы примем за аксиому.

Аксиома 7. *Частично упорядоченное множество всех вопросов в квантовой механике изоморфно частично упорядоченному по включению множеству всех замкнутых подпространств бесконечномернго сепарабельного комплексного гильбертова пространства.*

Эта аксиома носит совершенно иной характер, чем аксиомы 1–6. Все предыдущие аксиомы были в достаточной степени естественными и физически оправданными; аксиома 7 представляется совершенно произвольной. Почему мы ее приняли ? Можем ли мы оправдать ее появление ? Что еще мы могли бы предположить вместо нее ? Мы обсудим эти вопросы по очереди.

Легче всего ответить на первый из них. Мы приняли эту аксиому, поскольку она „работает“, т. е. приводит к теории, которая объясняет физические явления и успешно предсказывает результаты экспериментов. Возможно, что какое-то совершенно иное предположение было бы ничуть не хуже в этом отношении, но, по-видимому, не найдено ни одного такого предположения [3]).

В идеале хотелось бы иметь некоторый перечень физически правдоподобных предположений, из которых можно было бы вывести аксиому 7, или, за неимением такого, перечень, из которого вытекало бы некоторое множество возможностей для структуры $\mathcal{Q}$, причем все из них, кроме одной, противоречили бы результатам должным образом поставленных экспериментов. В настоящий момент такого перечня аксиом не существует, и ничто не вынуждает нас принять аксиому 7, как логически неизбежную.

С другой стороны, эта аксиома вовсе не является совершенно случайной, как это представляется с первого взгляда. Если мы заменим вопрос: „Чем должно быть $\mathcal{Q}$?“ более простым вопросом: „Каким мы должны взять $\mathcal{Q}$, чтобы основные физические законы имели простую и изящную форму ?“, то мы придем к нескольким возможным вариантам аксиомы 7, которые не слишком сильно отличаются от принятой нами формулировки.

[3]) В этом отношении интересны последние работы ряда математиков в Женевском университете (Jauch, Stueckelberg и др.), посвященные вещественным и кватернионным гильбертовым пространствам.

В этой связи мы рассмотрим сейчас, в каких случаях частично упорядоченное множество может быть „почти булевой алгеброй“. Напомним, что булева алгебра — это дистрибутивная структура с дополнением. То, что в нашем частично упорядоченном множестве имеется дополнение, и даже ортогональное дополнение, следует из прежних аксиом. В целях „регулярности“ разумно предположить, что оно является структурой. Мы попытаемся найти некоторое ослабление дистрибутивного закона $a \cap (b \cup c) = (a \cap b) \cup (a \cap c)$. В частном случае, когда $a \geqslant c$, этот закон принимает вид $a \cap (b \cup c) = (a \cap b) \cup c$. Обратное *неверно*: существует много недистрибутивных структур, у которых из условия $a \geqslant c$ вытекает, что $a \cap (b \cup c) = (a \cap b) \cup c$. Такие структуры называются *модулярными* или *дедекиндовыми* и хорошо изучены.

Дедекиндовы структуры с дополнением можно считать наиболее правильно устроенными частично упорядоченными множествами после булевых алгебр. Во всяком случае, они являются наиболее регулярными из тех, которые серьезно изучались. В частности, если наложены некоторые условия конечности, то известно очень многое о возможной структуре дедекиндовых структур с дополнением.

Пусть $\mathcal{F}$ — произвольное (не обязательно коммутативное) тело, а $V_{\mathcal{F},n}$ — векторное пространство наборов из n элементов $\mathcal{F}$. Тогда частично упорядоченное множество $\mathcal{L}_{\mathcal{F},n}$ всех подпространств $V_{\mathcal{F},n}$ является дедекиндовой структурой с дополнением и имеет место следующая теорема: пусть $\mathcal{L}$ — дедекиндова структура с дополнением, в которой „цепочки“ $a_1 < a_2 < \ldots < a_n$ имеют ограниченную длину; тогда $\mathcal{L}$ является прямой суммой структур вида $\mathcal{L}_{\mathcal{F},n}$ и еще некоторых структур, не содержащих цепочек длины больше 4.

При отсутствии условий, наложенных на цепочки, аналогичной теоремы нет [4]), но по меньшей мере вполне допустимо предположить, что $\mathcal{Q}$ является прямой суммой или прямым интегралом некоторых бесконечномерных обобщений $\mathcal{L}_{\mathcal{F},n}$. Наиболее очевидным из таких обобщений является структура всех замкнутых подпространств некоторого банахова пространства.

Далее, Какутани и автором доказано, что если в структуре всех замкнутых подпространств действительного или комплексного банахова пространства определена операция ортогонального дополнения, то норму банахова пространства можно заменить на эквивалентную так, что пространство превратится в гильбертово пространство с очевидным ортогональным дополнением. Короче говоря, мы естественным образом приходим к тому, что наиболее вероятными „кандидатами“ на участие в прямых суммах и интегралах структур являются $\mathcal{L}^{\mathbb{R}}$ и $\mathcal{L}^{\mathbb{C}}$, где $\mathcal{L}^{\mathbb{R}}$ — структура всех замкнутых подпространств действительного гильбертова пространства, $\mathcal{L}^{\mathbb{C}}$ — структура всех замкнутых подпространств комплексного гильбертова пространства. Не учитывая пока более экзотических возможностей выбора слагаемых, мы видим, что произвол в выборе нашей аксиомы 7 заключается лишь в том, что мы предполагаем наличие только *одного* слагаемого, а также в том, что это слагаемое определяется *комплексным* (а не действительным) гильбертовым пространством.

Предположение, что имеется только одно слагаемое, физически соответствует предположению, что каждая непостоянная наблюдаемая не допускает одновременного наблюдения с некоторыми наблюдаемыми, — предположению, что природа устроена достаточно разумно. Кроме того, естественно начать исследование именно с этого случая из-за его математической простоты. С другой стороны, в недавней работе по „высшим правилам отбора“ Уайтмена, Вика и Вигнера принимается, что, по крайней мере в некоторых случаях, $\mathcal{Q}$ является прямой суммой, и существуют непостоянные универсальные (совместные со всеми другими) наблюдаемые.

Несколько сложнее объяснить значение выбора комплексного векторного пространства вместо действительного. В следующем разделе мы увидим, что существование умножения на i дает возможность перенести на квантовую механику одно из наиболее сильных формальных свойств классической механики, а именно естественное соответствие между наблюдаемыми и однопараметрическими группами симметрий.

Структуры $\mathcal{L}^{\mathbb{R}}$ и $\mathcal{L}^{\mathbb{C}}$ являются, вероятно, наиболее очевидными обобщениями $\mathcal{L}_{\mathcal{F},n}$, но они отнюдь не являются единственно возможными обобщениями. Действительные и комплексные числа не единственные числовые системы, над которыми можно строить гильбертово пространство. Большинство других возможностей придется, скорее всего, отбросить из-за несвязности или других подобных неудобств, однако остаются кватернионы,

[4]) См., однако, статью Капланского [Kaplansky I., Any orthocomplemented complete modular lattice is a continuous geometry, *Annals of Math.*, **61** (1955), 524–541].

и мы должны рассматривать структуру замкнутых подпространств кватернионного гильбертова пространства как возможную замену $\mathcal{L}^{\mathbb{C}}$. Имеются также возможности другого рода.

Структуру $\mathcal{L}^{\mathbb{C}}$ можно также определить как структуру всех самосопряженных идемпотентов в кольце всех ограниченных линейных операторов в комплексном гильбертовом пространстве. Это кольцо представляет собой пример того, что Мюррей и фон Нейман назвали фактором [5]). В случае конечного числа измерений все факторы имеют такой вид, но в бесконечномерном случае такими являются только факторы типа 1. Для каждого фактора типа II_1, II_∞ и III можно образовать структуру всех его самосопряженных идемпотентов, которую также можно рассматривать в качестве возможной модели для $\mathcal{Q}$. В действительности фон Нейман имел в виду именно это применение, развивая теорию факторов. Более того, для фактора типа II_1 соответствующая структура будет дедекиндовой, тогда как, несмотря на те соображения, с помощью которых мы мотивировали введение $\mathcal{L}^{\mathbb{R}}$ и $\mathcal{L}^{\mathbb{C}}$, эти структуры не являются вполне дедекиндовыми. Впрочем, строгий закон модулярности представляется, пожалуй, чересчур сильным в тех случаях, когда отсутствуют сильные условия конечности.

Было бы очень интересно подробно исследовать последствия, к которым привело бы изменение аксиомы 7 в только что указанных направлениях, однако такое исследование пока не проведено. Поэтому мы заканчиваем на этом наши оправдания и продолжаем выводить следствия из аксиомы 7 в том виде, в каком мы ее сформулировали.

Прежде всего, из упомянутой выше теоремы Какутани и автора непосредственно следует, что изоморфизм, о котором говорится в аксиоме 7, можно всегда выбрать так, что если вопрос Q соответствует замкнутому подпространству M, то $1-Q$ соответствует замкнутому подпространству $M^\perp$ — ортогональному дополнению M. Далее, будет удобно отождествить каждое замкнутое подпространство с проектором на это подпространство. Другими словами, мы можем считать, что у нас имеется взаимно однозначное соответствие между элементами $\mathcal{Q}$ и проекторами в бесконечномерном сепарабельном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, такое, что если $P \sim Q$, то $1-P \sim 1-Q$, и если $Q_1 \sim P_1$ и $Q_2 \sim P_2$, то $Q_1 \leqslant Q_2$ тогда и только тогда, когда $P_1P_2 = P_2P_1 = P_1$.

Нашей следующей задачей будет установить, какие меры на вопросах должны считаться состояниями, и благодаря одной глубокой теореме Глисона мы увидим, что существует только одно разумное решение этой задачи. Мы начнем с некоторых примеров мер на множестве вопросов.

Пусть φ — произвольный вектор в нашем гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Для каждого вопроса Q положим $m_\varphi(Q) = (P(\varphi)|\varphi)$, где P — соответствующий проектор. Очевидно, что m_φ есть некоторая вероятностная мера на $\mathcal{Q}$. Другие примеры можно получить, образуя выпуклые линейные комбинации $\gamma_1 m_{\varphi_1} + \gamma_2 m_{\varphi_2} + \ldots$, где $\gamma_i \geqslant 0$, $\sum \gamma_i = 1$, и φ_i — единичные векторы. Согласно теореме Глисона, никаких иных примеров не существует: для любой вероятностной меры m на $\mathcal{Q}$ существуют последовательность $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ элементов $\mathcal{H}$ единичной длины (которые можно выбрать ортогональными) и последовательность $\gamma_1, \gamma_2, \ldots$ положительных чисел, удовлетворяющая условию $\gamma_1 + \gamma_2 + \ldots = 1$, такие, что $m = \gamma_1 m_{\varphi_1} + \gamma_2 m_{\varphi_2} + \ldots$. Доказательство Глисона этой в высшей степени нетривиальной теоремы можно найти в его статье [6]).

Мы должны решить, какие из этих мер соответствуют состояниям. Как отмечалось ранее, нет никаких оснований заранее предполагать, что все меры соответствуют состояниям, однако благодаря теореме Глисона мы сможем доказать это, если примем еще одну вполне правдоподобную аксиому.

А к с и о м а 8. *Если Q — вопрос, отличный от 0, то существует состояние α, для которого $m_\alpha(Q) = 1$.*

Т е о р е м а. *Каждая мера на множестве вопросов соответствует некоторому состоянию.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть φ — произвольный единичный вектор в $\mathcal{H}$, и P — проектор на одномерное подпространство, порожденное φ. Согласно аксиоме 8, существует состояние α, для которого $m_\alpha(Q) = 1$, где Q — вопрос, соответствующий проектору P. В силу теоремы Глисона,

$$m_\alpha = \gamma_1 m_{\varphi_1} + \gamma_2 m_{\varphi_2} + \ldots$$

[5]) Определение факторов и начальные сведения о них изложены в гл. VII книги Наймарка [Н а й м а р к М. А., Нормированные кольца, М., 1956]. — *Прим. ред.*

[6]) G l e a s o n A.M., *J. Math. Mechanics*, **6** (1953), 885–893.

при некоторых γ_i и φ_i; поэтому

$$0 = m_\alpha(1-Q) = \gamma_1[1-(P(\varphi_1)|\varphi_1)] + \gamma_2[1-(P(\varphi_2)|\varphi_2)] + \ldots,$$

т. е. $\gamma_j[1-(P(\varphi_j)|\varphi_j)] = 0$ для всех j. Следовательно $P(\varphi_j) = \varphi_j$ для каждого j, т. е. для каждого j $\varphi_j = c_j\varphi$, где $|c_j| = 1$. Таким образом,

$$m_{\varphi_j}(P') = (P'(\varphi_j)|\varphi_j) = (P'(c_j\varphi)|c_j\varphi) = (P'\varphi|\varphi)$$

для всех P'. Отсюда следует, что $m_{\varphi_j} = m_\varphi$ для всех j, поэтому $\sum \gamma_j m_{\varphi_j} = m_\varphi$, т. е. $m_\alpha = m_\varphi$. Следовательно, m_φ соответствует некоторому состоянию. Поскольку φ — произвольный единичный вектор, и каждая мера на вопросах имеет вид $\sum \gamma_j m_{\varphi_j}$, то, применяя аксиому 4, мы получаем, что любая мера на $\mathcal{Q}$ соответствует некоторому состоянию.

Нетрудно видеть, что все состояния, которым соответствуют меры на $\mathcal{Q}$ вида m_φ, где φ — единичный вектор из $\mathcal{H}$, являются чистыми состояниями. Очевидно, что все остальные состояния не являются чистыми. Поэтому $\varphi \to m_\varphi$ — отображение единичной сферы гильбертова пространства на множество чистых состояний нашей системы. Это отображение не взаимно однозначно, но мы можем непосредственно убедиться в том, что $m_\varphi = m_\psi$ тогда только тогда, когда $\varphi = c\psi$ для некоторого комплексного числа c, равного по модулю 1. Поэтому, если мы отождествим φ с $e^{ix}\varphi$, то получим взаимно однозначное соответствие между единичными векторами в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ и чистыми состояниями.

Теперь посмотрим, как выглядят в свете аксиомы 7 наблюдаемые нашей системы. Согласно общей теории, наблюдаемые взаимно однозначно соответствуют мерам со значениями в множестве всех вопросов. С другой стороны, мы отождествили теперь вопросы с проекторами в гильбертовом пространстве. Таким образом, наблюдаемые соответствуют взаимно однозначным образом проекторным мерам в нашем гильбертовом пространстве. Но, согласно спектральной теореме, существует естественное взаимно однозначное соответствие между проекторными мерами и (не обязательно ограниченными) самосопряженными операторами. Объединяя эти два соответствия, мы устанавливаем взаимно однозначное соответствие между наблюдаемыми и самосопряженными операторами.

Пусть A — произвольный самосопряженный оператор в $\mathcal{H}$, φ —произвольный единичный вектор, и E — борелевское множество. Какова вероятность того, что в чистом состоянии, определяемом φ, измерение наблюдаемой, определяемой A, будет давать результат из множества E ? Для того чтобы ответить на этот вопрос, нужно сначала перейти к проекторной мере P^A, определяемой оператором A согласно спектральной теореме. Тогда проектором, соответствующим вопросу: „Лежит ли значение нашей наблюдаемой в E?“ — будет P^A_E, а искомая вероятность будет равна $(P^A_E\varphi|\varphi)$. Мы можем теперь кратко сформулировать основные положения квантовой механики.

Наблюдаемые взаимно однозначно соответствуют самосопряженным операторам в сепарабельном бесконечномерном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Чистые состояния взаимно однозначно соответствуют одномерным подпространствам $\mathcal{H}$. Вероятностное распределение, которое соответствует наблюдаемой, определяемой оператором A, в чистом состоянии, определяемом одномерным подпространством, порожденным единичным вектором φ, задается формулой

$$E \to (P^A_E(\varphi)|\varphi),$$

где P^A_E — проекторная мера, соответствующая оператору A согласно спектральной теореме. Каждое состояние представляет собой некоторую (вообще говоря, бесконечную) выпуклую комбинацию чистых состояний.

Введение самосопряженных операторов в этом месте могло показаться искусственным, поскольку мы тут вернулись обратно к основной проекторной мере для того, чтобы получить статистическое распределение наблюдаемой. Однако, как мы сейчас увидим, операторы сами по себе играют очень важную роль во всей теории; в приложениях бывают известны именно операторы и требуется найти их спектральное разложение.

В качестве первого примера непосредственного применения операторов мы вычислим среднее значение наблюдаемой, определяемой оператором A, в состоянии, определяемом φ. Оно будет равно

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\, d\alpha(x),$$

где α — соответствующая вероятностная мера, т. е. $E \to (P_E^A(\varphi)|\varphi)$. Но, согласно спектральной теореме,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\, d(P_x^A(\varphi)|\varphi) = (A\varphi|\varphi);$$

поэтому искомое среднее значение равно $(A\varphi|\varphi)$, т. е. может быть выражено непосредственно через A и φ без обращения к P^A. Конечно, если оператор A неограничен, то вектор A_φ не всегда определен, но, поскольку неограниченная наблюдаемая не обязана иметь среднее значение во всех состояниях, мы и не должны были ожидать, что $(A\varphi|\varphi)$ будет определено при всех φ.

Пусть A_1 и A_2 — ограниченные самосопряженные операторы, причем $(A_1\varphi|\varphi) = (A_2\varphi|\varphi)$ при всех φ. Тогда, заменяя φ на $\theta + c\psi$ и заставляя c пробегать всевозможные комплексные значения, мы без труда получим, что $(A_1\theta|\psi) = (A_2\theta|\psi)$ для всех θ и ψ и, следовательно, $A_1 = A_2$. Поскольку, как легко видеть, ограниченные наблюдаемые соответствуют в точности ограниченным самосопряженным операторам, аксиома 2' выполняется, и поэтому мы можем выяснить, всегда ли существует сумма двух наблюдаемых. Из тождества

$$((A+B)\varphi|\varphi) = (A\varphi|\varphi) + (B\varphi|\varphi)$$

мы сразу же заключаем, что для любых двух ограниченных наблюдаемых существует сумма, и что оператор, соответствующий этой сумме, является суммой операторов, соответствующих данным наблюдаемым. Поскольку два неограниченных самосопряженных оператора могут иметь непересекающиеся области определения, мы, за исключением специальных случаев, ничего не можем сказать о сумме двух неограниченных наблюдаемых.

Пусть A' — некоторая наблюдаемая, и A — самосопряженный оператор, который ей соответствует; пусть, далее, $f(x)$ — произвольная борелевская функция на прямой. Мы можем определить наблюдаемую $f(A')$ в соответствии с аксиомой 3, и самосопряженный оператор $f(A)$ так, как мы это делали при обсуждении спектральной теоремы. Будет ли оператор $f(A)$ соответствовать наблюдаемой $f(A')$? Легко показать, что будет. Действительно, проекторная мера, соответствующая $f(A)$, есть $E \to P^A_{f^{-1}(E)}$, а вопросная мера, соответствующая $f(A')$, есть $E \to Q^{A'}_{f^{-1}(E)}$. Поскольку $Q_F^{A'}$ и P_F^A соответствуют друг другу при всех F, наше утверждение верно.

Пусть φ — собственный вектор самосопряженного оператора A, и λ — соответствующее собственное значение; тогда $P^A_{\{\lambda\}}\varphi = \varphi$, т. е. $(P_E^A\varphi|\varphi) = 1$, если $\lambda \in E$, и $(P_E^A\varphi|\varphi) = 0$ в противном случае. Другими словами, собственный вектор самосопряженного оператора определяет состояние, в котором соответствующая наблюдаемая имеет с вероятностью единица соответствующее собственное значение. Обратно, если $(P^A_{\{\lambda\}}\varphi|\varphi) = 1$ для некоторых φ, A и λ, то $P^A_{\{\lambda\}}(\varphi) = \varphi$ и, как нетрудно показать, $A(\varphi) = \lambda\varphi$. Если A имеет чисто точечный спектр, и $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ — базис из собственных векторов с собственными значениями $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$ соответственно, то каждый единичный вектор φ можно однозначным образом представить в виде $c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + \ldots$. Нетрудно подсчитать, что в состоянии, определяемом вектором φ, наблюдаемая, соответствующая A, принимает значение λ_j с вероятностью $|c_j|^2$ и принимает значение на дополнении к множеству $\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots\}$ с вероятностью нуль.

Если λ — точка непрерывного спектра оператора A, то не будет состояний, в которых значение λ принимается с положительной вероятностью. С другой стороны, при любом $\varepsilon > 0$ проектор $P^A_{[\lambda-\varepsilon,\lambda+\varepsilon]}$ будет отличен от нуля, и любой единичный вектор из подпространства, соответствующего этому проектору, определяет чистое состояние, в котором наблюдаемая с вероятностью единица принимает значение между $\lambda - \varepsilon$ и $\lambda + \varepsilon$. Мы предоставляем доказательство этих утверждений читателю.

Пусть A и B — самосопряженные операторы. В теории операторов есть теорема, утверждающая, что если A и B ограничены, то $AB = BA$ тогда и только тогда, когда $P_E^A P_F^B = P_F^B P_E^A$ при всех E и F. Поскольку последнее условие имеет смысл независимо от того, ограничены ли операторы A и B, мы примем его за определение коммутирования в общем случае. Мы будем, таким образом, говорить, что A и B коммутируют, тогда и только тогда, когда соответствующие наблюдаемые допускают одновременное наблюдение в определенном выше смысле. На самом деле теперь мы можем дать более удовлетворительное объяснение нашего определения „одновременной наблюдаемости“. Если A и B коммутируют, то, как это следует из общей теоремы, существует самосопряженный оператор C и борелевские функции f и g, такие, что $A = f(C)$ и $B = g(C)$. Поэтому наблюдаемые A' и B' являются функциями одной и той же наблюдаемой C' и действительно допускают одновременное наблюдение. Обратно, если A' и B' ограничены и допускают одновременное наблюдение, то мы можем говорить об их произведении; оператор, соответствующий этому произведению, должен быть равен

$$\frac{(A+B)^2 - A^2 - B^2}{2} = \frac{AB + BA}{2}.$$

Оператор, соответствующий ${A'}^2 B'$, с одной стороны, должен быть равен

$$\frac{1}{2}\left[\frac{A(AB+BA)}{2} + \frac{(AB+BA)A}{2}\right] = \frac{A^2B + 2ABA + BA^2}{4}$$

а с другой — равен $(A^2B + BA^2)/2$; поэтому $ABA = (A^2B + BA^2)/2$, и то же самое верно для $f(A)$ и $g(B)$ при любых функциях f и g. Таким образом,

$$P_E^A P_F^B P_E^A = \frac{P_E^A P_F^B + P_F^B P_E^A}{2}$$

для всех E и F. Умножая это равенство на P_E^A сначала слева, а затем справа, получаем два уравнения; вычитая одно из них из другого, находим, что $P_E^A P_F^B = P_F^B P_E^A$, т. е. что A и B действительно коммутируют.

Если A и B не коммутируют, то имеются некоторые ограничения на степень, с которой вероятностные распределения этих наблюдаемых могут одновременно концентрироваться около отдельных точек. Мы можем получить количественную характеристику степени дисперсии или „размазанности“ δ некоторой наблюдаемой в данном состоянии, извлекая квадратный корень из среднего значения квадрата разности между наблюдаемой и ее средним значением. Если A — соответствующий оператор, и φ — единичный вектор, определяющий состояние, то дисперсия $\delta(A,\varphi)$ вычисляется по формуле

$$\begin{aligned}\delta^2(A,\varphi) &= ((A - (A\varphi|\varphi)I)^2(\varphi)|\varphi) = ((A^2 - 2(A\varphi|\varphi)A + (A\varphi|\varphi)^2 I)\varphi|\varphi) = \\ &= (A^2\varphi|\varphi) - 2(A\varphi|\varphi)^2 + (A\varphi|\varphi)^2 = (A^2\varphi|\varphi) - (A\varphi|\varphi)^2.\end{aligned}$$

Пусть теперь A и B — два самосопряженных оператора, а φ — вектор из пересечения их областей определения, такой что $AB(\varphi)$ и $BA(\varphi)$ определены. Найдем нижнюю границу для произведения $\delta(A,\varphi)\,\delta(B,\varphi)$; мы имеем

$$2\Im(A\varphi|B\varphi) = (A\varphi|B\varphi) - (B\varphi|A\varphi) = (BA(\varphi)|\varphi) - (AB(\varphi)|\varphi) = ((BA - AB)(\varphi)|\varphi),$$

следовательно,

$$|((BA-AB)(\varphi)|\varphi)| \leqslant 2|(A\varphi|B\varphi)| \leqslant 2\,\|A\varphi\|\cdot\|B\varphi\|.$$

Заменяя здесь A на $A - aI$ и B на $B - bI$, где a и b — произвольные числа, и пользуясь тем, что

$$(B - bI)(A - aI) - (A - aI)(B - bI) = BA - AB,$$

мы получаем

$$|((BA-AB)(\varphi)|\varphi)| \leqslant 2\,\|A\varphi - a\varphi\|\cdot\|B\varphi - b\varphi\|.$$

Но

$$\delta^2(A,\varphi) = (A^2\varphi|\varphi) - (A\varphi|\varphi)^2 = ((A - (A\varphi|\varphi)I)\varphi|(A - (A\varphi|\varphi)I)\varphi) = \|(A - (A\varphi|\varphi)I)\varphi\|^2,$$

т. е.

$$\delta(A,\varphi) = \|(A - (A\varphi|\varphi)I)\varphi\| = \|A\varphi - (A\varphi|\varphi)\varphi\|,$$

поэтому

$$|((BA-AB)(\varphi)|\varphi)| \leqslant 2\,\delta(A,\varphi)\cdot\delta(B,\varphi).$$

и произведение двух дисперсий ограничено снизу числом

$$\frac{|(BA-AB)(\varphi)|\varphi)|}{2}.$$

Мы увидим далее, что если A — оператор, соответствующий прямоугольной координате, а B — оператор, соответствующий производной этой координаты по времени, то $i(AB - BA)$ только некоторым скалярным множителем c отличается от тождественного оператора, причем скаляр c обратно пропорционален массе, ассоциированной с соответствующей координатой; поэтому для каждого состояния $\delta(A,\varphi)\,\delta(B,\varphi) \geqslant c/2$. Для обычных масс величина $\sqrt{c/2}$ значительно меньше, чем дисперсия, происходящая из-за ошибок эксперимента. Поэтому для любых практических целей можно считать, что обе наблюдаемые имеют вероятностные распределения, одновременно сконцентрированные в точках. Однако для масс атомного размера $\sqrt{c/2}$ имеет гораздо большее значение, и становится невозможным сделать одну из дисперсий достаточно малой, не слишком увеличивая вторую. Соотношение $\delta(A,\varphi)\,\delta(B,\varphi) \geqslant c/2$ является точной формой известного принципа неопределенности Гейзенберга. Величина c оказывается равной $h/(2\pi m)$, где h — постоянная Планка.

В заключение этого раздела мы приведем более изящное описание смешанных состояний при помощи операторов. Пусть A — ограниченный самосопряженный оператор с чисто точечным спектром, $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ — полная ортонормальная система собственных векторов и $A(\varphi_j) = \lambda\varphi_j$. Если $|\lambda_1| + |\lambda_2| + \ldots < \infty$, то мы будем говорить, что A — *ядерный* оператор, или оператор *с конечным следом*, и будем называть $\mathrm{Tr}(A) = \lambda_1 + \lambda_2 + \ldots$ *следом* оператора A. Более общим образом, пусть C — произвольный ограниченный оператор, $A = (C + C^*)/2$ и $B = (C - C^*)/2i$. Тогда A и B ограничены, самосопряжены, и $C = A + Bi$. Мы скажем, что C ядерный оператор, если таковыми являются A и B, и положим $\mathrm{Tr}(C) = \mathrm{Tr}(A) + i\mathrm{Tr}(B)$. Легко показать, что если C — произвольный ядерный оператор, то для любого ортонормированного базиса $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ в $\mathcal{H}$ будет иметь место разложение

$$\mathrm{Tr}(C) = (C(\varphi_1)|\varphi_1) + (C(\varphi_2)|\varphi_2) + \ldots,$$

причем ряд сходится абсолютно. Отсюда непосредственно следует, что $\mathrm{Tr}(C_1 + C_2) = \mathrm{Tr}(C_1) + \mathrm{Tr}(C_2)$, если все три следа существуют. Нетрудно также доказать, что $C_1 + C_2$, $C_1 S$ и SC_1 будут ядерными операторами, если C_1 и C_2 — ядерные операторы, а S — любой ограниченный линейный оператор; более того, $\mathrm{Tr}(SC_1) = \mathrm{Tr}(C_1 S)$.

Пусть теперь φ — единичный вектор в $\mathcal{H}$, и P_φ — оператор $\psi \to (\psi|\varphi)\varphi$, т. е. проектор на одномерное подпространство, состоящее из векторов, кратных φ, следовательно, ядерный оператор со следом 1. Вообще проектор на *конечномерное* подпространство будет ядерным оператором, след которого равен размерности соответствующего подпространства. Если S — любой ограниченный линейный оператор, то

$$(P_\varphi S(\varphi)|\varphi) = (S(\varphi)|\varphi),$$

и для φ', ортогональных к φ, $(P_\varphi S(\varphi')|\varphi') = 0$. Поэтому, рассматривая φ как часть полной ортонормальной системы, мы получаем $\mathrm{Tr}(P_\varphi S) = (S(\varphi)|\varphi)$; следовательно,

$$m_\varphi(P) = \mathrm{Tr}(P_\varphi P) = \mathrm{Tr}(PP_\varphi)$$

для каждого проектора P. Далее, пусть A — произвольный ограниченный самосопряженный ядерный оператор с неотрицательным спектром и со следом 1; $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ — его собственные векторы. Тогда $A(\varphi_j) = \gamma_j\varphi_j$, где $\gamma_j \geqslant 0$, $\gamma_1 + \gamma_2 + \ldots = 1$, и для любого проектора

$$\mathrm{Tr}(PA) = \mathrm{Tr}(AP) = \gamma_1 m_{\varphi_1}(P) + \gamma_2 m_{\varphi_2}(P) + \ldots;$$

поэтому для любого оператора A с указанными выше свойствами $P \to \mathrm{Tr}(AP)$ есть мера на множестве вопросов, т. е. состояние.

Обратное тоже верно. Если α — любое состояние, то

$$m_\alpha = \gamma_1 m_{\varphi_1} + \gamma_2 m_{\varphi_2} + \ldots;$$

где $\gamma_j \geqslant 0$ и $\gamma_1 + \gamma_2 + \ldots = 1$. Векторы φ_j не обязательно ортогональны, однако

$$A = \gamma_1 P_{\varphi_1} + \gamma_2 P_{\varphi_2} + \ldots$$

представляет собой ограниченный неотрицательный самосопряженный оператор со следом 1, и $\mathrm{Tr}(AP) = m_\alpha(P)$ для всех проекторов P.

Итак, мы доказали, что состояния можно поставить во взаимно однозначное соответствие с неотрицательными самосопряженными ядерными операторами со следом 1 таким образом, что для соответствующих друг другу наблюдаемой α и оператора A будет выполняться равенство $m_\alpha(P) = \mathrm{Tr}(PA)$ для всех проекторов P.

Заметим, что среднее значение ограниченной наблюдаемой, определяемой самосопряженным оператором B, в смешанном состоянии $\gamma_1\alpha_{\varphi_1} + \gamma_2\alpha_{\varphi_2} + \ldots$ равно

$$\gamma_1(B\varphi_1|\varphi_1) + \ldots = \gamma_1 \mathrm{Tr}(BP_{\varphi_1}) + \ldots = \mathrm{Tr}(B(\gamma_1 P_{\varphi_1} + \ldots)) = \mathrm{Tr}(BA),$$

где A — оператор, определяющий состояние.

Интересно, что, описывая состояния операторами, мы получили точное взаимно однозначное соответствие в отличие от того, что мы имели при представлении чистых состояний единичными векторами. Это объясняется тем, что при $|c| = 1$ операторы P_φ и $P_{c\varphi}$ совпадают; неоднозначность возникла из-за того, что мы пытались описывать проекторы на одномерные подпространства некоторыми векторами в этих подпространствах.

Смешанные состояния и операторы, описывающие их, были введены в квантовую механику фон Нейманом. Они играют центральную роль в статистической квантовой механике. Матрица оператора, определяющего смешанное состояние (относительно некоторого подходящего базиса), известна физикам как матрица плотности фон Неймана.

2.3 Квантовая динамика и уравнение Шредингера

До этого момента мы занимались квантовой статикой — взаимоотношениями между состояниями и наблюдаемыми в некоторый фиксированный момент времени. В этом разделе мы будем рассматривать квантовую динамику — законы, по которым состояния меняются с течением времени. Несмотря на „недетерминированный“ характер квантовой механики, проявляющийся в том, что в ней возможны только статистические утверждения об ожидаемых результатах измерения наблюдаемых, оказывается, что связь состояний в различные моменты времени строго детерминирована; другими словами, состояние в момент времени $t_2 > t_1$ однозначно определяется отрезком времени $t_2 - t_1$ и состоянием в момент времени t_1. Точно так же как в классической механике, мы получаем здесь однопараметрическую полугруппу $t \to V_t$ преобразований $\mathcal{S}$ в $\mathcal{S}$, такую, что если состояние системы при $t = t_1$ было α, то при $t = t_2$ оно будет $V_{t_2 - t_1}(\alpha)$.

Пусть $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ — состояния, а $\gamma_1, \gamma_2, \ldots$ — положительные числа, сумма которых равна 1. Предположим, что при $t = 0$ мы находимся в состоянии α_j с вероятностью γ_j; тогда при $t = t_0$ мы с вероятностью γ_j находимся в состоянии $V_{t_0}(\alpha_j)$. Таким образом, если при $t = 0$ мы находимся в состоянии $\gamma_1\alpha_1 + \gamma_2\alpha_1 + \ldots$, то при $t = t_0$ мы находимся в состоянии $\gamma_1 V_{t_0}\alpha_1 + \gamma_2 V_{t_0}\alpha_2 + \ldots$. Другими словами, каждое V сохраняет выпуклую комбинацию состояний. Эти физические соображения в совокупности с естественным предположением, что для каждой фиксированной тройки A, α, E из $\mathcal{A} \times \mathcal{S} \times \mathcal{B}$ вероятность $p(A, \alpha, E)$ должна мало меняться за короткий промежуток времени, приводят к следующему дополнению нашей системы аксиом.

Аксиома 9. *Задана некоторая однопараметрическая полугруппа $t \to V_t$ преобразований $\mathcal{S}$ в $\mathcal{S}$ такая, что для каждой последовательности элементов $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ из $\mathcal{S}$, каждой последовательности $\gamma_1, \gamma_2, \ldots$ неотрицательных чисел с суммой 1 и для всех $t \geqslant 0$ справедливо равенство*

$$V_t(\gamma_1\alpha_1 + \gamma_2\alpha_2 + \ldots) = \gamma_1 V_t(\alpha_1) + \gamma_2 V_t(\alpha_2) + \ldots$$

и для каждой тройки $(A, \alpha, E) \in \mathcal{A} \times \mathcal{S} \times \mathcal{B}$ вероятность $p(A, V_t(\alpha), E)$ является непрерывной функцией t.

Так же как в классической механике, мы будем говорить, что наша система обратима, если каждое преобразование V_t имеет обратное преобразование V_t^{-1}. Полагая $V_{-t} = V_t^{-1}$, мы превратим $t \to V_t$ в однопараметрическую группу. Мы будем рассматривать только обратимые системы.

Как мы показали в конце предыдущего раздела, $\mathcal{S}$ можно отождествить со множеством всех самосопряженных операторов со следом 1 и с неотрицательным спектром. Таким образом, каждое V_t является отображением операторов на операторы. Пусть U — произвольный унитарный оператор в $\mathcal{H}$. Ясно, что $A \to UAU^{-1}$ — отображение $\mathcal{S}$ на $\mathcal{S}$, сохраняющее выпуклые комбинации. То же самое верно, если U — антиунитарный оператор, т. е. антилинейное $(U(\lambda\varphi) = \bar{\lambda}U(\varphi))$ и сохраняющее скалярное произведение отображение из $\mathcal{H}$ на $\mathcal{H}$. С другой стороны, используя результаты Кадисона [7]), можно показать, что каждое взаимно однозначное отображение $\mathcal{S}$ на $\mathcal{S}$, сохраняющее выпуклые комбинации, имеет вид $A \to UAU^{-1}$, где U — унитарный или антиунитарный оператор. Далее, если U_1 и U_2 определяют одно и то же преобразование $\mathcal{S}$ в $\mathcal{S}$, то оператор $U_1^{-1}U_2$ коммутирует со всеми операторами A из $\mathcal{S}$ и поэтому, как нетрудно показать, равен тождественному оператору, умноженному на константу. Таким образом, $U_1 = cU_2$, где $|c| = 1$, поскольку U_1 и U_2 унитарны (или антиунитарны). Для каждого t выберем U_t так, чтобы $V_t(A) = U_tAU_t^{-1}$, тогда

$$V_{t_1+t_2}(A) = U_{t_1+t_2}\,A\,U_{t_1+t_2}^{-1} = V_{t_1}V_{t_2}(A) = U_{t_1}U_{t_2}\,A\,U_{t_2}^{-1}U_{t_1}^{-1},$$

следовательно, $U_{t_1+t_2} = c(t_1,t_2)\,U_{t_1}U_{t_2}$, где $|c(t_1,t_2)| = 1$, в частности, $U_{2t} = c(t,t)\,U_t^2$, откуда $U_t = c(t/2,t/2)\,U_{t/2}^2$. Поскольку квадрат антиунитарного оператора представляет собой унитарный оператор, U_t является унитарным оператором при всех t.

Если мы применим U_t к чистому состоянию P_φ, где φ — некоторый единичный вектор, то

$$(U_t\,P_\varphi\,U_t^{-1})(U_t(\varphi)) = U_t\varphi,$$

т. е.

$$U_t\,P_\varphi\,U_t^{-1} = P_{U_t\varphi}.$$

Таким образом, чистое состояние, определяемое единичным вектором φ, за время t переходит в чистое состояние, определяемое вектором $U_t(\varphi)$. Далее,

$$p(A,\alpha_\varphi,E) = \alpha_\varphi(P_E^A) = (P_E^A\varphi|\varphi);$$
$$p(A,U_t(\alpha_\varphi),E) = (P_E^A\,U_t(\varphi)|U_t(\varphi));$$

следовательно, $(P\,U_t(\varphi)|U_t(\varphi))$ для каждого проектора P непрерывно по t при всех φ, поэтому $(P_\psi\,U_t(\varphi)|U_t(\varphi))$ для всех φ и ψ непрерывно по t согласно аксиоме 4. С другой стороны,

$$(P_\psi\,U_t(\varphi)|U_t(\varphi)) = (U_t(\varphi)|\psi)(\psi|U_t(\varphi)) = |(U_t(\varphi)|\psi)|^2\,;$$

следовательно, $|(U_t(\varphi)|\psi)|^2$ непрерывно по t при всех φ и ψ.

Не изменяя V_t, мы можем заменить U_t на $a(t)\,U_t$, где $|a(t)| = 1$. Можно показать, что эта замена может быть произведена таким образом, что $(U_t(\varphi)|\psi)$ будет непрерывно по t и при этом $c(t_1,t_2) = 1$. (Мы опускаем достаточно длинное детальное доказательство.) Другими словами, мы можем найти *непрерывную однопараметрическую унитарную группу* $t \to U_t$ такую, что $V_t(A) = U_t\,A\,U_t^{-1}$ при всех t и A. Если a — произвольное действительное число, то $t \to e^{-iat}U_t$ определяет ту же самую группу V, но это единственная неоднозначность; группа U_t определяется с точностью до e^{-iat}. Мы будем называть $t \to U_t$ *динамической группой нашей системы*. Ее существование можно рассматривать как основной постулат общей квантовой динамики.

Применяя теорему Стона к унитарной группе $t \to U_t$, мы можем записать эту группу в виде $t \to e^{-iHt}$, где H — некоторый самосопряженный оператор, и $-iH$ — инфинитезимальная образующая группы $t \to U_t$. Самосопряженный оператор H, который полностью определяет динамику нашей системы, будет называться *динамическим оператором*. Он играет такую же роль в квантовой механике, как функция Гамильтона — в классической. Так же как и эта функция, он определяется с точностью до аддитивной постоянной. Конечно, оператор H однозначно определяется группой U_t, но замена U_t на $e^{-iat}U_t$ эквивалентна прибавлению к H тождественного оператора, умноженного на a.

Поскольку H — самосопряженный оператор, ему соответствует некоторая наблюдаемая, и эта наблюдаемая, конечно, является одной из наиболее важных. Как мы увидим, она с точностью до постоянного множителя равна величине, являющейся аналогом полной энергии в квантовой механике.

Пусть φ_0 — некоторый единичный вектор из области определения H. Тогда в момент времени t состояние, которое в момент времени 0 определялось вектором φ_0, будет

[7]) Kadison, *Annals of Math.*, 54 (1951), 325.

определяться вектором $U_t(\varphi_0) = e^{-itH}\varphi_0$. Положим $\varphi_t = e^{-itH}\varphi_0$, тогда φ_t как функция t удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{d\varphi_t}{dt} = -iH(\varphi_t).$$

Это абстрактная форма известного уравнения Шредингера. Оно играет такую же роль в квантовой механике, какую уравнение Гамильтона–Якоби играет в классической механике. Это — дифференциальное уравнение первого порядка (в бесконечномерном пространстве), решения которого являются траекториями чистых состояний. Ниже мы переведем его в конкретную форму, причем φ будут комплексными функциями $3n$ переменных, а H — некоторым дифференциальным оператором. Уравнение Шредингера превратится тем самым в уравнение с частными производными первого порядка по времени.

Пусть φ — собственный вектор оператора H, тогда $H(\varphi) = \lambda\varphi$ и $e^{-itH}(\varphi) = e^{-it\lambda}\varphi$. Поэтому $e^{-itH}(\varphi)$ и φ при всех t определяют то же самое состояние. Другими словами, состояние, определяемое φ, является стационарным в том смысле, что оно не меняется со временем. Обратно, если $e^{-itH}(\varphi) = \rho(t)\varphi$, т. е. если φ определяет стационарное чистое состояние, то $\rho(t) = e^{-it\lambda}$ и, следовательно, $H(\varphi) = \lambda\varphi$. Стационарные чистые состояния — это те и только те состояния, которые определяются собственными векторами динамического оператора H.

Конечно, H может не иметь собственных векторов. Рассмотрим противоположный случай, когда H имеет чисто точечный спектр. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ — полная система собственных векторов, и $H(\varphi_i) = \lambda_i\varphi_i$. Если ψ представляет некоторое чистое состояние, и $\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + \ldots$, то

$$U_t(\psi) = c_1 e^{-i\lambda_1 t}\varphi_1 + c_2 e^{-i\lambda_2 t}\varphi_2 + \ldots.$$

Таким способом мы можем получить решение уравнения Шредингера в явном виде.

В квантовой механике мы будем называть наблюдаемую A' *интегралом*, если ее вероятностное распределение не меняется со временем, т. е. если $p(A', \alpha_{U_t(\varphi)}, E)$ не зависит от t при всех φ и E. Это означает, что

$$(P_E^A\, U_t(\varphi)|U_t\varphi) = (U_t^{-1} P_E^A\, U_t(\varphi)|\varphi)$$

не зависит от t и, следовательно,

$$(U_t^{-1} P_E^A\, U_t(\varphi)|\varphi) = (P_E^A(\varphi)|\varphi)$$

при всех t, E и φ. Таким образом, оператор U_t коммутирует с P_E^A при всех t и E. Но по общей теореме теории операторов U_t коммутирует со всеми P_E^A при всех t тогда и только тогда, когда коммутируют A и H. Таким образом, интегралы — это в точности те наблюдаемые, для которых соответствующие операторы коммутируют с H.

Поскольку H коммутирует сам с собой, соответствующая наблюдаемая является интегралом, играющим весьма важную роль в квантовой механике. Мы увидим далее, что этот интеграл только постоянным множителем отличается от аналога интеграла энергии в квантовой механике. Таким образом, стационарные состояния любой системы в квантовой механике — это в точности те состояния, в которых энергия имеет определенное значение с вероятностью единица.

Для заданной наблюдаемой, которая не является интегралом, можно вычислить ход изменения ее среднего значения со временем. Пусть A — самосопряженный оператор, соответствующий этой наблюдаемой, а φ — единичный вектор из области определения A. Тогда, если при $t = 0$ система находилась в состоянии, определяемом φ, то в момент времени t наша наблюдаемая будет иметь среднее значение

$$(A\, U_t(\varphi)|U_t(\varphi)) = (U_t^{-1}\, A\, U_t(\varphi)|\varphi).$$

Формальные вычисления, которые имеют смысл при некоторых ограничениях на φ, приводят к значению $(i(HA - AH)\varphi|\varphi)$ для производной этого выражения по t при $t = 0$. Если A и H ограничены, то это вычисление всегда имеет смысл, и мы видим, что существует единственная наблюдаемая, а именно наблюдаемая, соответствующая оператору $i(HA - AH)$, которая обладает тем свойством, что в каждом состоянии ее среднее значение равно производной по времени среднего значения наблюдаемой, соответствующей оператору A, в этом состоянии. Естественно назвать эту наблюдаемую производной по времени от данной наблюдаемой.

Если A и H неограниченны, то возникают трудности, связанные с тем, что A и H могут не иметь областей определения, расположенных нужным образом. Если, однако, дело обстоит благополучно, т. е. если существует *единственный* самосопряженный оператор, совпадающий с $i(HA - AH)$ на тех векторах, где последний определен, то мы будем говорить, что наблюдаемая, соответствующая A, дифференцируема по времени, и считать ее производной наблюдаемую, соответствующую единственному самосопряженному расширению оператора $i(HA - AH)$.

Понятие производной от наблюдаемой по времени будет более прозрачным, если мы несколько изменим нашу точку зрения. Пусть A — самосопряженный оператор, φ — единичный вектор, и W — унитарное преобразование. Тогда вероятностное распределение $E \to (P_E^A W(\varphi)|W(\varphi))$ наблюдаемой, соответствующей оператору A, в состоянии, определяемом вектором $W(\varphi)$, совпадает с вероятностным распределением $(W^{-1}P_E^A W(\varphi)|\varphi)$ наблюдаемой, соответствующей оператору $W^{-1}AW$, в состоянии, определяемом φ. Другими словами, если мы будем считать состояния фиксированными, а наблюдаемые — меняющимися по закону $A \to U_t^{-1}AU_t$, то и для изменения вероятностей со временем мы получим тот же самый результат, что и ранее. Для того чтобы представить себе разницу между этими двумя точками зрения, физик может сравнить модель Шредингера (меняющиеся состояния) и модель Гейзенберга (меняющиеся наблюдаемые). В модели Гейзенберга понятие производной некоторой наблюдаемой по времени является непосредственным и очевидным.

Все результаты, полученные для однопараметрической группы $t \to V_t$, можно, конечно, применить к любой другой однопараметрической группе „автоморфизмов“ $\mathcal{S}$. Каждая такая группа $t \to W_t$ имеет вид

$$W_t: \ A \to U_t^W A (U_t^W)^{-1},$$

где $t \to U_t^W$ — непрерывная однопараметрическая группа унитарных преобразований, определяемая по W однозначно с точностью до умножения на комплексную функцию вида e^{-iat}. Согласно теореме Стона, U_t^W однозначно определяется своей инфинитезимальной образующей $-iA^W$. Таким образом, если мы отождествим две наблюдаемые, отличающиеся на константу, мы получим взаимно однозначное соответствие между наблюдаемыми, с одной стороны, и непрерывными однопараметрическими группами автоморфизмов $\mathcal{S}$ — с другой.

Это вполне аналогично соответствию, которое имеется в классической механике между некоторыми дифференцируемыми наблюдаемыми, с одной стороны, и однопараметрическими группами контактных преобразований — с другой. В этом случае точно так же две наблюдаемые, отличающиеся на константу, приводили к одной и той же группе контактных преобразований. Мы можем определить производные наблюдаемых относительно U_t^W так же, как относительно U_t, и получить для оператора, соответствующего производной, формулу $i(AB - BA)$, в которой B — оператор, соответствующий дифференцируемой наблюдаемой, $-iA$ — инфинитезимальная образующая группы U_t^W. Таким образом, выражение $i(AB - BA)$ играет в квантовой механике ту же роль, что и скобки Пуассона в классической механике. В частности, наблюдаемая, соответствующая оператору A, является интегралом в том и только в том случае, когда оператор H инвариантен относительно группы автоморфизмов, определяемой оператором A.

2.4 Каноническое „квантование“ классических систем

До сих пор наблюдаемые были введены совершенно абстрактно. Теперь мы постараемся сопоставить их с наблюдаемыми классической механики и найти в квантовой механике аналоги или уточнения чисто классических понятий.

Предположим, что наша классическая система относится к тем, которые мы рассмотрели в разд. 1.2, т. е. состоит из n точек, имеющих координаты $q_1, \ldots, q_{3n}$ в некоторой прямоугольной системе координат. Анализ, который привел к необходимости отказаться от приписывания точных значений одновременно q_j и $\dot{q}_j$, неприменим к задаче одновременного измерения q_i и q_j. Поэтому мы предположим, что для каждого j в гильбертовом пространстве квантового аналога нашей классической системы имеется самосопряженный оператор Q_j и что эти операторы коммутируют друг с другом. Заметим, что это предположение согласуется с аналогией между коммутаторами и скобками Пуассона, поскольку скобка Пуассона любых двух координат (на самом деле даже любых двух функций, зависящих только от координат) тождественно равна нулю.

Ясно, что любое изменение системы координат, используемой для того, чтобы задать положение наших точек в пространстве с помощью чисел, вызовет соответствующее изменение наблюдаемых. Например, если сдвинуть начало координат на две единицы в сторону убывания x, то Q_j, заменится на $Q_j + 2I$ для $j = 1, 4, 7, \ldots$, где I — тождественный оператор. С другой стороны, такой сдвиг или любое другое борелевское взаимно однозначное отображение пространства на себя, сохраняющее расстояния, переведет вопрос в вопрос и сохранит упорядоченность и операцию $Q \to 1 - Q$ в $\mathcal{Q}$. Но, как известно, любой автоморфизм структуры с ортогональным дополнением всех замкнутых подпространств гильбертова пространства порождается некоторым унитарным преобразованием, которое определено однозначно с точностью до постоянного множителя: $P \to UPU^{-1}$, где P — проектор на соответствующее подпространство. Отсюда следует, в частности, что для любого переноса в пространстве $(x, y, z) \to (x - a, y - b, t - c)$ существует унитарное преобразование $U_{a,b,c}$, такое, что $U_{a,b,c} Q_j U_{a,b,c}^{-1}$ равно $Q_j + aI$, $Q_j + bI$ или $Q_j + cI$ в зависимости от того, является ли q_j, координатой по оси x, y или z.

На самом деле мы можем, если захотим, использовать различные системы координат для наблюдения над различными частицами и изменять их независимо друг от друга. Таким образом, для любого переноса $q_j \to q_j - a_j$ в пространстве $\mathcal{M}$ всех наборов из $3n$ координат $q_1, \ldots, q_{3n}$ существует унитарный оператор $U_{a_1,\ldots,a_{3n}}$, такой, что для всех j

$$U_{a_1,\ldots,a_{3n}}\, Q_j\, U^{-1}_{a_1,\ldots,a_{3n}} = Q_j + a_j I.$$

Временно забудем о существовании операторов $U_{a_1,\ldots,a_{3n}}$ и рассмотрим одно следствие того факта, что все Q_j коммутируют между собой. Пусть для „прямоугольного“ борелевского подмножества $E_1 \times \cdots \times E_{3n}$, где E_j — борелевские подмножества на прямой, $P_{E_1 \times \cdots \times E_{3n}}$ определяется как $P^{Q_1}_{E_1} \ldots P^{Q_{3n}}_{E_{3n}}$. Поскольку все $P^{Q_j}_{E_i}$ коммутируют между собой, $P_{E_1 \times \ldots \times E_{3n}}$ является проектором. Далее, нетрудно показать, что отображение

$$E_1 \times \ldots \times E_{3n} \to P_{E_1 \times \ldots \times E_{3n}}$$

имеет единственное расширение до проекторной меры $E \to P_E$,заданной на множестве всех борелевских подмножеств $\mathcal{M} = E^{3n}$. (Определение проекторной меры на прямой допускает очевидное и непосредственное обобщение на этот случай; читатель может сам сформулировать это обобщение.)

Используя эту меру, нетрудно придать смысл выражению $f(Q_1, \ldots, Q_{3n})$, где f — любая действительная борелевская функция на $\mathcal{M}$: это самосопряженный оператор, для которого соответствующей проекторной мерой служит $E \to P_{f^{-1}(E)}$. Ясно, что $f(Q_1, \ldots, Q_n)$ коммутирует со всеми Q_j. Если обратное тоже верно (т. е. если любой оператор, коммутирующий со всеми Q_j, имеет такой вид то мы скажем, что Q_j образуют *полную систему коммутирующих операторов*. Нетрудно показать, что это бывает в том и только в том случае, когда множество значений меры $E \to P_E$ образует максимальную булеву алгебру проекторов, т. е. ни один из проекторов, не входящих в это множество, не может коммутировать со всеми проекторами из него. Далее, можно показать, что булева алгебра проекторов, замкнутая относительно счетных булевых операций, является максимальной тогда и только тогда, когда существует такой вектор φ в нашем гильбертовом пространстве, что конечные линейные комбинации $c_1 P_{E_1}(\varphi) + c_2 P_{E_2}(\varphi) + \ldots$ (P_{E_j} из данной алгебры) плотны в гильбертовом пространстве. Этот вектор φ называется тогда циклическим вектором семейства.

Предположим сначала, что Q_j действительно образует полное семейство коммутирующих операторов. Это предположение основано на том, что в классической механике любая наблюдаемая, имеющая нулевые скобки Пуассона со всеми координатами, действительно является функцией координат. От этого предположения придется отказаться когда мы перейдем к квантовой механике атома, поскольку электрон имеет степень свободы (спин), у которой нет классического аналога. Однако нам удобно пока принять это предположение, поскольку оно упростит нашу работу и позволит нам двигаться в нужном направлении.

Пусть φ — циклический вектор булевой алгебры всех проекторов P_E, тогда $E \to (P_E(\varphi)|\varphi)$ — некоторая мера μ на $\mathcal{M}$. Пусть $E_1, E_2, \ldots, E_S$ — непересекающиеся борелевские множества в $\mathcal{M}$ и χ_{E_j} — характеристическая функция E_j; тогда

$$c_1\chi_{E_1} + c_2\chi_{E_2} + \ldots + c_S\chi_{E_S} \to c_1 P_{E_1}(\varphi) + c_2 P_{E_2}(\varphi) + \ldots + c_S P_{E_S}(\varphi)$$

— линейное отображение плотного подпространства $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \mu)$ на плотное подпространство $\mathcal{H}$, причем

$$\|c_1 P_{E_1}(\varphi) + \ldots + c_S P_{E_S}(\varphi)\|^2 = \sum_{i,j} c_i \bar{c}_j \left(P_{E_i}(\varphi)|P_{E_j}(\varphi)\right) = \sum_{i,j} c_i \bar{c}_j \left(P_{E_i \cap E_j}(\varphi)|\varphi\right) =$$
$$= \sum_j |c_j|^2 \left(P_{E_j}(\varphi)|\varphi\right) = \sum_j |c_j|^2 \mu(E_j) = \int\limits_{\mathcal{M}} \left|c_1\chi_{E_1} + \ldots + c_S\chi_{E_S}\right|^2 d\mu.$$

Таким образом, наше линейное отображение сохраняет норму. Продолжая его по непрерывности, мы получим унитарное отображение $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \mu)$ на $\mathcal{H}$, причем оператору P_E в $\mathcal{H}$ при этом отображении соответствует, очевидно, оператор $f \to \chi_E f$ в $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \mu)$. Отсюда сразу следует, что оператор Q_j в $\mathcal{H}$ соответствует оператору $f \to q_j f$ в $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \mu)$. Другими словами, предполагая, что операторы Q_j, соответствующие наблюдаемым координатам q_j, образуют полное коммутирующее семейство, мы приходим к конкретной реализации $\mathcal{H}$ в виде $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \mu)$, где μ — некоторая конечная мера на пространстве $\mathcal{M}$ всех наборов $q_1, \ldots, q_{3n}$, причем Q_j становится оператором умножения на q_j.

Мера μ, конечно, не определена однозначно. Действительно, если ν — произвольная (конечная или только σ-конечная) мера, определенная на борелевских подмножествах $\mathcal{M}$, имеющая те же нулевые множества, что и μ, то отображение $f \to \sqrt{\rho}\, f$, где ρ — производная Радона–Никодима [8]) меры μ относительно ν, является унитарным отображением $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \mu)$ на $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \nu)$, которое коммутирует с умножением на любую функцию на $\mathcal{M}$. С другой стороны, неоднозначность в выборе меры таким образом полностью описана: нулевые множества μ есть в точности те множества, для которых $P_E = 0$ и поэтому вполне определены.

Используем теперь существование операторов $U_{a_1,\ldots,a_{3n}}$. Мы получим сразу же, что

$$U_{a_1,\ldots,a_{3n}}\, P_E\, U^{-1}_{a_1,\ldots,a_{3n}} = P_{E'},$$

где E' — результат переноса E на $-a_1, \ldots, -a_{3n}$, т. е. если $P_E = 0$, то и $P_{E'} = 0$. Следовательно, нулевые множества нашей меры μ инвариантны относительно переносов. Но, как известно, любая борелевская мера в конечномерном векторном пространстве, нулевые множества которой инвариантны относительно переносов, имеет те же нулевые множества, что и обычная лебегова мера. Поэтому мы можем считать, что μ — лебегова мера.

Прежде чем продолжать отождествление других наблюдаемых, заметим, что не обязательно у каждой классической наблюдаемой должен быть квантовый аналог, а если таковой имеется, то он может определяться не единственным образом. В классической механике наиболее общая наблюдаемая есть произвольная функция $6n$ основных наблюдаемых $q_1, \ldots, q_{3n}, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_{3n}$, а в квантовой механике мы можем брать более или менее произвольные функции только от тех наблюдаемых, операторы которых коммутируют друг с другом. Мы можем получить разнообразные наблюдаемые в квантовой механике, несколько раз последовательно образуя суммы и используя борелевские функции одного переменного, но эти наблюдаемые не будут взаимно однозначным образом соответствовать классическим наблюдаемым. Далее, поскольку классическая механика является предельным случаем

---

[8]) Пусть μ и ν — две меры в одном и том же пространстве S. Теорема Радона–Никодима утверждает, что если эти меры удовлетворяют некоторым слабым требованиям регулярности и если для каждого множества $E \subset S$, мера $\mu(E)$ которого равна нулю, мера $\nu(E)$ также равна нулю, то существует измеримая функция ρ на S, которая является „плотностью“ меры ν относительно меры μ в том смысле, что

$$\nu(E) = \int\limits_E \rho(s)\, d\mu(s).$$

Эта функция обычно называется производной Радона–Никодима меры ν по мере μ.

квантовой, нет ничего удивительного в том, что имеется несколько различных квантовых наблюдаемых, совпадающих в классической механике, т. е. при переходе к пределу. С другой стороны, мы установим естественное соответствие между *основными* классическими наблюдаемыми и соответствующими им квантовыми.

Предположим, что в нашей системе каждое Q_j является наблюдаемой, дифференцируемой относительно времени в том смысле, как это было определено в разд. 2.3, и $\dot{Q}_j$ — соответствующие производные. Формально $\dot{Q}_j = i(HQ_j - Q_jH)$, где H — пока еще неизвестный динамический оператор нашей системы. По очевидным соображениям мы называем $\dot{Q}_j$, наблюдаемой скорости, соответствующей координате q_j. Далее, наблюдаемые импульса в классической механике определяются таким образом, что они не связаны непосредственно со скоростями, и лишь потом оказывается, что импульс равен скорости, умноженной на константу [9]). Импульс p_j например, является наблюдаемой, ассоциированной с однопараметрической группой контактных преобразований, порожденной однопараметрической группой

$$(q_1, \dots, q_{3n}) \to (q_1, \dots, q_{j-1}, q_j - a, q_{j+1}, \dots, q_{3n})$$

в конфигурационном пространстве. Но эта группа индуцирует группу унитарных преобразований W_a^j в $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \mu)$:

$$W_a^j\, \psi(q_1, \dots, q_{3n}) = \psi(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j - a, q_{j+1}, \dots, q_{3n}).$$

и эта однопараметрическая группа имеет кососопряженную инфинитезимальную образующую $-\partial/\partial q_j$ которая соответствует самосопряженному оператору $(1/i)\,\partial/\partial_j$. Предположим, что квантовая механика соответствует классической настолько, что наблюдаемая, ассоциированная с W^j, т. е. наблюдаемая, оператор которой равен инфинитезимальной образующей W^j, умноженной на i, равна наблюдаемой скорости $\dot{Q}_j$, умноженной на константу c_j. Будем продолжать пока формальные выкладки, не останавливаясь на вопросе об области определения оператора. Тогда наше предположение принимает вид

$$\dot{Q}_j = i(HQ_j - Q_jH) = \frac{1}{ic_j}\frac{\partial}{\partial q_j},$$

откуда

$$HQ_j - Q_jH = -\frac{1}{c_j}\frac{\partial}{\partial q_j}.$$

Далее

$$\frac{\partial^2}{\partial q_j^2} Q_k = Q_k \frac{\partial^2}{\partial q_j^2}, \text{ если } k \neq j,$$

и

$$\frac{\partial^2}{\partial q_j^2} Q_j - Q_j \frac{\partial^2}{\partial q_j^2} = 2\frac{\partial}{\partial q_j};$$

поэтому, положив

$$H_T = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3n} \frac{1}{c_j}\frac{\partial^2}{\partial q_j^2},$$

мы получим, что для всех j

$$H_TQ_j - Q_jH_T = HQ_j - Q_jH.$$

Следовательно, $H - H_T$ коммутирует со всеми Q_j откуда вытекает, что $H - H_T$ есть некоторая функция Q_j. Итак, $H - H_T$ есть умножение на некоторую действительную функцию Y координат $q_1, \dots, q_{3n}$, т. е. H имеет следующий вид:

$$H(\psi) = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3n} \frac{1}{c_j}\frac{\partial^2 \psi}{\partial q_j^2} + Y\psi.$$

Обратно, если H имеет такой вид, то $\dot{Q}_j$ будет равно $(1/ic_j)\partial/\partial q_j$. Предположим теперь, что Y дифференцируема. Тогда $\ddot{Q}_j = (H\dot{Q}_j - \dot{Q}_jH)$ есть умножение на $-(1/c_j)\partial Y/\partial q_j$

[9]) Последнее утверждение не всегда верно, см. примечание на стр. 9. — *Прим. ред.*

(поскольку $\dot{Q}_j$ коммутирует с H_T). Это означает, что в любом „достаточно гладком“ состоянии ψ справедливо равенство

$$\frac{d^2}{dt^2}(Q_j(\psi)|\psi) = -\frac{1}{c_j}\left(\frac{\partial Y}{\partial q_j}\psi\middle|\,\psi\right).$$

Возьмем теперь ψ таким, что интеграл

$$\int\limits_E |\psi(q_1, \ldots, q_{3n})|^2\, d\mu$$

очень близок к 1 для некоторого весьма малого множества E и что это условие сохраняется в течение некоторого времени (причем множество E, конечно, может изменяться). Тогда ψ определяет состояние, в котором координаты с достаточно высокой точностью имеют определенные значения. За эти определенные значения можно принять $(Q_1(\psi)|\psi)$, ..., $(Q_{3n}(\psi)|\psi)$. Далее,

$$\left(\frac{\partial Y}{\partial q_j}\psi\middle|\,\psi\right) = \int\limits_E \frac{\partial Y}{\partial q_j}|\psi|^2\, d\mu$$

приблизительно равно значению $\partial Y/\partial q_j$ в точке

$$\big((Q_1(\psi)|\psi), \ldots, (Q_{3n}(\psi)|\psi)\big).$$

Другими словами, наша квантовая система будет аппроксимировать классическую систему, заданную дифференциальными уравнениями

$$c_j\frac{d^2 q_j}{dt^2} = -\frac{\partial Y}{\partial q_j},$$

т. е. классическую систему с массами $c_1, \ldots, c_{3n}$ и потенциальной энергией Y. Однако наши уравнения можно также записать в виде

$$c_j\hbar\,\frac{d^2 q_j}{dt^2} = -\hbar\,\frac{\partial Y}{\partial q_j},$$

где $\hbar$ —произвольная константа. Таким образом, наша система аппроксимирует также классическую с массами $c_1\hbar, \ldots, c_{3n}\hbar$ и потенциальной энергией $\hbar Y$. Поэтому мы не можем сразу отождествить c_j с массами m_j и Y с потенциальной энергией $\mathcal{V}$ соответственно, а можем только считать, что они отличаются на постоянный множитель: $c_j = m_j/\hbar$, $Y = \mathcal{V}/\hbar$. Для любого $\hbar$ квантовая система с динамическим оператором

$$H(\psi) = -\frac{\hbar}{2}\sum_{j=1}^{3n}\frac{1}{m_j}\frac{\partial^2\psi}{\partial q_j^2} + \frac{\mathcal{V}}{\hbar}\psi$$

в надлежащих условиях ведет себя аналогично классической системе с массами $m_1, \ldots, m_{3n}$ и потенциальной энергией $\mathcal{V}$. Соответствующее уравнение Шредингера существенно зависит от значения $\hbar$.

$$H(\psi) = -\frac{\hbar}{2}\sum_{j=1}^{3n}\frac{1}{m_j}\frac{\partial^2\psi}{\partial q_j^2} + \frac{\mathcal{V}}{\hbar}\psi = -\frac{1}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

Даже если $\mathcal{V} = 0$, т. е. если частицы не взаимодействуют, величина $\hbar$ не сокращается. Таким образом, некоторые свойства квантовой системы зависят от значения $\hbar$, но эти свойства теряются при переходе к классическому пределу. Одним из таких свойств является скорость, с которой вероятностные распределения расплываются с течением времени. Чем меньше мы возьмем $\hbar$, тем медленнее будет происходить это расплывание. Этот факт не является непосредственно очевидным, но его можно доказать, изучив наши уравнения. Из экспериментов, в которых обнаруживаются неклассические свойства системы, можно найти отношения $m_j/\hbar$; поэтому, зная m_j мы можем найти $\hbar$. Эта величина оказывается универсальной константой, тесно связанной с постоянной Планка. Точную связь мы обсудим ниже.

Заметим, что, выбрав соответствующим образом единицу массы, мы можем считать, что $\hbar = 1$. Если единица массы еще не выбрана, мы можем по определению считать массу, ассоциированную с j-й координатой, равной числу c_j. Это определение согласуется с обычным определением массы, но не требует произвольного выбора единицы массы. Другими словами, в квантовой механике имеет смысл говорить об „абсолютной“ массе и (после выбора единиц времени и длины) мы имеем „естественную“ единицу массы. Константу $\hbar$ можно рассматривать как множитель пропорциональности между этой естественной массой и массой, принятой до появления квантовой механики.

Подведем коротко итоги. Мы выяснили, что для заданной классической системы n точек с прямоугольными координатами $q_1, \ldots, q_{3n}$, массами $m_1, \ldots, m_{3n}$ и потенциальной функцией $\mathcal{V}$ можно следующим образом получить квантовый аналог. Пусть $\mathcal{H}$ — гильбертово пространство всех комплексных функций с суммируемым квадратом относительно меры Лебега на $3n$-мерном евклидовом пространстве. Пусть каждой координате q_j поставлен в соответствие оператор умножения на q_j: $Q_j(f) = q_j f$. Пусть H — самосопряженный оператор, переводящий функцию ψ в

$$-\frac{\hbar}{2}\sum_{j=1}^{3n}\frac{1}{m_j}\frac{\partial^2\psi}{\partial q_j^2} + \frac{\mathcal{V}}{\hbar}\psi$$

где $\hbar$ — некоторая универсальная константа, определяемая из эксперимента. Тогда изменение нашей системы во времени задается однопараметрической группой e^{-itH} или, в дифференциальной форме, функция состояния ψ изменяется со временем таким образом, что выполняется уравнение Шредингера

$$-\frac{1}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2}\sum_{j=1}^{3n}\frac{1}{m_j}\frac{\partial^2\psi}{\partial q_j^2} + \frac{\mathcal{V}}{\hbar}\psi$$

В порядке предостережения нужно сделать несколько замечаний. Во-первых, мы не утверждаем, что мы нашли единственную квантовую систему, имеющую пределом данную классическую систему; мы утверждаем только, что нашли одну такую систему. Мы увидим, что существуют и другие. Далее, хотя мы и приводили аргументы в пользу того, что имеется только одна система, обладающая достаточно простыми свойствами, мы не показали, что эти аргументы можно довести до строгого доказательства.

Во-вторых, наше описание квантовой системы не полно, поскольку формальный дифференциальный оператор, который мы писали выше, может иметь более одного самосопряженного расширения, если он их вообще имеет. На самом деле в большинстве случаев, представляющих физический интерес, имеется удобный способ строить такое расширение и во многих случаях оно даже единственно. Кроме того, ответ на большинство физических вопросов обычно не зависит от того, какое расширение берется. Таким образом, эта неоднозначность не является серьезной. Подробное исследование важного частного случая можно найти в статье Като [10]).

Наблюдаемая скорости формально равна

$$\dot{Q}_j = i(HQ_j - Q_jH) = -\frac{i\hbar}{m_j}\frac{\partial}{\partial q_j} = \frac{\hbar}{im_j}\frac{\partial}{\partial q_j}.$$

Этот оператор имеет „естественное“ самосопряженное расширение: инфинитезимальную образующую группы U_t, умноженную на $\hbar/im_j$, где

$$U_t(\psi(q_1, \ldots, q_{3n})) = \psi(q_1, \ldots, q_{j-1}, q_j - t, q_{j+1}, \ldots, q_{3n})$$

Поэтому мы принимаем это самосопряженное расширение за строго определенный аналог наблюдаемой скорости. Имея динамический оператор, а также операторы, соответствующие наблюдаемым координат и скорости, мы располагаем математической моделью, которая в принципе позволяет отвечать на все допустимые физические вопросы.

Посмотрим теперь, в каких пределах мы можем построить квантовые аналоги обычных понятий динамики. Мы уже указывали, почему самосопряженный оператор $(1/i)\,\partial/\partial q_j$, должен рассматриваться как квантовый аналог классической наблюдаемой импульса p_j. С

[10]) Kato T., Trans. Amer. Mat. Soc., **70** (1951), 195.

другой стороны, поскольку наблюдаемой скорости соответствует оператор $(\hbar/im_j)\,\partial/\partial q_j$, мы должны были бы считать оператор импульса равным

$$m_j\left(\frac{\hbar}{im_j}\frac{\partial}{\partial q_j}\right)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_j},$$

если бы мы хотели иметь численное соответствие между этими наблюдаемыми при переходе к классическому пределу. Это противоречие вызвано тем, что в классической механике импульс определяется только после того, как выбрана единица массы. Дело обстоит точно так же, даже если мы примем теоретико-групповое определение, поскольку отображение $\mathcal{M}_V$ на $\mathcal{M}_{V^*}$ зависит от выбора единицы массы. Это противоречие отпадает, если использовать естественную единицу массы, т. е. принять $\hbar=1$. Если нам потребуется использовать другие единицы массы, мы должны будем считать импульс равным $(\hbar/i)\,\partial/\partial q_j$ вместо более естественного $(1/i)\,\partial/\partial q_j$.

Нетрудно показать, что суммы

$$\frac{\hbar}{i}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_j},\quad \frac{\hbar}{i}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial y_j},\quad \frac{\hbar}{i}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial z_j},$$

где $(q_1,\ldots,q_{3n})=(x_1,y_1,z_1,\ldots,x_n,y_n,z_n)$, являются интегралами движения, если потенциальная энергия $\mathcal{V}$ такова, что импульс в соответствующей классической системе сохраняется. Таким образом, в квантовой механике, так же как и в классической, имеется закон сохранения импульса. На самом деле его можно вывести непосредственно из тех же соображений симметрии.

Аналогичное замечание применимо и к моменту импульса. Мы определим компоненту по оси z момента импульса относительно начала координат как наблюдаемую, соответствующую умноженной на $\hbar/i$ инфинитезимальной образующей однопараметрической группы в нашем гильбертовом пространстве, порожденной группой вращений вокруг оси z. Формально соответствующий оператор оказывается равным

$$\frac{\hbar}{i}\sum_{j=1}^{n}\left(x_j\,\frac{\partial}{\partial y_j}\,y_j\,\frac{\partial}{\partial x_j}\right).$$

Вполне аналогичны определения и выражения для моментов импульса относительно других осей. Используя полярные координаты, нетрудно непосредственно вычислить, что оператор момента импульса имеет чисто точечный спектр и собственные значения являются целыми кратными $\hbar$. Таким образом, квантовая механика дает объяснение одного из основных принципов старой квантовой теории при условии, что мы примем $\hbar=h/2\pi$.

В классической механике выражение полной энергии через координаты q_j и соответствующие импульсы p_j имеет вид (в декартовых координатах. — *Ред.*)

$$-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3n}\frac{1}{m_j}p_j^2+\mathcal{V}(q_1,\ldots,q_{3n}).$$

Это выражение сохраняет смысл, если мы заменим q_j и p_j на операторы, которые соответствуют им в квантовой механике. Тогда $\mathcal{V}(Q_1,\ldots,Q_{3n})$ будет просто оператором умножения на функцию: $\varphi\to\mathcal{V}\cdot\varphi$, и мы приходим к (формальному) оператору

$$\psi\to-\sum_{j=1}^{3n}\frac{\hbar^2}{2m_j}\frac{\partial^2\psi}{\partial q_j^2}+\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\psi,$$

который, по-видимому, должен являться квантовым аналогом энергии в классической механике. Заметим, что это в точности выражение для динамического оператора, умноженное на $\hbar$. Поэтому мы *по определению* считаем энергию в квантовой механике наблюдаемой, соответствующей динамическому оператору, умноженному на $\hbar$. Этот оператор, очевидно, является интегралом, т. е. в квантовой механике выполняется закон сохранения энергии. Мы получили также удобное эмпирическое правило для запоминания формального выражения динамического оператора и, следовательно, уравнения Шредингера: 1) выразить классическую энергию через *декартовы* координаты и импульсы; (2) заменить каждый импульс p_j оператором $(\hbar/i)\,\partial/\partial q_j$, и каждую координату q_j оператором $\psi \to q_j\psi$; (3) разделить все выражение на $\hbar$. Как мы увидим ниже, существует более общая процедура, применимая и к обобщенным координатам.

Если мы обозначим самосопряженный оператор, соответствующий p_j, через P_j и воспользуемся тем, что оператор P_j формально равен $(\hbar/i)\,\partial/\partial q_j$, то мы получим следующие соотношения (выполняющиеся, когда неограниченные операторы Q_j и P_j удовлетворяют некоторым условиям):

$$Q_jQ_k - Q_kQ_j = P_jP_k - P_kP_j = 0,$$
$$Q_jP_k - P_kQ_j = i\hbar\delta_j^k.$$

Эти равенства известны как „коммутационные соотношения Гейзенберга“. Они интересны тем, что (за исключением множителя $\hbar$) их можно было написать априори, исходя из аналогии между скобками Пуассона и скобками коммутатора, а также тем, что до некоторой степени (которую мы уточним ниже) они однозначно определяют конкретную реализацию

$$Q_j(\psi) = q_j\psi, \quad P_j(\psi) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial q_j}.$$

Конечно, в классической механике имеют место аналогичные соотношения $[q_j, q_k] = [p_j, p_k] = 0$, $[q_j, p_k] = \delta_j^k$.

Что касается однозначности, о которой мы только что упомянули, то нам будет нетрудно установить точную теорему сразу же после того, как соотношения Гейзенберга будут сформулированы в так называемой „форме Вейля“, в которой фигурируют только ограниченные операторы. Обозначим через U^j однопараметрическую унитарную группу $s \to e^{-isQ_j}$, а через V^j группу $t \to e^{-itP_j}$. Тогда U^j и V^j определяют Q_j и P_j и соотношения Гейзенберга формально эквивалентны следующим:

$$\left.\begin{aligned} &U_s^j\,U_t^k = U_t^k\,U_s^j, \quad V_s^j\,V_t^k = V_t^k\,V_s^j,\\ &U_s^j\,V_t^k = V_t^k\,U_s^j\,e^{i\delta_j^k\hbar st}. \end{aligned}\right\} \tag{2.1}$$

Пусть теперь $U^1, \ldots, U^{3n}, V^1, \ldots, V^{3n}$ — произвольные $6n$ непрерывных однопараметрических унитарных групп, действующих в том же самом гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ и удовлетворяющих условиям (3). В соответствии с теоремой Стона и фон Неймана [11]) $\mathcal{H}$ можно записать в виде прямой суммы $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \ldots$, где каждое $\mathcal{H}_l$ переводится в себя всеми U_s^j и всеми V_t^k и каждое $\mathcal{H}_l$ можно отобразить унитарно на $\mathcal{L}^2(E^{3n})$ таким образом, что операторы U_s^j переходят в операторы $\psi \to e^{-isq_j}\psi$ и операторы V_t^k переходят в операторы

$$\psi(q_1, \ldots, q_{3n}) \to \psi(q_1, \ldots, q_{k-1}, q_k - \hbar t, q_{k+1}, \ldots, q_{3n}).$$

Дополнительное предположение, что имеется только одно слагаемое, вполне эквивалентно предположению, что Q_j образуют полное семейство операторов.

Если $\mathcal{H}$ реализовано в виде $\mathcal{L}^2(\mathcal{M})$, как указано выше, то каждый вектор состояния ψ является функцией с суммируемым квадратом на $\mathcal{M}$ и каждая траектория $e^{-iHt}(\psi)$ является функцией на $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$, где $\mathbb{R}$ — действительная прямая. Эта функция $3n+1$ действительных переменных называется *волновой функцией* системы.

Мы можем записать ψ в виде $\sqrt{\rho}e^{iS}$, где $\rho = |\psi|^2$, а S — некоторая действительная функция на $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$, определенная с точностью до аддитивной постоянной. Функции ρ и S вместе однозначно определяют ψ, и ρ имеет очевидный физический смысл: если E — борелевское подмножество $\mathcal{M}$, то

$$\int_E \cdots \int \rho(q_1, \ldots, q_{3n})\,dq_1, \ldots, dq_{3n}$$

есть вероятность того, что в состоянии ψ измерения q_j дадут набор $(q_1, \ldots, q_{3n})$, принадлежащий множеству E. Функция S также имеет простой физический смысл, который, однако, менее

[11]) Доказательство, приведенное фон Нейманом, см. в *Annals of Math.*, **33** (1932), 567.

очевиден. Предполагая, что ψ достаточное число раз дифференцируема, вычислим среднее значение j-й компоненты импульса, т. е. $P_j(\psi|\psi)$. Оно равно

$$\frac{\hbar}{i}\int\cdots\int\frac{\partial\psi}{\partial q_j}\,\overline{\psi}\,dq_1,\ldots,dq_{3n}=\frac{\hbar}{i}\int\cdots\int\frac{\partial}{\partial q_j}\left(\sqrt{\rho}\,e^{iS}\right)\cdot\sqrt{\rho}\,e^{-iS}\,dq_1,\ldots,dq_{3n}=$$
$$=\frac{\hbar}{i}\int\cdots\int\left(\sqrt{\rho}\,\frac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial q_j}\right)dq_1,\ldots,dq_{3n}+\frac{\hbar}{i}\int\cdots\int\rho i\frac{\partial S}{\partial q_j}\,dq_1,\ldots,dq_{3n}=$$
$$=\frac{\hbar}{i}\int\cdots\int\frac{1}{2}\frac{\partial\rho}{\partial q_j}\,dq_1,\ldots,dq_{3n}+\frac{\hbar}{i}\int\cdots\int\rho i\frac{\partial S}{\partial q_j}\,dq_1,\ldots,dq_{3n}.$$

Поскольку $\rho\to 0$ при $q_j\to\pm\infty$,

$$\int\cdots\int\frac{\partial\rho}{\partial q_j}\,dq_1,\ldots,dq_{3n}=0$$

и мы видим, что среднее значение P_j равно

$$\hbar\int\cdots\int\rho\frac{\partial S}{\partial q_j}\,dq_1,\ldots,dq_{3n}.$$

Если состояние ψ таково, что ρ сконцентрировано в одной точке, т. е. $q_1,\ldots,q_{3n}$ почти заведомо лежат вблизи $q_1^0,\ldots,q_{3n}^0$, то компоненты импульсов будут иметь средние значения, близкие к $\partial S/\partial q_j(q_1^0,\ldots,q_{3n}^0)$. В любом случае

$$(q_1,\ldots,q_{3n})\to\left(\hbar\,\frac{\partial S}{\partial q_1}(q_1,\ldots,q_{3n}),\ldots,\hbar\,\frac{\partial S}{\partial q_{3n}}(q_1,\ldots,q_{3n})\right)$$

есть векторное поле в конфигурационном пространстве, которое ставит в соответствие каждому множеству значений координат множество значений импульсов. Среднее из этих значений импульсов относительно плотности ρ равно среднему значению импульса в состоянии $\sqrt{\rho}\,e^{iS}$. В этом смысле вектор $\hbar(\partial S/\partial q_1,\ldots,\partial S/\partial q_{3n})$ описывает импульс состояния.

Читателю, возможно, покажется интересной запись уравнения Шредингера в виде системы двух действительных уравнений относительно функций ρ и S, в особенности для случая одной частицы. В этом случае получаются уравнения, чрезвычайно похожие на уравнения гидродинамики, причем ρ играет роль плотности жидкости, а S — потенциала скоростей.

2.5 Некоторые простейшие примеры и первоначальные открытия Шредингера и Гейзенберга

Рассмотрим случай, когда $n=1$ и $\mathcal{V}=0$, так называемую свободную частицу. Пусть $q_1=x$, $q_2=y$, $q_3=z$, так что

$$H(\psi)=-\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right).$$

Мы можем получить спектральное разложение H в явном виде, используя преобразование Фурье. Каждый единичный вектор ψ в $\mathcal{H}=\mathcal{L}^2(E^3)$ однозначно представляется в виде

$$\psi=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\int_{-\infty}^{+\infty}\int\hat{\psi}(a,b,c)\,e^{i(ax+by+cz)}\,da\,db\,dc,$$

где $\hat{\psi}$ также имеет норму 1 в $\mathcal{L}^2$, причем для таких ψ

$$\frac{1}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\int_{-\infty}^{+\infty}\int a\,\hat{\psi}(a,b,c)\,e^{i(ax+by+cz)}\,da\,db\,dc;$$

аналогичные выражения имеются для $(1/i)\,\partial\psi/\partial y$ и $(1/i)\,\partial\psi/\partial z$. Таким образом, $H(\psi)$ есть преобразование Фурье от

$$\frac{\hbar}{2m}(a^2+b^2+c^2)\,\hat{\psi}(a,b,c).$$

Отсюда следует, что если при $t=0$ волновая функция ψ имела преобразование Фурье $\hat{\psi}(a,b,c)$, то $\psi(x,y,z,t)$, в момент времени t имеет вид

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int \hat{\psi}(a,b,c)\,e^{i(ax+by+cz)}\,e^{-(i\hbar/2m)(a^2+b^2+c^2)t}\,da\,db\,dc,$$

Таким образом, $\psi(x,y,z,t)$ представляет собой непрерывную „суперпозицию“ функций переменных x,y,z,t вида

$$e^{i[(ax+by+cz)-(\hbar/2m)(a^2+b^2+c^2)t]}=e^{i\sqrt{a^2+b^2+c^2}\left[(ax+by+cz)/\sqrt{a^2+b^2+c^2}-(\hbar/2m)\sqrt{a^2+b^2+c^2}t\right]}$$

Такая функция описывает „плоскую волну“, которая движется со скоростью $\frac{\hbar}{2m}\sqrt{a^2+b^2+c^2}$ в направлении, перпендикулярном плоскости $ax+by+cz=0$, и имеет длину волны $2\pi/\sqrt{a^2+b^2+c^2}$. Предположим, что $\hat{\psi}=0$ вне малой области вокруг точки a_0,b_0,c_0. Тогда компоненты импульса по осям x, y и z должны иметь значения, близкие к $\hbar a_0$, $\hbar b_0$ и $\hbar c_0$ соответственно, и ψ функция x, y, z и t является суперпозицией плоских волн с длиной волны, близкой к

$$\frac{2\pi}{\sqrt{a_0^2+b_0^2+c_0^2}}=\frac{2\pi\hbar}{p_0};$$

где $p_0=\sqrt{(\hbar a_0)^2+(\hbar b_0)^2+(\hbar c_0)^2}$ — значение, вблизи которого будет находиться полный импульс. Таким образом, если в некотором состоянии импульс с вероятностью 1 находится вблизи p_0, то волновая функция является суперпозицией плоских волн с длиной волны, близкой к $2\pi\hbar/p_0$. В этом смысле свободной частице с импульсом p соответствует волна длины $2\pi\hbar/p$.

В 1924 г., в последние дни старой квантовой теории, де Бройль выдвинул чисто умозрительную теорию, согласно которой частице с импульсом p соответствует „волна“ длины h/p. Вскоре эта теория получила экспериментальное подтверждение: различным ученым удалось наблюдать дифракционную картину от пучка электронов с импульсом p, вполне аналогичную той, которая получается от рентгеновских лучей с длиной волны h/p. Квантовая механика дает объяснение этому явлению при предположении, что $\hbar=h/2\pi$; таким образом, мы получаем второе экспериментальное подтверждение равенства $\hbar=h/2\pi$.

Вдохновленный работой де Бройля, Шредингер попытался построить „волновую механику“, которая относилась бы к классической механике так же, как волновая оптика относится к геометрической. Экспериментируя с возможными волновыми уравнениями и соответствующими им стоячими волнами и применяя свои идеи к электрону в атоме водорода, он пришел к уравнению

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2m}{K^2}\left(E+\frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right)\psi=0,$$

где E — энергия электрона, m — его масса, e — его заряд, K — некоторая константа. Изучая это уравнение, он сделал основополагающее открытие, которое состояло в том, что

(a) это уравнение имеет решения, удовлетворяющие некоторым естественным требованиям регулярности, тогда и только тогда, когда значение энергии E принадлежит определенному дискретному множеству значений: $me^4/2K^2$, $me^4/8K^2$,$me^4/32K^2$,…;

(b) эти значения соответствуют уровням энергии Бора для атома водорода, если придать K значение $h/2\pi$.

Таким образом, Шредингер нашел способ получать эти дискретные значения, не выдвигая никаких предварительных требований дискретности. В 1926 и 1927 гг. он опубликовал ряд статей, озаглавленных „Квантование как задача о собственных значениях“, в которых он использовал и обсудил некоторые следствия своего важнейшего открытия.

Теперь, конечно, нетрудно понять открытие Шредингера. Если мы возьмем предложенную Резерфордом модель атома водорода — тяжелое положительно заряженное ядро и электрон с равным по величине и противоположным по знаку зарядом $-e$, вращающийся по некоторой орбите вокруг ядра, — и не будем учитывать движение ядра, то получим классическую механическую систему, энергия которой равна

$$\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)-\frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}.$$

Переходя к соответствующей квантовой системе, мы получим, что наблюдаемой энергии соответствует дифференциальный оператор

$$\psi \to -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)-\frac{e^2\psi}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

в гильбертовом пространстве $\mathcal{L}^2(E^3)$. Стационарными чистыми состояниями нашей системы будут состояния, определяемые собственными функциями этого оператора, а соответствующими собственными значениями будут значения энергии, которые точно определены в этих состояниях. Но дифференцируемая функция ψ будет собственной функцией этого оператора с собственным значением E тогда и только тогда, когда она удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)-\frac{e^2\psi}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}=E\psi,$$

или

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right)\psi=0.$$

Это в точности уравнение Шредингера, где $K=\hbar$. Тот факт, что получающиеся при этом собственные значения совпадают с наблюдаемым спектром водорода, составляет третье подтверждение равенства $\hbar=h/2\pi$.

Несколькими месяцами ранее Гейзенберг наметил совершенно иной подход к естественному объяснению энергетических уровней в атоме, который был позднее развит Гейзенбергом, Борном и Иорданом. Гейзенберг хотел создать новую механику, в которой не фигурировали бы такие не наблюдаемые непосредственно физические понятия, как положение и скорость электрона. Руководствуясь туманными, но вдохновляющими эвристическими соображениями, Гейзенберг пришел к рассмотрению аналогов дифференциальных уравнений классической механики, в которых переменными служили бесконечные матрицы. Элемент, стоящий в n-й строке и в m-м столбце такой матрицы, в некотором смысле соответствовал переходу с m-го на n-й уровень энергии системы. В развитой им теории каждой координате классической системы приписывается некоторая матрица Q_i, а каждому импульсу классической системы — некоторая матрица P_i причем требуется, чтобы матрицы удовлетворяли следующим условиям:

(a) $P_k\,Q_j-Q_j\,P_k=\dfrac{h}{2\pi i}\,\delta_j^k$;

(b) $P_k\,P_j-P_j\,P_k=Q_k\,Q_j-Q_j\,Q_k=0$ для всех j и k;

(c) у матрицы H, получающейся подстановкой P_j и Q_k в классическое выражение для энергии, все не диагональные элементы равны нулю; диагональные элементы H принимаются за уровни энергии системы.

Оказалось, что эту задачу можно решить для различных интересных классических систем и в результате получаются те же уровни энергии, что и в волновой механике Шредингера. Читателю, знакомому со связью между операторами и матрицами, ясно, по крайней мере формально, почему это должно было получиться. Операторы, которые мы подставляем в классическое выражение энергии, чтобы получить оператор Шредингера, конечно, удовлетворяют условиям (a) и (b). Поэтому, если ввести базис, в котором оператор Шредингера записывается диагональной матрицей, то матрицы наших операторов будут удовлетворять условиям (a)–(c) и диагональные элементы матрицы оператора Шредингера будут его собственными значениями. Далее, как мы видели в предыдущем разделе, уравнения (a) и (b) имеют по существу единственное решение.

Эти идеи, введенные Гейзенбергом, Шредингером, Борном и Иорданом, привлекли огромное внимание, и многие математики и физики, в особенности Дирак, Бор и фон Нейман, способствовали их исследованию и развитию. К 1929 г. усилиями этих ученых старая квантовая теория и сырые идеи, о которых мы только что говорили, были превращены в систематическую теорию, являющуюся обобщением классической теории и известную теперь как квантовая механика.

2.6 Обобщенные координаты

В этом разделе мы покажем, что правило „квантования" классической системы, данное в разд. 2.4, можно переформулировать таким образом, что оно будет применимо и к более общим системам, рассмотренным в разд. 1.3. Мы начнем с чисто математических замечаний.

Пусть $\mathcal{M}$ — некоторое множество, в котором определено понятие борелевского множества, т. е. задано замкнутое относительно дополнения и счетного объединения семейство подмножеств, которые мы будем называть борелевскими множествами. Пусть C — некоторый *класс мер* на $\mathcal{M}$, т. е. множество всех σ-конечных мер, имеющих те же нулевые множества, что и одна из этих мер. Для каждого $\alpha \in C$ мы можем образовать гильбертово пространство $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$. Обозначим через $T_{\alpha_1\alpha_2}$ отображение $f \to \sqrt{d\alpha_1/d\alpha_2}\, f$; ясно, что $T_{\alpha_1\alpha_2}$ — унитарное отображение $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha_1)$ на $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha_2)$. Далее, поскольку $T_{\alpha_2\alpha_3}T_{\alpha_1\alpha_2} = T_{\alpha_1\alpha_3}$, мы имеем взаимно согласованное семейство канонических отображений пространств $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$ друг на друга. Отсюда следует, что мы можем говорить об $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$ как об одном пространстве, зависящем только от C, а не от выбора одного из элементов C; элементом этого гильбертова пространства $\mathcal{H}_C$ будет семейство соответствующих друг другу при отображениях $T_{\alpha_1\alpha_2}$, элементов $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$, $\alpha \in C$, по одному из каждого пространства.

Это гильбертово пространство можно значительно менее громоздким образом описать так. Для заданной функции f из $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$ построим конечную меру $|f|^2\alpha$ и функцию $f/|f|$. Тем самым мы отобразили $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$ на множество всех пар (α_1, h), где α_1 — конечная мера на $\mathcal{M}$, такая, что $\alpha_1(E) = 0$ для любого нулевого множества E меры α, а h — борелевская функция, отображающая $\mathcal{M}$ на единичную окружность $|z| = 1$. Конечно, мы можем отождествить (α_1, h) и (α_1, h'), если $h = h'$ почти всюду относительно α_1. Тогда отображение $f \to (|f|^2\alpha, f/|f|)$ будет взаимно однозначным, причем если $g = T_{\alpha_1\alpha_2}f$, где $f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha_1)$, $g \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha_1)$ то $(|f|^2\alpha_1, f/|f|) = (|g|^2\alpha_2, g/|g|)$, поскольку $g = \sqrt{d\alpha_1/d\alpha_2}\, f$. Другими словами, пара $(|f|^2\alpha, f/|f|)$ не зависит от α, когда f переходит из одного $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$ в другое и, следовательно, эту пару можно рассматривать как элемент некоторого „естественного" гильбертова пространства $\mathcal{H}_C$. Нетрудно вычислить, что скалярное произведение $(|f_1|^2\alpha, f_1/|f_1|)$ и $(|f_2|^2\alpha, f_2/|f_2|)$, которое по определению должно равняться $\int\limits_{\mathcal{M}} f_1\overline{f}_2\, d\alpha$, можно записать в виде

$$\int\limits_{\mathcal{M}} \frac{f_1}{|f_1|}\frac{\overline{f}_2}{|f_2|}|f_1||f_2|\, d\alpha = \int\limits_{\mathcal{M}} \frac{f_1}{|f_1|}\,\frac{\overline{f}_2}{|f_2|}\sqrt{\frac{d(|f_1|^2\alpha)}{d\alpha}\,\frac{d(|f_2|^2\alpha)}{d\alpha}}\, d\alpha.$$

После того как сделаны эти замечания, мы можем дать непосредственно формальное определение естественного гильбертова пространства $\mathcal{H}_C$ для класса мер C. Пусть α_1, и α_2 — любые две конечные меры, определенные на всех борелевских подмножествах $\mathcal{M}$. Тривиально проверяется, что мера

$$E \to \int\limits_E \sqrt{\frac{d\alpha_1}{d\alpha_3}\,\frac{d\alpha_2}{d\alpha_3}}\, d\alpha_3$$

не зависит от α_3, где α_3 — любая конечная мера, определенная на всех борелевских подмножествах $\mathcal{M}$, относительно которой α_1 и α_2 абсолютно непрерывны. Мы будем обозначать эту меру через $\sqrt{\alpha_1\alpha_2}$. Пусть теперь $\mathcal{H}_C$ — множество всех пар (α, h), где α — конечная мера, определенная на всех борелевских подмножествах $\mathcal{M}$ и абсолютно непрерывная относительно элементов C, h — борелевская функция, отображающая $\mathcal{M}$ в единичную окружность $|z| = 1$, и (α, h) отождествляется с (α, h'), если $h = h'$ почти всюду относительно меры α. Из предыдущих рассуждений следует, что $\mathcal{H}_C$ можно (и притом единственным образом) превратить в гильбертово пространство, положив скалярное произведение (α_1, h_1) и (α_2, h_2) равным $\int h_1\overline{h}_2\, d\sqrt{\alpha_1\alpha_2}$. При этом $f \to (|f|^2\alpha, f/|f|)$ будет унитарным отображением $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$ на $\mathcal{H}_C$ для всех $\alpha \in C$. Пусть теперь $\mathcal{M}$ — многообразие класса C^∞ и борелевские множества в $\mathcal{M}$ определяются обычным образом, исходя из его топологии. Если мы введем локальную систему координат в открытом множестве $\mathcal{O} \subseteq \mathcal{M}$, то прообраз лебеговой меры в E^n относительно отображения $x \to (q_1(x), \ldots, q_n(x))$ множества $\mathcal{O}$ в E^n даст нам некоторую меру в $\mathcal{O}$. Нулевые множества этой меры не зависят, очевидно, от используемой системы координат, и не слишком трудно показать, что существует мера на $\mathcal{M}$, нулевыми множествами которой в каждом $\mathcal{O}$ являются в точности нулевые множества мер, определяемых локальной системой координат. Мы будем называть класс мер, соответствующий этой мере, *естественным классом мер* на $\mathcal{M}$. Гильбертово пространство для естественного класса мер мы будем называть *естественным гильбертовым пространством многообразия* и обозначать через $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$.

Мы будем говорить, что мера α на $\mathcal{M}$ принадлежит классу C^∞, если в любой системе координат ее производная Радона–Никодима относительно меры, определенной системой координат, является функцией класса C^∞. Можно показать, что множество всех пар (α, f), таких, что и α и f принадлежат классу C^∞, является плотным подпространством $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$; мы будем обозначать его через $\mathcal{H}^0_{\mathcal{M}}$ и называть подпространством класса C^∞ пространства $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$.

Если V — любой автоморфизм $\mathcal{M}$ как многообразия класса C^∞, то V определяет взаимно однозначное отображение $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$ на $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$, которое, очевидно, является унитарным (причем $\mathcal{H}^0_{\mathcal{M}}$ отображается на $\mathcal{H}^0_{\mathcal{M}}$). В частности, каждая однопараметрическая группа автоморфизмов $t \to V_t$ многообразия $\mathcal{M}$ определяет однопараметрическую унитарную группу $t \to U_t$ на $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$. Согласно теореме Стона $U_t = e^K$, где K кососопряжен. Мы хотим связать кососопряженный оператор K в $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$ с контравариантным векторным полем L на $\mathcal{M}$, которое является инфинитезимальной образующей группы V_t. Пусть α — бесконечно дифференцируемый элемент естественного класса мер на $\mathcal{M}$, и пусть $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$ реализовано как $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$. Прямое вычисление показывает, что для всех бесконечно дифференцируемых функций f с компактным носителем $K(f) = L(f) - (\sigma/2)f$, где σ — производная при $t = 0$ квадратного корня из производной Радона–Никодима по мере α меры α, преобразованной с помощью V_t, т. е.

$$\sigma = \frac{d}{dt}\left.\sqrt{\frac{dV_{t^\alpha}}{d\alpha}}\right|_{t=0}.$$

В частности, если мера α инвариантна относительно преобразований V_t, то $L(f) = K(f)$. Можно показать, что σ является единственной действительной функцией, для которой оператор $f \to L(f) - (\sigma/2)f$ является формально кососопряженным в $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$, т. е.

$$\int L(f)\,\overline{\mathrm{g}}\,d\alpha + \int L(\mathrm{g})\,\overline{f}\,d\alpha + \int \sigma\, f\,\overline{\mathrm{g}}\,d\alpha = 0.$$

Поэтому σ можно определить независимо от того, является ли векторное поле L инфинитезимальной образующей некоторой однопараметрической группы. Если $(q_1, \ldots, q_n)$ — такая локальная система координат, что $\alpha(E) = \int\limits_E dq_1, \ldots, dq_n$, и $L = \sum a_j\,\partial/\partial q_j$, то σ оказывается равной $\sum a_j\,\partial a_j/\partial q_j$. Поэтому в соответствии с обычной терминологией классического векторного анализа мы будем называть σ дивергенцией L относительно α и писать $\sigma = \mathrm{div}_\alpha L$.

Пусть теперь T — риманова метрика класса C^∞ на $\mathcal{M}$. Для каждой функции ψ класса C^∞ дифференциал $d\psi^T$ будет ковариантным векторным полем класса C^∞, которое с помощью тензора T можно превратить в контравариантное векторное поле $\widetilde{d\psi^T}$. С другой стороны, на $\mathcal{M}$ имеется мера α_T класса C^∞, каноническим образом соответствующая метрике T. Мы не будем пытаться описать ее точно (хотя это и не было бы слишком сложным), а ограничимся замечанием, что эта мера задает тот самый n-мерный „объем“, который получится, если предварительно определить „длину“ кривой $\varphi(t)$ интегралом от $\sqrt{T(d\varphi/dt, d\varphi/dt)}$. Оператор $\psi \to \mathrm{div}_{\alpha_T}(\widetilde{d\psi^T})$ будет тогда дифференциальным оператором второго порядка, канонически соответствующим T. Если $\mathcal{M}$ — евклидово пространство и T — обычная евклидова метрика, то этот оператор в прямоугольных координатах имеет вид

$$\psi \to \frac{\partial^2\psi}{\partial q_1^2} + \ldots + \frac{\partial^2\psi}{\partial q_n^2},$$

т. е. является обычным лапласианом. В общем случае он называется *оператором Лапласа–Бельтрами* метрики T. На подпространстве бесконечно дифференцируемых функций с компактным носителем он является симметрическим оператором относительно скалярного произведения в $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha_T)$. Следовательно, при каноническом отображении $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha_T)$ на $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$ он определяет симметрический оператор в $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$. Мы будем обозначать этот оператор через ∇^T.

Для любой действительной борелевской функции на $\mathcal{M}$ обозначим через Q_f самосопряженный оператор в $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$, который переводит (α_1, h) в $(|f|^2\alpha_1, h)$ и определен, если $\int |f|^2\, d\alpha_1 < \infty$. Конечно, если мы реализуем $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$ как $\mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha)$, то Q_f, становится просто оператором умножения на функцию f.

Пусть теперь роль $\mathcal{M}$ играет E^{3n} и H — функция Гамильтона, определяемая потенциалом $\mathcal{V}$ и массами $m_1, \ldots, m_{3n}$. Пусть T — метрика в $\mathcal{M}$, определяемая кинетической частью энергии H. Тогда, как показывает непосредственное вычисление, каноническое отображение $\mathcal{L}^2(E^{3n}, \alpha)$ (где α — мера Лебега) на $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$ переводит формальный динамический оператор, соответствующий (см. разд. 2.4), в оператор $-\hbar\nabla^T + Q_{\mathcal{V}}/\hbar$, а операторы, соответствующие наблюдаемым координатам q_j, — в Q_{q_j}. Другими словами, правило „квантования“ для классической системы, данное в разд. 2.4, можно переформулировать следующим образом: пусть $\mathcal{M}$ — конфигурационное многообразие, T — метрика кинетической энергии и $\mathcal{V}$ — функция потенциальной энергии; тогда: (a) гильбертово пространство соответствующей квантовой системы есть $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$; (b) для каждой действительной функции f на $\mathcal{M}$ соответствующая квантовая наблюдаемая определяется оператором Q_f; (c) динамический оператор совпадает с $-\hbar\nabla^T + (1/\hbar)\, Q_{\mathcal{V}}$ везде, где этот оператор определен.

В этой формулировке правило квантования не зависит от выбора системы координат и имеет смысл для произвольного конфигурационного многообразия $\mathcal{M}$ класса C^∞, т. е. для всех динамических систем, рассмотренных в разд. 1.3. Мы говорим, что получающаяся таким образом квантовая система является результатом канонического квантования исходной классической системы. С помощью рассуждений, вполне аналогичных тем, которые приводились в предыдущем разделе, можно показать, что имеется только один способ квантования, удовлетворяющий некоторым простым естественным условиям. Конечно, остается вопрос о существовании и единственности самосопряженного расширения формального оператора $-\hbar\nabla^T + (1/\hbar)\, Q_{\mathcal{V}}$, однако замечания, сделанные по этому поводу в конце предыдущего раздела, сохраняют силу.

Мы должны напомнить читателю, что при использовании координат, отличных от декартовых, наблюдаемую, соответствующую некоторой функции координат, можно построить только тогда, когда эта функция является однозначной и действительной на конфигурационном многообразии. Так, для сферической системы координат r, θ, φ (для одной частицы) не существует наблюдаемой (т. е. самосопряженного оператора), соответствующей θ или φ, поскольку они не являются однозначными функциями. С другой стороны, будут существовать операторы, соответствующие $\sin\theta$, $\cos\theta$, $\sin\varphi$, $\cos\varphi$ и т. д., точно так же как оператор, соответствующий разрывной функции θ, где θ считается меняющейся в пределах от 0 до 2π.

Можно расширить понятие наблюдаемой, включив в рассмотрение вопросные меры, определенные на многообразиях, отличных от действительной прямой. Если это сделать, то новым наблюдаемым не будут, конечно, соответствовать самосопряженные операторы; вообще говоря, им совсем не будут соответствовать какие-либо операторы в гильбертовом пространстве состояний. Можно, например, поставить в соответствие углу θ проекторную меру, определенную на единичной окружности $|z| = 1$ комплексной плоскости; тогда каждый вектор $\psi \in \mathcal{H}$ состояния будет определять некоторое вероятностное распределение на окружности $|z| = 1$, и это распределение будет вполне согласовано с вероятностными распределениями, определяемыми обычным образом „настоящими“ наблюдаемыми $\cos\theta$ и $\sin\theta$ в этом состоянии. В действительности в этом случае полученной наблюдаемой можно поставить в соответствие унитарный оператор в $\mathcal{H}$. Одно обобщение спектральной теоремы устанавливает взаимно однозначное соответствие между проекторными мерами на плоскости и так называемыми „нормальными“ операторами. Нормальные операторы со спектром, лежащим на окружности $|z| = 1$, — это в точности унитарные операторы.

Наблюдаемая импульса в классической механике — это функция g на $\mathcal{M}_{V^*}$, такая, что $\widetilde{d\mathrm{g}}$ является инфинитезимальной образующей некоторой однопараметрической группы на $\mathcal{M}_{V^*}$, порожденной однопараметрической группой на $\mathcal{M}$. Эта однопараметрическая группа на $\mathcal{M}$ порождает однопараметрическую унитарную группу на $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$; инфинитезимальная образующая последней, умноженная на $\hbar/i$, является по определению оператором, задающим соответствующую наблюдаемую импульса в квантовой механике. Это определение естественно и подтверждается тем, что соотношение между скоростью и импульсом в классической механике сохраняется в квантовой механике; наблюдаемая скорости, соответствующая наблюдаемой координаты, определяемой оператором Q_j, задается, конечно, оператором

$i(HQ_f - Q_f H)$.

Заметим, что наблюдаемым координаты и импульса соответствуют вполне определенные самосопряженные операторы в $\mathcal{H}_\mathcal{M}$. Динамический оператор H (определенный формально) линейно отображает Q_f для достаточно гладких f на некоторое подмножество наблюдаемых импульса, и кинетическая часть H определяется (по крайней мере формально) этим отображением. Было бы интересно довести формальную часть этих соображений до строгой теории.

Естественное гильбертово пространство $\mathcal{H}_\mathcal{M}$ удобно использовать для прямого сравнения классической и квантовой механики. Напомним, что в квантовой механике рассматриваются однопараметрические группы автоморфизмов $\mathcal{H}_\mathcal{M}$, тогда как в классической — однопараметрические группы автоморфизмов других объектов, естественно связанных с $\mathcal{M}$, а именно кокасательных пучков $\mathcal{M}_{V^*}$. Пусть теперь $\varphi = (\alpha, e^{iS})$ — произвольный элемент $\mathcal{H}_\mathcal{M}$, такой, что функция S дифференцируема. Функция S определена только с точностью до слагаемого, кратного 2π, но дифференциал dS определен однозначно и отображает $\mathcal{M}$ в $\mathcal{M}_{V^*}$. Положим $\beta_\varphi = \alpha\left(dS^{-1}(E)\right)$ для любого борелевского множества E в $\mathcal{M}_{V^*}$. Тогда β_φ — конечная мера на $\mathcal{M}_{V^*}$, сконцентрированная на $dS(\mathcal{M})$. Далее, β_φ однозначно определяет φ. Таким образом, $\varphi \to \beta_\varphi$ есть взаимно однозначное отображение плотного подпространства $\mathcal{H}_\mathcal{M}$ во множество всех конечных мер на $\mathcal{M}_{V^*}$. Под действием динамической группы в $\mathcal{H}_\mathcal{M}$ меры β_φ движутся в $\mathcal{M}_{V^*}$. Если β_φ сконцентрировано вблизи одной точки, то движение этой точки в $\mathcal{M}_{V^*}$ будет происходить вблизи траектории соответствующей классической системы. Было бы интересно дать строгое доказательство некоторой точной теоремы, относящейся к этим связям $\mathcal{H}_\mathcal{M}$ и $\mathcal{M}_{V^*}$ [12]).

2.7 Линейные системы и квантование электромагнитного поля

В разд. 1.4 мы показали, как можно переформулировать классическую механику линейной системы, чтобы применить ее к системам с бесконечным числом степеней свободы. В этом разделе мы покажем, что переход от классической линейной системы к квантовой может быть проведен так, что он будет иметь смысл также для систем с бесконечным числом степеней свободы. Мы покажем затем, что квантованное электромагнитное поле представляет собой такую модель для теории излучения, которая позволяет объединить волновые и корпускулярные аспекты этой теории.

В этом и в следующих разделах нам придется часто пользоваться понятием „тензорного произведения“ гильбертовых пространств, и мы начнем с короткого обзора необходимых нам свойств этих произведений.

Пусть $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$ — гильбертовы пространства. Антибилинейным функционалом на $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ мы будем называть такую комплексную функцию f, что

$$f(a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2, \theta) = \overline{a}_1 f(\varphi_1, \theta) + \overline{a}_2 f(\varphi_2, \theta)$$

и

$$f(\varphi, a_1\theta_1 + a_2\theta_2) = \overline{a}_1 f(\varphi, \theta_1) + \overline{a}_2 f(\varphi, \theta_2),$$

где a_1 и a_2 — комплексные числа, а φ_1, φ_2, φ, θ_1, θ_2, θ — элементы $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$. Для $\varphi \in \mathcal{H}_1$ и $\psi \in \mathcal{H}_2$ *тензорным произведением* φ и ψ (обозначаемым так: $\varphi \otimes \psi$) по определению называется антибилинейный функционал

$$(\varphi \otimes \psi)(\theta_1, \theta_2) = (\varphi|\theta_1)(\psi|\theta_2).$$

Пусть $(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)'$ — множество всех конечных линейных комбинаций антибилинейных функционалов вида $\varphi \otimes \psi$. Нетрудно показать, что в пространстве $(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)'$ можно единственным образом ввести скалярное произведение, которое на элементах вида $\varphi \otimes \psi$ задается формулой

$$((\varphi_1 \otimes \psi_1)|(\varphi_2 \otimes \psi_2)) = (\varphi_1|\varphi_2)(\psi_1|\psi_2).$$

[12]) Такая теорема доказана в работах В. П. Маслова (Успехи матем., наук, **14** (1959), вып. 3, 161–168; **15** (1960), вып. 1, 211–219). — *Прим. ред.*

Мы будем называть $(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)'$, снабженное этим скалярным произведением, предтензорным произведением $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$. Его пополнение является гильбертовым пространством, которое мы будем называть тензорным произведением пространств $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$ и обозначать через $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ Нетрудно показать, что из сходимости по норме на $(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)'$ вытекает простая (поточечная) сходимость соответствующих функционалов на $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ так что каждый элемент $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ можно отождествить с некоторым антибилинейным функционалом на $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$.

Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ — ортонормальный базис в $\mathcal{H}_1$ $\psi_1, \psi_2, \ldots$ — ортонормальный базис в $\mathcal{H}_2$. Тогда, как нетрудно показать, $\varphi_i \otimes \psi_j$ образуют ортонормальный базис в $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Вообще пусть

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_1, \alpha_1), \quad \mathcal{H}_2 = \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_2, \alpha_2),$$
$$\mathcal{H}_3 = \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_1 \times \mathcal{M}_2, \alpha_1 \times \alpha_2).$$

Если

$$f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_1, \alpha_1), \quad \mathrm{g} \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_2, \alpha_2),$$

то

$$f\mathrm{g} \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_1 \times \mathcal{M}_2, \alpha_1 \times \alpha_2).$$

Простое вычисление показывает, что имеется естественное унитарное отображение $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ на $\mathcal{H}_3$, которое переводит $f \otimes \mathrm{g}$ в $f\mathrm{g}$.

Рассмотрим случай, когда $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}$. Замкнутое подпространство $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$, порожденное элементами вида $\varphi \otimes \psi + \psi \otimes \varphi$ является, как нетрудно видеть, множество всех тех элементов $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$, которым соответствуют функционалы на $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$, не меняющиеся при перестановке своих аргументов. Мы будем называть это подпространство *симметрическим тензорным произведением* $\mathcal{H}$ на себя н обозначать его через $\mathcal{H} \circledS \mathcal{H}$. Аналогичным образом мы определим $\mathcal{H} \circledA \mathcal{H}$ — *антисимметрическое тензорное произведение* — как подпространство, порожденное всеми элементами вида $\varphi \otimes \psi - \psi \otimes \varphi$. Нетрудно видеть, что $\mathcal{H} \circledS \mathcal{H}$ и $\mathcal{H} \circledA \mathcal{H}$ являются ортогональными дополнениями друг друга. Действительно, оператор на $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$, который переставляет аргументы у антибилинейных функционалов, одновременно самосопряжен и унитарен и поэтому имеет чисто точечный спектр, состоящий из двух точек: 1 и -1. Произведения $\mathcal{H} \circledS \mathcal{H}$ и $\mathcal{H} \circledA \mathcal{H}$ являются подпространствами, соответствующими этим собственным значениям.

Очевидным образом обобщая вышеприведенные определения, мы получим антиполилинейные функционалы на $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \times \cdots \times \mathcal{H}_n$ и тензорное произведение $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n$ — пополнение линейной оболочки произведений $\varphi_1 \otimes \varphi_2 \otimes \cdots \otimes \varphi_n$, причем

$$(\varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_n | \psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_n) = (\varphi_1 \otimes \psi_1) \ldots (\varphi_n \otimes \psi_n)$$

Точно так же существует естественное унитарное отображение

$$\mathcal{L}^2(\mathcal{M}_1 \times \mathcal{M}_2 \times \cdots \times \mathcal{M}_n, \alpha_1 \times \alpha_2 \times \cdots \times \alpha_n)$$

на

$$\mathcal{L}^2(\mathcal{M}_1, \alpha_1) \otimes \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_2, \alpha_2) \otimes \cdots \otimes \mathcal{L}^2(\mathcal{M}_n, \alpha_n)$$

Заметим, в частности, что гильбертово пространство состояний системы n точек является тензорным произведением пространств состояний отдельных точек. Каждая перестановка n номеров вызывает некоторое унитарное преобразование пространства $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}$ (n множителей). Мы будем обозначать замкнутое подпространство этого пространства, состоящее из всех векторов, которые инвариантны при всех этих преобразованиях, через $\mathcal{H} \circledS \mathcal{H} \circledS \ldots \circledS \mathcal{H}$ и называть его симметрическим тензорным произведением n пространств $\mathcal{H}$. Замкнутое подпространство всех векторов, которые меняют знак под действием любого из преобразований, соответствующих нечетной перестановке номеров, мы будем называть антисимметрическим тензорным произведением и обозначать через $\mathcal{H} \circledA \mathcal{H} \circledA \ldots \circledA \mathcal{H}$. Утверждение, что $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}$ есть прямая сумма $\mathcal{H} \circledS \mathcal{H} \circledS \ldots \circledS \mathcal{H}$ и $\mathcal{H} \circledA \mathcal{H} \circledA \ldots \circledA \mathcal{H}$, является, конечно неверным (при $n > 2$).

Пусть $T_1, T_2, \ldots, T_n$ — ограниченные линейные операторы в $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \ldots, \mathcal{H}_n$ соответственно. Тогда существует единственный ограниченный оператор T в $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_n$, такой, что

$$T(\varphi_1 \otimes \varphi_2 \otimes \ldots \otimes \varphi_n) = T_1(\varphi_1) \otimes T_2(\varphi_2) \otimes \ldots \otimes T_n(\varphi_n).$$

Мы обозначаем его через $T_1 \otimes T_2 \otimes \ldots \otimes T_n$ и называем тензорным произведением операторов T_j. Если все T_j унитарны (самосопряжены), то и T будет унитарным (соответственно самосопряженным). Для неограниченных самосопряженных операторов приходится изучать вопрос об области определения, но он оказывается несложным, так что можно всегда определить неограниченный самосопряженный оператор $T_1 \otimes T_2 \otimes \ldots \otimes T_n$.

Пусть $t \to U_t^j, \quad j = 1, 2, \ldots, n$ — однопараметрические унитарные группы в пространствах $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \ldots, \mathcal{H}_n$. Тогда $t \to U_t^1 \otimes U_t^2 \otimes \ldots \otimes U_t^n$ — однопараметрическая унитарная группа в пространстве $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_n$, которую мы будем обозначать через $U^1 \otimes U^2 \otimes \ldots \otimes U^n$.

Пусть K^j — инфинитезимальная образующая группы U^j; тогда несложные вычисления показывают, что

$$(K^1 \otimes I \otimes I \otimes \ldots \otimes I) + (I \otimes K^2 \otimes I \otimes \ldots \otimes I) + \\ + (I \otimes I \otimes K^3 \otimes \ldots \otimes I) + \ldots (I \otimes I \otimes \ldots \otimes K^n)$$

является инфинитезимальной образующей группы

$$U^1 \otimes U^2 \otimes \ldots \otimes U^n.$$

Именно такой вид имеет квантовый динамический оператор классической системы n невзаимодействующих частиц.

Если $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \cdots = \mathcal{H}_n = \mathcal{H}$ и $U^1 = U^2 = \cdots = U^n = V$, то $V \otimes V \otimes \ldots \otimes V$ переводит каждое из подпространств $\mathcal{H} \circledS \mathcal{H} \circledS \ldots \circledS \mathcal{H}$ и $\mathcal{H} Ⓐ \mathcal{H} Ⓐ \ldots Ⓐ \mathcal{H}$ в себя и определяет там однопараметрические унитарные группы. Мы будем называть их симметрической и антисимметрической n-й степенью V и обозначать через $V \circledS V \circledS \ldots \circledS V$ и $V Ⓐ V Ⓐ \ldots Ⓐ V$ соответственно.

Пусть $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \ldots$ — последовательность гильбертовых пространств и $\mathcal{H}$ — множество последовательностей $\varphi_1, \varphi_2 \ldots$, таких, что $\varphi_j \in \mathcal{H}_j$ и $\sum\limits_{j=1}^{\infty} \|\varphi_j\|^2 < \infty$. Тогда само $\mathcal{H}$ очевидным и естественным образом является гильбертовым пространством. Мы называем это гильбертово пространство прямой суммой $\mathcal{H}_j$ и обозначаем его через $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \ldots$. Если U^j — однопараметрическая группа в $\mathcal{H}_j$, то унитарную группу $U^1 \oplus U^2 \oplus \ldots$ в $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \ldots$ можно определить следующим образом:

$$(U^1 \oplus U^2 \oplus \ldots)_t(\varphi_1, \varphi_2 \ldots) = (U_t^1 \varphi_1, U_t^2 \varphi_2, \ldots).$$

Мы называем $U^1 \oplus U^2 \oplus \ldots$ прямой суммой групп U^j.

Вернемся теперь к квантовой механике. Один из наиболее важных результатов разд. 1.4 заключался в том, что линейная классическая система определяет на своем фазовом пространстве структуру конечномерного гильбертова пространства $\mathcal{H}_0$, относительно которой динамическая группа является однопараметрической группой унитарных преобразований V. Сейчас при квантовании этой линейной системы в соответствии с принципами, сформулированными в разд. 2.4 и 2.5, мы получим бесконечномерное гильбертово пространство $\mathcal{H}$ и однопараметрическую группу унитарных преобразований U в $\mathcal{H}$. Спрашивается, существует ли какая-либо простая связь между U и V ? Оказывается, что дело обстоит именно так. В частности, будет показано, что имеется естественное унитарное отображение $\mathcal{H}$ на

$$C \oplus \mathcal{H}_0 \oplus (\mathcal{H}_0 \circledS \mathcal{H}_0) \oplus (\mathcal{H}_0 \circledS \mathcal{H}_0 \circledS \mathcal{H}_0) \oplus \ldots,$$

такое, что U переходит в

$$I \oplus V \oplus (V \circledS V) \oplus (V \circledS V \circledS V) \oplus \ldots,$$

Здесь C — одномерное комплексное гильбертово пространство и I — тождественно равная единичному оператору унитарная группа в C.

Пусть $\mathcal{H}^r = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \ldots$ — произвольная прямая сумма конечномерных или бесконечномерных гильбертовых пространств $\mathcal{H}_j$. Если $X_0, X_1, X_2, \ldots$ — произвольная последовательность ограниченных линейных операторов, причем X_j переводит $\mathcal{H}_j$, в $\mathcal{H}_(j+1)$, то мы определяем оператор $X = (X_0, X_1, X_2, \ldots)^r$ в $\mathcal{H}$, полагая

$$X(\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \ldots) = (X_0^*(\varphi_1), X_0(\varphi_0) + X_1^*(\varphi_2), X_1(\varphi_1) + X_2^*(\varphi_3), \ldots)$$

при условии, что обе последовательности принадлежат $\mathcal{H}^r$. Нетрудно установить, что оператор X самосопряжен. Рассмотрим теперь частный случай, когда

$$\mathcal{H}_0 = C, \quad \mathcal{H}_n = \mathcal{H}_1 \circledS \mathcal{H}_1 \circledS \ldots \circledS \mathcal{H}_1 \quad (n \text{ множителей})$$

Для каждого $\varphi \in \mathcal{H}_1$ положим

$$X_n^\varphi(\theta) = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\, P_{n+1}(\varphi \otimes \theta),$$

где через P_{n+1} обозначен проектор пространства

$$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_1 \quad (n+1 \text{ множитель})$$

на его замкнутое подпространство

$$\mathcal{H}_1 \circledS \mathcal{H}_1 \circledS \ldots \circledS \mathcal{H}_1 \quad (n+1 \text{ множитель}).$$

Простое вычисление показывает, что для операторов

$$X_\varphi = (X_0^\varphi, X_1^\varphi, X_2^\varphi, \ldots)^r$$

выполняется соотношение

$$X_{\varphi_1} X_{\varphi_2} - X_{\varphi_2} X_{\varphi_1} = \frac{((\varphi_2|\varphi_1) - (\varphi_1|\varphi_2))}{2} I$$

(везде, где левая часть имеет смысл). Кроме того, почти очевидно, что для каждого унитарного оператора W в $\mathcal{H}_1$ мы имеем

$$X_{W(\varphi)} = e^W\, X_\varphi\, e^{-W},$$

где e^W — унитарный оператор, переводящий каждое $\mathcal{H}_n = \mathcal{H} \circledS \mathcal{H} \circledS \ldots \circledS \mathcal{H}$ в себя и совпадающий на нем с ограничением оператора $W \otimes \ldots \otimes W$. В частности, если $\mathcal{H}_1$ — фазовое пространство классической конечномерной линейной системы, а $t \to V_t$ — ее динамическая группа, то

$$X_{V_t(\varphi)} = e^{V_t}\, X_\varphi\, e^{-V_t}.$$

Пусть $\mathcal{H}_1 = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^*$, где векторное пространство $\mathcal{M}$ является конфигурационным пространством системы, и T — линейное отображение $\mathcal{M}$ на $\mathcal{M}^*$, определяемое кинетической энергией. Пусть B — оператор, введенный на стр. 31, т. е. $\theta \to {}^1/_2 T(B(\theta), B(\theta))$ есть потенциальная функция системы. Положим для каждого $\varphi_1 = (\theta_1, l_1)$ из $\mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^*$

$$f_{\varphi_1}(\theta, l) = \hbar\, l_1(\theta) - l(B(\theta_1));$$

тогда f_φ линейно на $\mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^*$, рассматриваемом как вещественное линейное пространство, и каждый вещественный линейный функционал на $\mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^*$ однозначно представляется в виде f_φ. Далее, нетрудно вычислить скобку Пуассона $[f_{\varphi_1}, f_{\varphi_2}]$; она оказывается равной

$$\hbar(l_1(B(\theta_2)) - l_2(B(\theta_1))),$$

т. е. мнимой части комплексного скалярного произведения φ_1 и φ_2 в $\mathcal{H}_1$, умноженной на $\hbar$. Следовательно,

$$X_{\varphi_1} X_{\varphi_2} - X_{\varphi_2} X_{\varphi_1} = \frac{\hbar}{i}\,[f_{\varphi_1}, f_{\varphi_2}]\, I,$$

и если поставить в соответствие каждой наблюдаемой f_φ самосопряженный оператор X_φ, коммутационные соотношения Гейзенберга удовлетворяются. Из того, что

$$X_{V_t(\varphi)} = e^{V_t}\, X_\varphi\, e^{-V_t},$$

мы выводим

$$\frac{1}{i}(H X_\varphi - X_\varphi H) = X_{A(\varphi)},$$

где $-iH$ — кососопряженная инфинитезимальная образующая группы $t \to e^{V_t}$. Но, как показывают вычисления, $f_{A(\varphi)} = A^*(f_\varphi)$, что равняется скобке Пуассона классической энергии с f_φ. Таким образом, $\hbar H$ и X_φ удовлетворяют в точности таким же коммутационным соотношениям, как операторы, получающиеся при каноническом квантовании нашей классической линейной системы и соответствующие энергии и наблюдаемым f_φ. Поскольку операторы X_φ для функций f_φ, равных нулю на $\mathcal{M}$, образуют, как нетрудно видеть, полное коммутирующее семейство, мы можем сослаться на теорему единственности, упомянутую в разд. 2.4. Итак, мы показали, что гильбертово пространство $\mathcal{H}$ квантовой системы, соответствующей нашей классической системе, можно отобразить на

$$\mathcal{H}^r = C \oplus \mathcal{H}_1 \oplus (\mathcal{H}_1 \circledS \mathcal{H}_1) + \ldots$$

таким образом, что оператор, соответствующий наблюдаемой f_φ, перейдет в X_φ, а динамическая группа — в группу

$$e^V = I \oplus V \oplus (V \circledS V) \oplus (V \circledS V \circledS V) \oplus \ldots .$$

Иначе говоря, мы имеем следующее эквивалентное обычному правило квантования классической системы, применимое в том случае, когда система линейна. Превратим фазовое пространство в конечномерное гильбертово пространство $\mathcal{H}_1$, так что динамическая группа станет однопараметрической группой V унитарных преобразований, так, как это описано в разд. 1.4. Образуем однопараметрическую группу

$$e^V = I \oplus V \oplus (V \circledS V) \oplus (V \circledS V \circledS V) \oplus \ldots .$$

Это динамическая группа нашей квантовой системы. Для каждого действительного линейного функционала f на $\mathcal{H}_1$ выберем φ так, чтобы $f = f_\varphi$. Тогда X_φ будет самосопряженным оператором, соответствующим наблюдаемой f.

Пусть $\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_k$ — основные частоты нашей классической системы; тогда собственные значения квантового динамического оператора, которые соответствуют собственным функциям в подпространстве $\mathcal{H}_1$, равны $2\pi\nu_1$, $2\pi\nu_2$, $\ldots$, $2\pi\nu_k$. Поэтому соответствующие собственные значения оператора энергии равны $2\pi\hbar\nu_1$, $2\pi\hbar\nu_2$, $\ldots$, $2\pi\hbar\nu_k$, или $\hbar\nu_1, \ldots, \hbar\nu_k$, если мы примем $\hbar = h/2\pi$. Для собственных функций из подпространства $\mathcal{H}_1 \circledS \mathcal{H}_1$ эти значения представляют собой всевозможные суммы $h(\nu_i + \nu_j)$, для подпространства $\mathcal{H}_1 \circledS \mathcal{H}_1 \circledS \mathcal{H}_1$ — всевозможные суммы $h(\nu_i + \nu_j + \nu_k)$ и т. д. Таким образом, общий вид собственного значения энергии задается формулой

$$h(n_1\nu_1 + n_2\nu_2 + \ldots + n_k\nu_k).$$

Читатель может проверить, что эти значения на константу отличаются от тех, которые получились бы в результате канонического квантования в его прежней форме. Это объясняется тем, что коммутационные соотношения определяют энергию только с точностью до аддитивной постоянной. Напомним, что вообще и в классической, и в квантовой механике энергия определяется с точностью до аддитивной постоянной. При нашем новом способе канонического квантования эта постоянная выбирается другим образом — более удачным с точки зрения обобщения на бесконечномерное пространство $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}(V)$.

Преимущество нового способа квантования линейных систем заключается в том, что все построения применимы не только к конечномерному, но и к бесконечномерному пространству $\mathcal{H}(V)$. Единственное отличие состоит в том, что в бесконечномерном случае X_φ будет определен только для некоторого плотного множества функционалов f_φ.

Таким образом, у нас имеется естественный способ квантования бесконечномерных линейных систем. Если нам задана такая система, то мы должны реализовать ее динамическую группу как однопараметрическую унитарную группу на фазовом пространстве, рассматриваемом как гильбертово пространство, и продолжать так, как показано выше. Это построение можно применить, в частности, в том случае, когда роль классической системы играет электромагнитное поле. В этом случае, как и во многих других подобных случаях, удобно ввести самосопряженный оператор N на фазовом пространстве

$$C \oplus \mathcal{H}(V) \oplus (\mathcal{H}(V) \circledS \mathcal{H}(V)) + \ldots,$$

который на каждом подпространстве

$$\mathcal{H}(V) \circledS \mathcal{H}(V) \circledS \dots \circledS \mathcal{H}(V) \quad (n \text{ множителей})$$

равен тождественному оператору, умноженному на n (оператор N определяется этими условиями однозначно). Соответствующую наблюдаемую мы будем называть наблюдаемой „числа частиц“. Вообще о состоянии, определяемом вектором из $\mathcal{H}(V) \circledS \mathcal{H}(V) \circledS \dots \circledS \mathcal{H}(V)$ (n множителей), говорят как о состоянии, в котором „имеется n частиц“. Чем это объясняется ? Действительно ли в таких состояниях система ведет себя подобно системе из n частиц ?

Мы уже видели (см. стр. 68 и 73), что операторы, соответствующие наблюдаемым энергии и импульса квантовой системы, можно получить как инфинитезимальные образующие некоторых однопараметрических групп унитарных операторов. Для системы, состоящей из одной свободной частицы (см. стр. 78), будет верным и более сильное утверждение. Пусть Δ — группа всех движений пространства, θ — группа всех переносов времени и Γ — группа преобразований пространства-времени, порожденная подгруппами Δ, θ и преобразованиями

$$(x, y, z, t) \to (x - ut, y - vt, z - wt, t).$$

Имеется естественное отображение $\gamma \to U_\gamma$ этой группы Γ в группу унитарных операторов в гильбертовом пространстве нашей системы, такое, что для любых γ_1 и γ_2 из Γ оператор $U_{\gamma_1} U_{\gamma_2} U^{-1}_{\gamma_1\gamma_2}$ кратен единичному и при этом наблюдаемые координаты, а также энергии и импульса можно получить как инфинитезимальные образующие некоторых однопараметрических подгрупп группы Γ. В этом смысле можно сказать, что квантовая механика одной свободной частицы вполне описывается отображением $\gamma \to U_\gamma$. Это отображение представляет собой пример того, что мы назовем (см. стр. 104) проективным унитарным представлением группы Γ.

В специальной теории относительности группой симметрий пространства-времени является не Γ, а другая группа L той же размерности, содержащая Δ и θ в качестве подгрупп; ее называют группой Пуанкаре или неоднородной группой Лоренца. Нетрудно построить квантовую механику одной свободной частицы, которая была бы согласована с принципами специальной теории относительности. Получающаяся квантовая система вполне описывается некоторым проективным представлением группы L, причем возникающие таким образом представления оказываются частью некоторой большей системы представлений с аналогичными свойствами.

Эти представления можно использовать для построения квантовых систем, подобных системам, описывающим свободные релятивистские частицы; естественно считать, что эти системы описывают некоторые обобщенные частицы. Обобщенные частицы отличаются от обычных главным образом наличием „внутренних степеней свободы“: у них могут быть наблюдаемые, которые коммутируют со всеми импульсами и тем не менее не являются функциями от импульсов (к таким наблюдаемым относится, например, „спин“, который мы изучим в разд. 3.4). Некоторые из обобщенных частиц отличаются от классических еще больше: они имеют нулевую массу (покоя) и не имеют наблюдаемых координат.

Во всяком случае, уравнения Максвелла инвариантны относительно группы Лоренца, так что группа L естественным образом „действует“ в гильбертовом пространстве $C \oplus \mathcal{H}(V) \oplus (\mathcal{H}(V) \circledS \mathcal{H}(V)) + \dots$, т. е. мы имеем представление группы L унитарными операторами в этом пространстве. Подпространство $\mathcal{H}(V)$ инвариантно относительно всех операторов этого представления, и определяемое на $\mathcal{H}(V)$ „подпредставление“ группы L оказывается как раз таким, какие описывают обобщенную свободную частицу. Вообще каждое слагаемое

$$\mathcal{H}(V) \circledS \mathcal{H}(V) \circledS \dots \circledS \mathcal{H}(V)$$

инвариантно относительно операторов представления группы L, и их действие на этом подпространстве индуцируется действием на $\mathcal{H}(V)$.

Заметим теперь, что если $\mathcal{H}(V)$ — гильбертово пространство квантовой системы для одной частицы с динамической группой V, то $\mathcal{H}(V) \otimes \mathcal{H}(V)$ — гильбертово пространство квантовой системы из двух таких независимых частиц и соответствующей динамической группой является $V \otimes V$. Точно так же

$$\mathcal{H}(V) \otimes \mathcal{H}(V) \otimes \dots \otimes \mathcal{H}(V) \quad (n \text{ множителей})$$

— гильбертово пространство квантовой системы из n таких же независимых частиц. Таким образом, если бы речь шла о

$$\mathcal{H}(V) \otimes \mathcal{H}(V) \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}(V),$$

а не о

$$\mathcal{H}(V) \circledS \mathcal{H}(V) \circledS \ldots \circledS \mathcal{H}(V),$$

было бы вполне естественно считать, что в состоянии, определяемом вектором из

$$\mathcal{H}(V) \otimes \mathcal{H}(V) \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}(V),$$

имеется n частиц, каждая из которых движется независимо от других по законам, определяемым действием группы U_α в $\mathcal{H}(V)$.

В чем состоит значение „симметризации" — перехода от $\mathcal{H}(V) \otimes \mathcal{H}(V) \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}(V)$ к $\mathcal{H}(V) \circledS \mathcal{H}(V) \circledS \ldots \circledS \mathcal{H}(V)$? Что вообще, независимо от квантования электромагнитного поля, означает тот факт, что в некоторой квантовой системе из n одинаковых независимых частиц допустимыми считаются только те состояния, которые составляют симметрическое подпространство тензорного произведения, получающегося в результате канонического квантования ? Поскольку это подпространство инвариантно относительно динамической группы, мы имеем естественно определенную квантовую систему. При этом, однако, многие наблюдаемые теряются; наблюдаемым новой системы соответствуют только те самосопряженные операторы, которые переводят симметрическое подпространство в себя.

Это означает, в частности, что не существует наблюдаемой для координаты x одной определенной частицы, а есть только наблюдаемые для симметрических функций от координат по оси x всех n частиц. Конечно, зная

$$x_1 + x_2 + \ldots + x_n, \quad x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2,$$
$$x_1^3 + x_2^3 + \ldots + x_n^3, \ldots x_1^n + x_2^n + \ldots + x_n^n,$$

мы можем найти $x_1, x_2 \ldots, x_n$, но не сможем определить, какое из этих чисел соответствует каждой частице.

Пусть, например, $n = 2$. Если мы знаем, что $x_1 + x_2 = a$ и $x_1^2 + x_2^2 = b$, то $x_1 x_2 = (a^2 - b)/2$ и, следовательно x_1 и x_2 являются корнями квадратного уравнения $x^2 - ax + (a^2 - b)/2 = 0$. Однако нет никакого способа определить, какой корень равен x_1 и какой — x_2. Физически это означает, что частицы в такой системе вовсе не похожи на биллиардные шары в том смысле, что отдельная частица полностью лишена индивидуальных свойств, которые позволили бы отличить ее от других; поменяв местами две частицы, мы придем к той же самой физической системе, и не имеет смысла говорить о координате x одной определенной из этих частиц.

Пояснить эту ситуацию поможет следующая аналогия. Представим себе струну, натянутую между двумя стенками и находящуюся в состоянии, показанном на рис. 1,

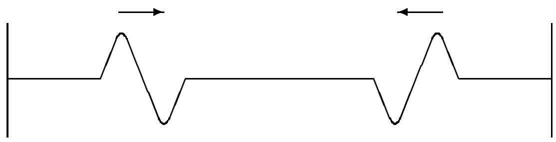

Рис. 1.

причем стрелки указывают направление, в котором двигаются соответствующие возмущения (волны). Через некоторое время эти возмущения „пройдут одно через другое" и струна придет в состояние, показанное на рис. 2. Еще

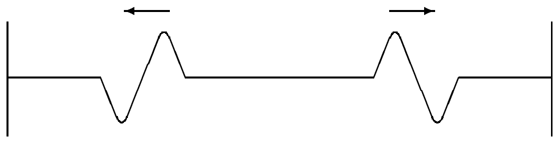

Рис. 2.

через некоторое время возмущения отразятся от концов, пойдут обратно и струна придет в состояние, показанное на рис. 3, Если мы будем рассматривать эти два возмущения как отдельные элементы, то нам покажется, что при

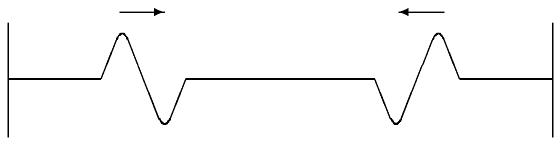

Рис. 3.

переходе от состояния, изображенного на рис. 1, к состоянию, изображенному на рис. 3, они поменялись местами. С другой стороны, сама струна находится на рис. 3 точно в том же состоянии, как и на рис. 1.

Оказывается, что все „элементарные частицы“ в физике обладают этим свойством неразличимости и их нужно представлять себе скорее как возмущения струны, чем как отдельные классические частицы. Во многих случаях, однако, индивидуальность частиц обнаруживается благодаря тому, что вместо симметрического подпространства n-кратного тензорного произведения появляется антисимметрическое. В симметрическом случае говорят, что частицы подчиняются статистике Бозе–Эйнштейна, и называют их бозонами; в антисимметрическом случае говорят о статистике Ферми–Дирака и о фермионах.

Возвращаясь к квантованному электромагнитному полю, мы видим, что его можно эквивалентным образом рассматривать как совокупность бесконечного числа независимых неразличимых частиц, подчиняющихся статистике Бозе–Эйнштейна. Эти частицы называются фотонами. Мы подчеркиваем, что эта квантовая система — одновременно и квантованная колеблющаяся среда и квантованная совокупность частиц; все зависит от того, как наблюдаемые рассматриваются. Таким образом, эта математическая система включает и волновые, и корпускулярные аспекты электромагнитной теории излучения, и парадокс возникает только из-за попытки слишком примитивно представить себе физическую картину.

Заметим в заключение, что фотоны отличаются классических частиц в двух других отношениях. При переходе к классическому пределу они не подчиняют законам Ньютона, а двигаются всегда со скоростью света. Кроме того, у них имеется неклассическая наблюдаемая спин. Мы будем говорить о нем подробнее в следующей главе в применении к другим частицам — электронам.

2.8 Статистическая квантовая механика

Статистическая термодинамика, которую мы рассматривали в разд. 1.5, почти полностью переносится на квантовую механику. Для того чтобы найти квантовый аналог канонических состояний Гиббса, мы ищем смешанное состояние, определяемое неотрицательным самосопряженным ядерным оператором Γ, которое соответствует максимальной неопределенности, при условии, что наблюдаемая энергия H_0 имеет фиксированное среднее значение E. Мы видели, что это среднее значение равно $\mathrm{Tr}(\Gamma H_0)$. Для того чтобы измерять „степень неопределенности“ состояния Γ, мы должны снова обратиться к теории информации.

Если $\varphi_1, \varphi_2, \ldots$ — полная ортонормированная система собственных векторов Γ и $\Gamma(\varphi_j) = \gamma_j \varphi_j$, то $\gamma_1 + \gamma_2 + \ldots = 1$ и состояние, определяемое оператором Γ, есть $\gamma_1\, \alpha_{\varphi_1} + \gamma_2\, \alpha_{\varphi_2} + \ldots$, где α_{φ_j} — чистое состояние, определяемое вектором φ_j. Если принять, что чистые состояния соответствуют нулевой неопределенности, то теория информации рекомендует принять за меру неопределенности Γ величину $\sum\limits_j \gamma_j \log(1/\gamma_j)$. Далее, с помощью операционного исчисления мы можем построить оператор $\Gamma \log \Gamma$ и установить, что

$$(\Gamma \log \Gamma)(\varphi_j) = (\gamma_j \log \gamma_j)(\varphi_j);$$

Следовательно,

$$\sum_j (\gamma_j \log \gamma_j)(\varphi_j) = -\mathrm{Tr}(\Gamma \log \Gamma).$$

Другими словами, мы ищем такой положительный ядерный оператор Γ, что $-\mathrm{Tr}(\Gamma \log \Gamma)$ является максимальным при граничном условии $\mathrm{Tr}(\Gamma H_0) = E$. Используя методы вариационного исчисления в применении к операторам, можно показать (см. книгу фон Неймана), что должен иметь вид $Ae^{-H_0/B}$, где A и B — константы. Поскольку $\mathrm{Tr}(\Gamma) = 1$, мы должны иметь

$$A = \left[\mathrm{Tr}(e^{-H_0/B})\right]^{-1},$$

так что

$$\Gamma = \frac{e^{-H_0/B}}{\mathrm{Tr}(e^{-H_0/B})}.$$

Конечно, для многих H_0 эта задача оказывается неразрешимой. Однако для многих интересующих нас систем H_0 обладает следующими свойствами:

(a) H_0 имеет чисто точечный спектр, и все собственные значения неотрицательны;

(b) $P(B) = \mathrm{Tr}(e^{-H_0/B})$ существует при всех $B \geqslant 0$;

(c) $\mathrm{Tr}(H_0\, e^{-H_0/B})$ существует при всех $B \geqslant 0$;

(d) $\mathrm{Tr}(H_0\, e^{-H_0/B})/P(B)$ — ограниченная монотонная функция от B. Если для такого H_0 положить

$$E(B) = \frac{\mathrm{Tr}(H_0\, e^{-H_0/B})}{P(B)},$$

то, очевидно, для каждого значения E будет существовать в точности одно значение B, такое, что оператор $e^{-H_0/B}/P(B)$ будет удовлетворять требуемым условиям. Смешанное состояние, определяемое этим оператором является квантовым аналогом канонического состояния Гиббса для заданного значения энергии,

Мы можем придать нашим формулам еще большее сходство с классическими, выразив следы через собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$ оператора H_0. Образуем из собственных значений такую последовательность, чтобы кратные собственные значения повторялись нужное число раз и, кроме того, $\lambda_1 \leqslant \lambda_1 \leqslant \ldots$; мы можем это сделать, поскольку ряд $\sum\limits_{j=1}^{\infty} e^{-\lambda_j/B}$ сходится. Тогда

$$P(B) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-\lambda_j/B} = \int\limits_0^{\infty} e^{-x/B}\, d\beta_q(x),$$

где β_q — мера, которая приписывает каждому борелевскому множеству число собственных значений, которые в нем содержатся (с учетом кратности). В частности, $\beta_q([0,x])$ есть число собственных значений, которые меньше x или равны ему. Далее,

$$E(B) = \frac{\int\limits_0^{\infty} x\, e^{-x/B}\, d\beta_q(x)}{P(B)}$$

и, точно так же как в классическом случае, $E(B) = B^2 P'(B)/P(B)$. Мы получаем теорию, совершенно аналогичную классической за одним важным исключением. Непрерывная мера β, где $\beta([0,x])$ — мера множества в фазовом пространстве, на котором классический гамильтониан не превышает x, заменяется дискретной мерой β_q, где $\beta_q([0,x])$ — число собственных значений оператора H_0, не превышающих x. Это напоминает нам ту произвольную замену непрерывной меры на дискретную, которую мы сделали для того, чтобы получить закон излучения Планка. Теперь у нас есть теоретическое объяснение этой замены.

Действительно, как мы видели в разд. 2.7, собственные значения H_0 для случая простого гармонического осциллятора равны $(2k+1)\pi\hbar\nu$, где ν — частота осциллятора и $k = 1, 2, \ldots$. Вычитая константу $\pi\hbar\nu$ из H_0, получаем $2\pi\hbar\nu$, $4\pi\hbar\nu$,.... Таким образом, β_q приписывает меру 1 каждой точке вида $2k\pi\hbar\nu$ и меру 0 произвольному множеству, не содержащему этих точек. Следовательно, если мы еще раз предположим, что $\hbar = h/2\pi$, то увидим, что мера β_q равна мере β_h (введенной на стр. 50), умноженной на h^{-1}. Поскольку умножение меры на константу не меняет $E(B)$, мы, исходя из общих принципов квантовой механики, приходим к формуле, выведенной на стр. 51. Таким образом, квантовая механика позволяет решить проблему, с которой началось развитие старой квантовой теории.

Заметим, что в квантовой механике мы не встречаемся с трудностями, связанными с отсутствием меры Лиувилля в фазовом пространстве нашей бесконечномерной системы.

Все системы, конечно- и бесконечномерные, имеют в качестве квантового фазового пространства структуру замкнутых подпространств сепарабельного бесконечномерного гильбертова пространства, где аналогом меры Лиувилля является мера, которая сопоставляет каждому замкнутому подпространству его размерность.

Интересно сравнить в общем случае меру β_q, получающуюся в квантовой механике, с мерой β, получающейся в классической механике. Поскольку известно, что классическая статистическая механика согласуется с экспериментом при высоких температурах и не согласуется при низких, следует ожидать, что β и β_q будут приводить к той же самой формуле удельной теплоемкости при высоких температурах. Эти соображения и теория преобразования Лапласа $\left(\alpha \to \int\limits_0^\infty e^{-xt}\, d\alpha(t)\right)$ приводят к предположению, что мера $\beta_q([0,x])$ асимптотически (при больших x) будет кратной мере $\beta([0,x])$, т. е. что предел

$$\lim_{x\to\infty} \frac{\beta([0,x])}{\beta_q([0,x])}$$

существует. Это действительно оказывается правильным. В анализе имеются теоремы, которые позволяют получить асимптотические формулы для собственных значений дифференциальных операторов. Применяя их к уравнению Шредингера, находим, что

$$\lim_{x\to\infty} \frac{\beta([0,x])}{\beta_q([0,x])} = (2\pi\hbar)^N,$$

где N — размерность конфигурационного пространства. Таким образом, мы имеем, с одной стороны, теоретическое объяснение адекватности классической и квантовой статистической механики при высоких температурах, а с другой стороны — физическое подтверждение теорем об асимптотическом распределении собственных значений.

Глава 3

ТЕОРИЯ ГРУПП И КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА АТОМА

3.1 Предварительные замечания

Казалось бы естественной попытка теоретически объяснить спектральные и химические свойства атомов, применяя каноническое квантование, описанное в разд. 2.4, к классической механической системе, соответствующей модели атома Резерфорда. Однако это объяснение оказывается неверным по двум различным причинам. В действительности существует одновременно и больше и меньше стационарных состояний, чем следует из этих общих соображений.

Одна из основных задач этой главы — объяснить природу и значение тех изменений, которые приходится делать. Далее, независимо от того, используем ли мы канонические или какие-либо иные правила квантования, математический анализ получающихся квантовых систем оказывается необычайно сложным; трудности, которые здесь возникают, в некотором отношении аналогичны тем, которые возникают в задаче n тел в классической механике.

Мы начнем эту главу с обсуждения двух общих методов, которые позволяют получить информацию о структуре собственных значений энергии сложных квантовых систем. В одном из них с помощью теории представлений групп используются симметрии системы. В другом предполагается, что данная система получается „малым возмущением“ из некоторой более простой системы, собственные значения которой известны, и используются разложения в степенной ряд по параметру возмущения. Оба метода часто используются совместно. При изучении атома, например, его можно аппроксимировать системой, в которой электроны не взаимодействуют и двигаются в общем сферически симметричном поле. Эта система очень богата симметриями, и ее можно детально изучить с помощью теории представлений. Затем можно исследовать реальную систему, аппроксимируя ее степенным разложением согласно теории возмущений.

3.2 Основные понятия теории представлений групп

Пусть G — локально компактная группа, т. е. группа с заданной на ней топологией, относительно которой она локально компактна и групповые операции непрерывны. *Непрерывным унитарным представлением* L группы G называется по определению отображение $x \to L_x$ группы G во множество унитарных операторов в некотором фиксированном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}(L)$, такое, что

(1) $L_{xy} = L_x L_y$ для всех x и y из G;

(2) отображение $x \to L_x(\varphi)$ группы G в $\mathcal{H}(L)$ непрерывно на G для каждого фиксированного вектора $\varphi \in \mathcal{H}(L)$.

Оказывается, что для выполнения этого последнего условия достаточно наложить значительно более слабое требование чтобы $x \to (L_x(\varphi)|\psi)$ была борелевской функцией на G для всех φ и ψ из $\mathcal{H}(L)$. Поскольку мы не будем рассматривать никаких других представлений, нам будет удобно для краткости вместо „непрерывное унитарное представление" говорить просто „представление". Если G — группа всех движений E^3, $f \in \mathcal{L}^2(E^3)$ и для каждого $\alpha \in G$ по определению $(L_\alpha f)(x, y, z) = f(\alpha^{-1}(x, y, z))$, то оператор L_α унитарен и $\alpha \to L_\alpha$ есть представление группы G. Конечно, однопараметрические непрерывные унитарные группы, о которых шла речь выше, есть в точности представления аддитивной группы вещественной прямой.

Пусть снова G — произвольная группа. Если L и M — представления G и существует унитарный оператор U, отображающий $\mathcal{H}(L)$ на $\mathcal{H}(M)$ так, что $UL_xU^{-1} = M_x$ для всех $x \in G$, то говорят, что представления L и M *эквивалентны*. Для любых L и M мы можем построить новое представление $L \oplus M$, положив $\mathcal{H}(L \oplus M) = \mathcal{H}(L) \oplus \mathcal{H}(M)$ и $(L \oplus M)_x(\varphi_1, \varphi_2) = (L_x\varphi_1, M_x\varphi_2)$; это представление называется *прямой суммой* представлений L и M. Множество всех элементов вида $(\varphi_1, 0)$ есть, очевидно, замкнутое подпространство $\mathcal{H}(L \oplus M)$, инвариантное относительно всех операторов $(L \oplus M)$.

Вообще, если $\mathcal{H}_1$ — такое замкнутое подпространство $\mathcal{H}(L)$, что $L_x(\mathcal{H}_1) \subseteq \mathcal{H}_1$ для всех $x \in G$, то ограничения на $\mathcal{H}_1$ всех операторов L_x определяют некоторое представление $L^{\mathcal{H}_1}$ группы G в пространстве $\mathcal{H}_1$. Мы называем $L^{\mathcal{H}_1}$ *подпредставлением*, определяемым замкнутым инвариантным подпространством $\mathcal{H}_1$. Из того, что $\mathcal{H}_1$ замкнуто и инвариантно, тривиально следует, что его ортогональное дополнение $\mathcal{H}_1^\perp$ также инвариантно. Далее, почти очевидно, что L эквивалентно $L^{\mathcal{H}_1} \oplus L^{\mathcal{H}_1^\perp}$, поэтому можно попытаться разложить данное представление в прямую сумму подпредставлений. Понятие прямой суммы имеет очевидное обобщение на случай нескольких и даже бесконечного числа слагаемых.

Если $\mathcal{H}(L)$ не имеет собственных инвариантных подпространств, или, что эквивалентно, если L нельзя записать в виде прямой суммы двух ненулевых представлений, оно называется *неприводимым*. В идеале хотелось бы каждое представление записать в виде прямой суммы неприводимых представлений (быть может, бесконечного их числа), но это удается сделать только в частных случаях. В общем случае имеется примерно такая же ситуация, как для самосопряженного оператора без чисто точечного спектра. Действительно, представление аддитивной группы вещественной прямой является прямой суммой неприводимых тогда и только тогда, когда его самосопряженная инфинитезимальная образующая имеет чисто точечный спектр. С другой стороны, согласно известной теореме Петера-Вейля каждое представление *компактной* группы G является прямой суммой *конечномерных* неприводимых представлений. Мы будем иметь дело главным образом с компактными группами и не будем пытаться оперировать с „непрерывными" разложениями.

Представление, которое можно разложить в прямую сумму неприводимых, будет называться *дискретным*. Для дискретного представления естественно поставить вопрос, в какой мере это разложение единственно. На этот вопрос нетрудно ответить, использовав обобщение фундаментальной леммы Шура. Если мы перепишем условие $UL_xU^{-1} = M_x$, определяющее эквивалентное представление в виде $UL_x = M_xU$, то оно будет иметь смысл для любого ограниченного оператора U, отображающего $\mathcal{H}(L)$ в $\mathcal{H}(M)$. Произвольный ограниченный оператор, отображающий $\mathcal{H}(L)$ в $\mathcal{H}(M)$ и удовлетворяющий этому тождеству, мы будем называть сплетающим оператором для L и M. Векторное пространство всех сплетающих операторов для представлений L и M мы обозначаем через $R(L, M)$. Если $L =$, то мы пишем вместо $R(L, M) = R(L, L)$ просто $R(L)$ и называем его коммутирующей алгеброй представления L.

Пусть L и M — произвольные представления и T — произвольный элемент $R(L, M)$. Тогда нулевое пространство N_T оператора T будет, очевидно, замкнутым инвариантным подпространством $\mathcal{H}(L)$ и замыкание $\overline{R}_T$ множества значений T будет, столь же очевидно, замкнутым инвариантным подпространством $\mathcal{H}(M)$. Далее, ограничение T на $N_T^\perp$ есть элемент $T_1 \in R\left(L^{N_T^\perp}, M^{\overline{R}_T}\right)$, который взаимно однозначен и имеет плотное множество значений. Из общей теории операторов следует, что T_1 можно разложить в произведение самосопряженного оператора из $R\left(L^{N_T^\perp}\right)$ и некоторого унитарного оператора, отображающего $N_T^\perp$ на $\overline{R}_T$. Этот унитарный оператор устанавливает эквивалентность между $L^{N_T^\perp}$ и $M^{\overline{R}_T}$. Таким образом, мы приходим к лемме Шура.

Л е м м а Ш у р а. *Если $T \in R(L, M)$, то ограничение на ортогональное дополнение нулевого пространства T эквивалентно ограничению M на замыкание множества значений*

T.

Следствие 1. *$R(L,M)$ сводится к нулю тогда и только тогда, когда никакое подпредставление L не эквивалентно никакому подпредставлению M. Мы будем говорить тогда, что L и M дизъюнктны.*

Следствие 2. *Если L и M неприводимы, то $R(L,M) = 0$ тогда и только тогда, когда L и M не эквивалентны.*

Предположим, что $R(L)$ содержит оператор, некратный тождественному. Тогда, поскольку вместе с каждым оператором T пространство $R(L)$ содержит сопряженный оператор T^*, это пространство содержит непостоянный самосопряженный оператор. Следовательно, по спектральной теореме $R(L)$ содержит нетривиальный проектор. Но, если $R(L)$ содержит проектор, то подпространство, соответствующее этому проектору, инвариантно относительно L. Следовательно, мы имеем

Следствие 3. *L неприводимо тогда и только тогда, когда $R(L)$ состоит только из операторов, кратных единичному.*

Предположим, что L и M — *примарные* представления в том смысле, что они являются прямыми суммами попарно эквивалентных неприводимых представлений: $L = L_1 \oplus L_2 \oplus \ldots, m = M_1 \oplus M_2 \oplus \ldots$. Если L и M эквивалентны, или, в более общем случае, не дизъюнктны, то существует ненулевой элемент $T \in R(L,M)$. Элемент T не может быть нулем на каждом $\mathcal{H}(L_j)$, поэтому, ограничивая T на некоторое $\mathcal{H}(L_j)$ и затем проектируя на некоторое $\mathcal{H}(M_k)$, мы можем получить нетривиальный элемент $R(L_j, M_k)$. Поэтому L_j и M_k эквивалентны. Таким образом, в примарном представлении неприводимая составляющая определена с точностью до эквивалентности, и два примарных представления дизъюнктны, если их неприводимые составляющие не эквивалентны. Можно также показать, что два эквивалентных примарных представления имеют одинаковое количество неприводимых составляющих.

Пусть теперь L — произвольное дискретное представление. Группируя эквивалентные неприводимые представления, мы можем записать L в виде $L_1 \oplus L_2 \oplus \ldots$, где L_j — дизъюнктные примарные представления. Пусть $M = M_1 \oplus M_2 \oplus \ldots$ — другая прямая сумма дизъюнктных примарных представлений. Пусть оператор U устанавливает эквивалентность между L и M. Точно, так же, как это сделано выше, можно показать, что U должен отображать каждое $\mathcal{H}(L_j)$ на некоторое $\mathcal{H}(M_k)$ и устанавливать эквивалентность между представлениями L_j и M_k. Далее, если $L = M$, то каждый элемент $R(L)$ должен отображать каждое $\mathcal{H}(L_j)$ на себя. Отсюда непосредственно следует, что $\mathcal{H}(L_j)$ — *однозначно определенные подпространства* $\mathcal{H}(L)$.

Таким образом, дискретное представление однозначно представляется в виде прямой суммы дискретных примарных представлений и каждое дискретное примарное представление разлагается (не однозначно) в прямую сумму попарно эквивалентных неприводимых представлений. Неприводимые слагаемые определяются однозначно с точностью до эквивалентности, и кратность, с которой они входят в данное представление, также однозначно определена. Мы хотим особо подчеркнуть, что инвариантные подпространства, фигурирующие в однозначном разложении на примарные подпредставления, переводятся в себя каждым элементом $R(L)$.

Из вышеизложенного следует, что мы будем знать дискретные представления группы с точностью до эквивалентности, если мы будем знать все неприводимые представления с точностью до эквивалентности. В частности, когда группа компактна, мы будем знать все представления, если мы будем знать все неприводимые представления (конечно, снова с точностью до эквивалентности). Задача нахождения всех неприводимых представлений данной группы, вообще говоря, чрезвычайно трудна. Однако, во многих случаях эта задача решена. Если группа абелева, то, как это вытекает из следствия 3, все неприводимые представления одномерны и имеют вид $x \to \chi(x)I$, где I — единичный оператор и χ — непрерывный гомоморфизм данной группы в группу комплексных чисел, равных по модулю 1. Если группой является действительная прямая, то общий вид такого гомоморфизма задается формулой $x \to e^{ixy}$, где y — фиксированное действительное число.

Одна из необходимых нам групп, у которой все неприводимые представления известны, — компактная группа всех вращений трехмерного пространства E^3 относительно точки 0. Пусть $X_j, j = 0, 1, 2, \ldots,$ — пространство всех комплексных функций на единичной сфере S^2 пространства E^3, равных ограничению на S^2 однородных многочленов степени j, удовлетворяющих уравнению Лапласа. Нетрудно видеть, что X_j имеет размерность

$2j+1$ и является замкнутым подпространством гильбертова пространства $\mathcal{L}^2(S^2)$. Далее, преобразование $f(x,y,z) \to \to f(\alpha^{-1}(x,y,z))$, где α — вращение вокруг 0, переводит X_j в себя и является унитарным. Таким образом, мы определили $(2j+1)$-мерное унитарное представление группы вращений, которое мы обозначим через D_j. Можно показать, что каждое D_j неприводимо и что каждое неприводимое унитарное представление группы вращений эквивалентно одному из D_j.

Пусть теперь K — замкнутая подгруппа нашей локально компактной группы G. Если L — неприводимое представление группы G, то мы можем ограничить его на K и получим представление группы K. Это представление не будет, вообще говоря, неприводимым, и если оно будет дискретным, то мы можем постараться узнать, на какие неприводимые представления K оно разлагается и с какими кратностями они входят в данное представление. Для квантовой механики наибольший интерес представляют следующие два случая: (a) G — группа вращений, а K — подгруппа вращений вокруг определенной оси; (b) G — прямое произведение группы вращений на себя, а K — „диагональная подгруппа“, т. е. подгруппа всех пар (x,y), где $x=y$.

Рассмотрим случай (a). Тогда K изоморфна группе комплексных чисел, по модулю равных 1, и общий вид автоморфизма этой группы: $e^{i\theta} \to e^{im\theta}$, где m — произвольное целое число. Будем обозначать представление $e^{i\theta} \to e^{im\theta}I$ через L_m. Тогда нетрудно показать, что D_j ограниченное на K, эквивалентно прямой сумме

$$L_{-j} \oplus L_{-j+1} \oplus \cdots \oplus L_{-1} \oplus L_0 \oplus L_1 \oplus \cdots \oplus L_j.$$

Прежде чем рассматривать случай (b), сделаем несколько общих замечаний. Если L и M — неприводимые представления групп G_1 и G_2 соответственно, то $(x,y) \to L_x \oplus M_y$ — представление группы $G_1 \times G_2$ в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}(L) \otimes \mathcal{H}(M)$. Мы обозначаем его $L \times M$ и называем внешним кронекеровским произведением представлений L и M. Оно всегда неприводимо, и для широкого класса групп, включающего все компактные группы, можно показать, что каждое неприводимое представление группы $G_1 \times G_2$ однозначно представляется в виде $L \times M$, где L и M — неприводимые представления G_1 и G_2 соответственно.

Если $G_1 = G_2 = G$, мы можем образовать диагональную подгруппу $\tilde{G}$ группы $G_1 \times G_2 = G \times G$ и рассмотреть ограничение $L \times M$ на $\tilde{G}$. Поскольку между группами $\tilde{G}$ и G имеется естественный изоморфизм, мы получаем, таким образом, некоторое представление группы G, которое, вообще говоря, будет приводимым. Мы обозначаем его $L \otimes M$ и называем (внутренним) кронекеровским произведением представлений L и M. Если мы определили все неприводимые представления G, то мы можем попытаться разложить $L \otimes M$ для каждой пары неприводимых представлений L и M и, таким образом, составить нечто вроде „таблицы умножения“ для нашей группы. Ясно, что случай (b) упомянутой выше задачи эквивалентен составлению таблицы умножения для представлений группы вращений. Эта задача имеет простой ответ, и мы приведем результат без доказательства:

$$D_j \otimes D_k = D_{|j-k|} \oplus D_{|j-k|+1} \oplus \cdots \oplus D_{j+k},$$

Эта формула известна как разложение Клебша-Гордана. Итерируя эту формулу, мы сможем найти разложение на неприводимые представления для любого произведения $L_1 \otimes L_2 \otimes \cdots \otimes L_n$, т. е. для ограничения на диагональ любого неприводимого представления группы $G \times G \times \cdots \times G$ (n множителей), где G — группа вращений.

3.3 Возмущения и теоретико-групповая классификация собственных значений

Пусть U — представление компактной группы G, и пусть L^1, L^2, L^3 …— множество всех различных неприводимых представлений группы G („всех“ и „различных“, как всегда, с точностью до эквивалентности). Пусть H — самосопряженный оператор в $\mathcal{H}(U)$, который коммутирует со всеми U_x, $x \in G$, и имеет чисто точечный спектр. Пусть $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_3 \oplus \ldots$ — разложение $\mathcal{H}$, индуцированное однозначным разложением U на примарные представления, причем $\mathcal{H}_j$ — гильбертово пространство прямой суммы нескольких экземпляров $\mathcal{H}(L^j)$. Пусть $\lambda_1, \lambda_1 \ldots$ — собственные значения H и $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ —

подпространство всех собственных векторов с собственным значением λ_j. Поскольку каждое U_x коммутирует с H, оно коммутирует со всеми P_{λ_j}, где P_{λ_j} — проектор на подпространство $\mathcal{H}_{\lambda_j}$, и, следовательно, переводит каждое $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ в себя. Поэтому каждое $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ определяет некоторое подпредставление U и разложение $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ на примарные задается, очевидно, таким разложением пространства:

$$\mathcal{H}_{\lambda_j} = (\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_1) \oplus (\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_2) \oplus \ldots .$$

Таким образом, $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ — попарно ортогональные подпространства, которые в сумме дают все $\mathcal{H}$. Далее, $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ представляет собой одновременно собственное подпространство для оператора H и пространство некоторого примарного представления U.

Можно показать, что $(x,t) \to e^{iHt}U_x$ — представление группы $G \times R$, где R — аддитивная группа прямой, и что $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ — подпространство примарного представления, определяемого неприводимым представлением $(x,t) \to e^{i\lambda_j t}L^k_x$. Отсюда следует, что каждое $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ имеет размерность, либо равную 0 или ∞, либо кратную размерности d_k пространства $\mathcal{H}_(L^k)$. Поэтому, если U содержит неприводимые неодномерные компоненты, то некоторые из собственных подпространств H обязательно будут иметь размерность, большую 1.

Появление кратных собственных значений в квантовой механике называют *вырождением*. Мы видим, что симметрия H в смысле левой инвариантности H относительно компактной унитарной группы вызывает вырождение. Если каждое $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ пересекается только с одним $\mathcal{H}_k$ и если это пересечение имеет ту же размерность, что и $\mathcal{H}(L^k)$, т. е., другими словами, если H не имеет больше кратных собственных значений, чем это необходимо для его принадлежности $R(L)$, то говорят, что H не имеет случайных вырождений (относительно U). Если H не имеет *случайных* вырождений, то его собственные значения можно классифицировать с помощью неприводимых представлений L^j в том смысле, что каждое собственное подпространство является в то же время пространством некоторого определенного L^j. В одном важном случае, с которым мы будем иметь дело, имеются случайные вырождения, но только такие, что с данным $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ пересекаются несколько *различных* $\mathcal{H}_k$. В таких случаях, т. е. в тех случаях, когда каждое пересечение $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ имеет размерность 0 или d_k, или, что эквивалентно, когда все примарные компоненты представления $(x,t) \to e^{iHt}U_x$ неприводимы, будем говорить, что нет *серьезных* вырождений.

Если H — наблюдаемая энергии квантовой системы, то можно убедиться в наличии вырождений, изменив систему так, чтобы нарушить симметрию. Тогда каждое λ_j распадается на столько различных значений, какова размерность $\mathcal{H}_{\lambda_j}$. Можно нарушить симметрию системы только частично, так, чтобы измененное H коммутировало с U_x для x из некоторой замкнутой подгруппы $K \subset G$. В этом случае λ_j распадается на меньшее количество частей, и природа этого расщепления λ_j будет тесно связана с разложением ограничений на подгруппу K соответствующих представлений L^k.

Пусть G, K, H и U те же, что и выше, и пусть для каждого $\varepsilon \in [0,1]$ задан самосопряженный оператор H^ε, такой, что $H^0 = H$. Мы предполагаем, что зависимость H^ε от ε удовлетворяет таким условиям гладкости, что все проводимые ниже построения имеют смысл и, кроме того, что $U_x H^\varepsilon = H^\varepsilon U_x$ для всех $x \in K$ и всех $\varepsilon \in [0,1]$.

Пусть λ_j — собственное значение H^0, и пусть нет серьезных вырождений, т. е. ограничение U на $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ является прямой суммой различных неприводимых представлений. Пусть L^k — одно из них, P_{jk} — проектор на $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$.

Положим $H^\varepsilon - H^0 = W^\varepsilon$ и $W^\varepsilon_{jk} = P_{jk} W^\varepsilon P_{jk}$ (мы не будем сейчас останавливаться на трудностях, происходящих из-за сложения и вычитания неограниченных операторов). Тогда W^ε_{jk} — самосопряженный оператор в конечномерном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$. Его смысл состоит в том, что собственные значения оператора

$$\frac{d}{d\varepsilon}\left[W^\varepsilon_{jk}\right]\Big|_{\varepsilon=0}$$

равны коэффициентам при членах первого порядка в разложении по степеням ε тех собственных значений H^ε, которые при $\varepsilon = 0$ сводятся к собственным значениям, соответствующим собственным векторам из $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$. Этот факт составляет основное утверждение теории возмущений первого порядка. Не заботясь о строгости, покажем, почему это происходит.

Пусть φ^ε — вектор в $\mathcal{H}$, аналитически зависящий от ε, так что мы можем писать

$$\varphi^\varepsilon = \varphi^0 + \varepsilon\varphi_1 + \varepsilon^2\varphi_2 + \ldots,$$

где $\varphi^0 \in \mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$. Предположим, что φ^ε — собственный вектор H^ε с собственным значением

$$\lambda^\varepsilon = \lambda_j + a_1\varepsilon + a_2\varepsilon^2 + \ldots;$$

тогда

$$\left[H^0 + W^\varepsilon_{jk} + (W^\varepsilon - W^\varepsilon_{jk})\right]\left[\varphi^0 + \varepsilon\varphi_1 + \varepsilon^2\varphi_2 + \ldots\right] = \\ = (\lambda_j + a_1\varepsilon + a_2\varepsilon^2 + \ldots)(\varphi^0 + \varphi_1\varepsilon + \varphi_2\varepsilon^2 + \ldots).$$

Если мы воспользуемся линейностью операторов и дистрибутивным законом, а также тем, что $H^0(\varphi^0) = \lambda_j\varphi^0$, то после уничтожения свободных членов мы сможем разделить результат на ε и получить равенство

$$a_1\varphi^0 + \lambda_j\varphi_1 + \varepsilon(\ldots) + \varepsilon^2(\ldots) = H^0(\varphi_1) + \frac{W^\varepsilon_{jk}}{\varepsilon}(\varphi^0) + \frac{W^\varepsilon - W^\varepsilon_{jk}}{\varepsilon}(\varphi^0) + W^\varepsilon\varphi_1 + \varepsilon(\ldots).$$

Проектируя затем на $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ и устремляя ε к нулю, получаем

$$a_1\varphi^0 + \lambda_j P_{jk}(\varphi_1) = P_{jk}H^0(\varphi_1) + \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{W^\varepsilon_{jk}(\varphi^0)}{\varepsilon}.$$

Но H^0 коммутирует с P_{jk} и $H^0P_{jk}(\varphi_1) = \lambda_j P_{jk}(\varphi_1)$, поэтому

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{W^\varepsilon_{jk}}{\varepsilon}(\varphi^0) = a_1\varphi^0,$$

т. е. φ^0 является собственным вектором оператора $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}(W^\varepsilon_{jk}/\varepsilon)$ с собственным значением a_1. Предполагая, что имеется полное множество собственных векторов, аналитически зависящих от ε и сводящихся при $\varepsilon = 0$ к элементам $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ мы приходим к выводу, что в первом приближении собственные значения H^ε, на которые расщепляется λ_j, имеют вид $\lambda_j + \varepsilon a_1^{(r)}$, где $a_1^{(1)}, a_2^{(2)}, \ldots$ — собственные значения оператора $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}(W^\varepsilon_{jk}/\varepsilon)$ и k пробегает все значения, для которых $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k \neq 0$. В случае, когда нет случайных вырождений, k будет однозначно определяться числом j.

Излишне говорить, что подведение строгой основы под это формальное построение теории возмущений включает целый ряд нетривиальных математических задач. Этим задачам посвящена обширная литература, к которой мы отсылаем читателя за дальнейшими подробностями. В Трудах Международного математического конгресса 1950 г. (Proceedings of the 1950 International Congress of Mathematics) был включен краткий обзор Реллиха результатов в этой области, достигнутых к тому времени. Рефераты более поздних работ, принадлежащих таким авторам, как Като, Надь и Вольф, можно найти в *Mathematical Reviews*.

Возвращаясь к теории групп, попытаемся найти связь расщепления λ_j на $\lambda_j + \varepsilon a_1^{(r)}$ и разложения ограничения L^k на подгруппу K. Для простоты мы будем рассматривать только тот случай, когда нет случайных вырождений, т. е. когда для каждого j существует единственное $k = k(j)$, такое, что $\mathcal{H}_{\lambda_j} = \mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ и $P_j = P_{jk} \neq 0$. Поскольку $U_xP_j = P_jU_x$ для всех x, мы сразу найдем, что $U_xP_jW^\varepsilon P_j = P_jW^\varepsilon P_jU_x$ для всех x из K. Таким образом, $W^\varepsilon_{j,k(j)}$ коммутирует с ограничением U на $\mathcal{H}_{\lambda_j} = \mathcal{H}_{k(j)}$ и подгруппу K. Но ограничение U на $\mathcal{H}_{k(j)}$ есть в точности неприводимое представление $L^{k(j)}$ группы G. Ограничение $L^{k(j)}$ на K имеет разложение $L^{k(j)} = \sum\limits_i l(k(j), i)N_i$, где N_i — неприводимые представления подгруппы K и функция кратности $(k, i) \to l(k, i)$ зависит только от K и G. Пусть

$$\mathcal{H}_{\lambda_j} = \mathcal{H}_{k(j)} = \mathcal{H}^{N_1}_{\lambda_j} \oplus \mathcal{H}^{N_2}_{\lambda_j} \oplus \ldots \mathcal{H}^{N_t}_{\lambda_j} \ldots$$

— однозначное разложение $\mathcal{H}_{\lambda_j}$, соответствующее разложению ограничения $L^{k(j)}$ на подгруппу K на примарные компоненты. Тогда $W^\varepsilon_{j,k(j)}$ переводит $\mathcal{H}^{N_i}_{\lambda_j}$ в себя и собственные значения $W^\varepsilon_{j,k(j)}$ в $\mathcal{H}^{(i)}_{\lambda_j}$ имеют кратность, кратную размерности d_i представления N_i.

Если H^ε не имеет случайных вырождений, то $W^\varepsilon_{j,k(j)}$ будет иметь в точности столько различных собственных значений, сколько (не обязательно различных) неприводимых компонент имеет ограничение на K представления $L^{k(j)}$. Каждое из этих собственных значений будет иметь кратность, равную размерности соответствующего N. Таким образом, собственное значение λ_j оператора H^0, соответствующее неприводимому представлению $L^{k(j)}$ группы G, расщепляется при переходе к H^ε на столько значений, сколько неприводимых компонент имеет ограничение $L^{k(j)}$ на K.

В частности, мы видим, что собственные значения оператора H^ε можно снабдить двойным индексом k, i. Первый индекс k указывает, какое неприводимое представление группы G соответствует тому собственному значению H^0, расщеплением которого получено это собственное значение H^ε, второй индекс указывает, какое представление группы K соответствует самому собственному значению H^ε. Индекс i можно применять только тогда, когда ε достаточно мало, так что для любых различных отщепленных собственных значений можно проследить, из каких первоначальных значений они возникли.

Если K коммутативна и $l(k,i)$ принимает значения только 0 и 1, то для заданных k, i и данного собственного значения будет существовать не более чем одномерное собственное подпространство и стационарное состояние системы будет полностью описываться заданием энергии и двух индексов k, i.

3.4 Сферическая симметрия и спин

Рассмотрим каноническое квантование классической системы, состоящей из одной частицы, движущейся в „поле центральных сил“. Гамильтониан такой системы равен

$$\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \mathcal{V}(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}),$$

где $\mathcal{V}$ — действительная функция, задающая потенциальную энергию как функцию расстояния от „центра сил“, m — масса частицы. Если m — масса электрона и $\mathcal{V}(r) = -e^2/r$, где e — заряд электрона, то мы получаем модель Резерфорда для атома водорода (без учета движения значительно более тяжелого ядра). Соответствующий динамический оператор является некоторым самосопряженным расширением формального дифференциального оператора

$$\psi \to -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + \mathcal{V}(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2})\psi,$$

действующего в гильбертовом пространстве $\mathcal{L}^2(E^3)$. Пусть G — группа всех вращений около точки $(0,0,0)$ в E^3. Для каждого вращения $\alpha \in G$ оператор

$$(U_\alpha f)(x,y,z) = f(\alpha^{-1}(x,y,z))$$

будет унитарным оператором в $\mathcal{L}^2(E^3)$, который коммутирует с H, и $\alpha \to U_\alpha$ будет представлением группы G в $\mathcal{L}^2(E^3)$. Таким образом, мы можем применить теорию, развитую в предыдущем разделе, и получить естественное разложение $\mathcal{L}^2(E^3)$ в прямую сумму $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \ldots$, где каждое $\mathcal{H}_j$ инвариантно относительно H и U_α и представление U, ограниченное на $\mathcal{H}_j$, примарно.

Мы можем выбрать обозначения так, чтобы ограничение U на $\mathcal{H}_j$, было прямой суммой представлений D_j размерности $2i+1$, описанных в разд. 3.2. Можно показать, что каждое D_j входит в разложение U с кратностью ∞. Действительно, мы можем рассматривать E^3 как $S^2 \times \mathbb{R}^+$, где S^2 — единичная сфера в E^3, а $\mathbb{R}^+$ — положительная часть действительной оси. Таким образом, $\mathcal{L}^2(E^3)$ естественным образом изоморфно $\mathcal{L}^2(S^2) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$, а U_α имеет вид $U'_\alpha \otimes I_\alpha$, где $\alpha \to I_\alpha$ — единичное представление $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$ и $\alpha \to U'_\alpha$ — представление в $\mathcal{L}^2(S^2)$, индуцированное действием в S^2 группы вращений. Далее, группа вращений действует на S^2 транзитивно, и подгруппа, оставляющая на месте одну точку $(0,0,1)$, является группой K_z всех вращений относительно оси z.

Из общей теоремы теории представлений следует, что U' содержит каждое D_j ровно столько раз, сколько раз ограничение D_j на K_z содержит единичное представление, т. е. один раз. Таким образом, $U' = D_1 \oplus D_2 \oplus D_3 \oplus \ldots$. Пусть $\mathcal{H}'_j$ — однозначно определенное подпространство $\mathcal{L}^2(S^2)$, на котором U' сводится к D_j; тогда $\mathcal{H}_j = \mathcal{H}'_j \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$ и U содержит D_j бесконечно того раз.

Рассмотрим ограничение H на $\mathcal{H}_j$. Поскольку это ограничение H_j коммутирует со всеми U_α, нетрудно доказать, что оно должно иметь вид $I \otimes H'_j$, где H'_j — некоторый самосопряженный оператор в $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$. Непосредственные вычисления показывают, что H'_j представляет собой самосопряженное расширение дифференциального оператора второго порядка

$$\psi \to -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right) - \frac{j(j+1)}{r^2}\psi\right) + \mathcal{V}(r)\psi.$$

Для тех $\mathcal{V}$, которые нас будут интересовать, этот оператор имеет и непрерывный, и точечный спектр, который является *простым*; мы будем интересоваться только точечным спектром.

Обозначим через $\mathcal{H}''_j$ дискретную часть пространства $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$ относительно оператора H'_j, т. е. сумму собственных подпространств оператора H'_j. Тогда $\mathcal{H}'_j$ будет прямой суммой одномерных подпространств, в каждом из которых оператор H'_j постоянен, и поэтому $\mathcal{H}^0_j = \mathcal{H}'_j \otimes \mathcal{H}''_j$ — дискретная часть $\mathcal{H}'_j$ относительно оператора H_j — будет прямой суммой $(2j+1)$-мерных подпространств, в каждом из которых оператор H_j постоянен, а представление U сводится к D_j. В частном случае, когда $\mathcal{V}(r) = -a^2/r$, собственные значения H_j равны

$$-\frac{ma^4}{2\hbar^2(k+j+1)^2},$$

где $k = 0, 1, 2, \ldots$. Здесь k-е собственное значение H_j равно $(k+j-j')$-му собственному значению $H_{j'}$, т. е. имеет место случайное вырождение. Каждое собственное значение соответствует нескольким различным D_j и имеет кратность, равную сумме их размерностей. Принято называть $k+j+1 = n$ *полным* или *главным* квантовым числом собственных векторов с собственным значением $-ma^4/(2\hbar^2n^2)$ (это пространство имеет размерность $1+3+\ldots$). О собственных векторах, лежащих в $\mathcal{H}_j$, говорят, что они имеют *орбитальное* квантовое число j.

Мы рассмотрим только тот случай, когда $\mathcal{V}(r)$ достаточно близко к $-a^2/r$ для некоторого a, так что собственные значения задаются формулой

$$-\frac{ma^4}{2\hbar^2(k+j+1+x_{j,k})^2},$$

где $x_{j,k}$ лежит между 0 и $^1/_2$ и зависит главным образом от j, стремясь к нулю при возрастании j. В этом случае собственные значения, соответствующие некоторому определенному j, можно расположить в порядке возрастания и по аналогии с предыдущим случаем мы будем считать, что собственные векторы, соответствующие k-му собственному значению в этом ряду, имеют главное квантовое число $k+j$ и орбитальное квантовое число j. Множество всех собственных векторов оператора H с главным квантовым числом n и орбитальным квантовым числом j будет тогда $(2j+1)$-мерным подпространством пространства $\mathcal{L}^2(E^3)$.

Главное квантовое число собственного вектора H определяет (приблизительно) энергию соответствующего стационарного состояния. Как обстоит дело с орбитальным квантовым числом ? Определяет ли и оно значение некоторой наблюдаемой ? Мы увидим, что ответ на этот вопрос положителен. Вспомним, что наблюдаемыми моментов импульса являются инфинитезимальные образуюшие однопараметрических групп вращений относительно различных осей, умноженные на $\hbar$. Отсюда следует, что каждая наблюдаемая момента импульса переводит $\mathcal{H}_j$ в себя и коммутирует с H. Далее, квадрат наблюдаемой *полного момента импульса*, т. е. сумма квадратов моментов импульса относительно трех взаимно перпендикулярных осей, коммутирует со всеми U_α и поэтому равен постоянной на каждом неприводимом подпространстве $\mathcal{H}_j$. Эта постоянная может зависеть только от j, и вычисление показывает, что она равна $j(j+1)\hbar^2$. Таким образом, в состоянии с главным квантовым числом n и орбитальным квантовым числом j энергия и полный момент импульса имеют определенные значения с вероятностью 1, причем значение полного момента импульса равно $\hbar\sqrt{j(j+1)}$.

Вырождение, вызванное сферической симметрией, можно устранить, нарушив симметрию. На самом деле достаточно нарушить симметрию хотя бы частично. При изучении атома для этого наиболее удобно поместить атом в однородное магнитное поле; при этом группой симметрии станет подгруппа K группы G, состоящая из всех вращений относительно прямой, проходящей через начало координат и параллельной направлению поля. Поскольку K абелева, она имеет только одно неприводимое представление и соответствующая симметрия не вызывает вырождений. Применяя теорию, развитую в предыдущем разделе, и учитывая, что D_j, ограниченное на K, распадается на $2j+1$ одномерных представлений, мы должны ожидать, что каждое собственное значение, соответствующее состоянию с орбитальным квантовым числом j, распадется на $2j+1$ различных значений, когда сферическая симметрия заменится цилиндрической. Расщепление на отдельные собственные значения, т. е. расщепление спектральных линий в магнитном поле, называется *эффектом Зеемана*.

Если мы выберем определенную ось, например ось z, то ограничение U на K_z и на $(2j+1)$-мерное подпространство всех собственных векторов с основным квантовым числом n и орбитальным квантовым числом вызовет разбиение этого $(2j+1)$-мерного пространства на $2j+1$ одномерных инвариантных подпространств. Векторы, лежащие в одномерном инвариантном подпространстве, на котором ограничение U на K имеет вид $\theta \to e^{im\theta}I$, называют векторами, имеющими *магнитное* квантовое число m. Заданной тройке квантовых чисел соответствует в точности одно стационарное состояние, так что эти тройки могут служить индексами для некоторого базиса собственных векторов дискретной части H. Конечно, эти три квантовых числа не могут принимать произвольные значения независимо друг от друга; имеются следующие ограничения:

$$|m| \leqslant j, \quad j = 0, 1, 2, \ldots, n-1, \quad n = 1, 2, 3, \ldots.$$

Магнитное квантовое число m также имеет непосредственный физический смысл. Нетрудно подсчитать, что состояние с магнитным квантовым числом m — это такое состояние, в котором компонента момента импульса относительно оси z равна $\hbar m$ с вероятностью 1.

Важно отметить, что магнитное квантовое число всегда связано с выбором определенного направления в пространстве. Моменты импульса относительно различных осей не коммутируют друг с другом, и в состоянии с магнитным квантовым числом m, в котором момент импульса относительно некоторой оси имеет определенное значение $\hbar m$, моменты импульса относительно других осей будут обладать дисперсией и будут принимать всевозможные значения с ненулевой вероятностью.

Проведенный выше анализ применим не только к атому водорода, но и к некоторым другим атомам, таким, как атомы лития, натрия и калия; в этих атомах основную роль играет единственный „внешний“ электрон, который можно считать движущимся в сферически симметричном поле. Однако при точном исследовании спектров этих элементов оказывается, что вместо каждого значения энергии, предсказываемого теорией (при $j \neq 0$), на самом деле имеются два очень близких значения. Далее, в магнитном поле это предсказываемое собственное значение должно было бы распадаться на $2j+1$ значений; вместо этого две компоненты собственного значения расщепляются на $2j$ и $2j+2$ значений соответственно. В атоме водорода этот эффект маскируется релятивистским эффектом, который его полностью компенсирует.

Нетрудно модифицировать нашу теорию таким образом, чтобы она давала объяснение этим явлениям. Если мы заменим гильбертово пространство $\mathcal{L}^2(E^3)$ на $\mathcal{L}^2(E^3) \times \mathcal{H}_0$, где $\mathcal{H}_0$ — некоторое гильбертово пространство конечной размерности n, и заменим каждый самосопряженный оператор Q в $\mathcal{L}^2(E^3)$ на $Q \otimes I$, то мы получим квантовую систему, совершенно аналогичную первоначальной; изменение будет состоять только в том, что кратности всех собственных значений умножатся на n, а также в том, что появятся некоторые новые наблюдаемые.

Дополнительное вырождение $H \otimes I$ связано с тем, что $H \otimes I$ коммутирует со всеми операторами вида $I \otimes V$, где V — унитарный оператор в $\mathcal{H}_0$. Если устранить это вырождение „малым возмущением“ оператора $H \otimes I$, то каждое собственное значение $H \otimes I$ распадется на n частей. Для того чтобы получить наблюдаемое расщепление на две части, достаточно взять $n = 2$. Как можно согласовать этот переход от $\mathcal{L}^2(E^3)$ к $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}_0$ с теми соображениями, которые привели нас к каноническому квантованию ? Оглядываясь назад, мы видим, что этот переход находится в противоречии только с одним нашим предположением, которое мы приняли в качестве наиболее простой рабочей гипотезы, а именно с тем, что операторы Q образуют *полное* коммутирующее свойство. Далее, обсуждение этого вопроса на стр. 77 показывает, что переход от $\mathcal{L}^2(E^3)$ к $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}_0$

— единственный путь избавиться от этого предположения, не нарушая коммутационные соотношения Гейзенберга.

Как только мы примем $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}_0$, где $\mathcal{H}_0$ — двумерное гильбертово пространство, в качестве гильбертова пространства нашей системы, у нас возникнет ряд вопросов:

(1) Какой член нужно добавить к $H \otimes I$, чтобы получить динамический оператор новой системы ?

(2) Какой физический смысл имеют наблюдаемые, соответствующие самосопряженным операторам вида $I \otimes T$, где T — самосопряженный оператор в $\mathcal{H}_0$?

(3) Какие изменения нужно внести в нашу теорию симметрий и квантовых чисел, чтобы она была согласована с новым пространством состояний и объясняла замену $2j+1$ на $2j$ и $2j+2$?

Нам будет удобнее ответить на эти вопросы в обратном порядке и начать с некоторых кратких указаний относительно одного обобщения теории представлений групп. Представление U группы всегда определяет некоторый гомоморфизм этой группы в группу автоморфизмов структуры с ортогональным дополнением, которую образуют замкнутые подпространства гильбертова пространства $\mathcal{H}(U)$. Однако обратное не всегда верно, даже если наложить некоторые дополнительные требования непрерывности.

Каждый отдельный автоморфизм порождается некоторым унитарным оператором, но этот оператор определяется единственным образом только с точностью до постоянного множителя, и не всегда можно выбрать эту постоянную одновременно для всех элементов группы так, чтобы $U_{xy} = U_x U_y$. С другой стороны, независимо от того, как выбраны постоянные, мы имеем $U_{xy} = \sigma(x,y) U_x U_y$, где σ — некоторая функция на $G \times G$ со значениями во множестве комплексных чисел, равных по модулю 1. Соответствие $x \to U_x$ называется тогда σ-представлением или *проективным представлением, с мультипликатором* σ. Если мы заменим U_x на $\rho(x) U_x = U'_x$, то $x \to U'_x$ будет σ'-представлением, где

$$\sigma'(x,y) = \frac{\sigma(x,y)\,\rho(xy)}{\rho(x)\,\rho(y)}.$$

Мультипликаторы σ и σ' называются в этом случае подобными. Нетрудно видеть, что классы подобных мультипликаторов образуют группу относительно поточечного умножения. Если эта группа (которую называют группой мультипликаторов) сводится к единичной, то достаточно рассматривать только обычные представления. Как указано на стр. 68, дело обстоит именно так в случае, когда G — действительная прямая.

Однако, когда G — группа вращений E^3, группа множителей содержит один нетривиальный элемент и мы вынуждены рассматривать проективные представления. Очень просто описать все эти представления. Пусть $SU(2)$ — группа всех квадратных унитарных матриц второго порядка с определителем, равным 1, а N — подгруппа, состоящая из двух элементов ее центра:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Нетрудно показать, что $SU(2)/N$ изоморфна группе вращений E^3. Поэтому неприводимые представления D_j определяют неприводимые представления D'_j группы $SU(2)$, которые сводятся к единичному представлению на N.

Пусть L — произвольное неприводимое представление $SU(2)$. Тогда по лемме Шура ограничение L на N должно быть константой, которая, очевидно, равна 1 или -1. Если она равна 1, то L определяет неприводимое представление на $SU(2)/N$ и, следовательно, должно быть одним из D'_j. Если она равна -1, то каждому элементу из $SU(2)/N$ соответствуют два унитарных оператора, отличающихся друг от друга знаком. Считая один из них произвольным (но измеримым), получаем проективное представление группы $SU(2)/N$, мультипликатор которого нетривиален.

Оказывается, что $SU(2)$ имеет одно и только одно такое представление для каждой четной размерности. Мы обозначаем это представление размерности $2m$ через $D'_{m-{}^1\!/_2}$. Таким образом, D'_j определено для $j = 1, {}^3\!/_2, 2, {}^5\!/_2, 3, \ldots$ и всегда имеет размерность $2j+1$. Когда j целое, D'_j определяет представление D_j группы $SU(2)/N$. Когда j полуцелое, D'_j определяет проективное представление $SU(2)/N$, которое мы также обозначим через D_j. Таким способом мы получим все проективные представления $SU(2)/N$. Оказывается, что формула Клебша–Гордана

$$D_j \otimes D_{j'} = D_{|j-j'|} \oplus D_{|j-j'|+1} \oplus \cdots \oplus D_{j+j'}$$

сохраняется независимо от того, являются ли j и j' целыми или полуцелыми, причем прямые суммы и тензорные произведения определяются для проективных представлений очевидным образом. Двумерное представление $D'_{1/2}$ особенно просто описать: это — представление, которое переводит каждую матрицу из $SU(2)$ в себя.

Возвращаясь к нашим вопросам, мы начнем с замены представления $\alpha \to U_\alpha$ некоторым представлением, имеющим в качестве фазового пространства $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}_0$. Более глубокий анализ показал бы, что это представление должно иметь вид $U \otimes L$, где L — некоторое двумерное обычное или проективное представление нашей группы. Группа вращений имеет два таких представления: $D_{1/2}$ и $D_0 \otimes D_0$. Из формулы Клебша–Гордана и наших предыдущих рассуждений следует, что неприводимыми подпредставлениями $U \otimes L$ являются в первом случае $D_{j-1/2}$ и $D_{j+1/2}$, во втором — D_j, где $j = 0, 1, 2, \ldots$. Только первая из этих возможностей согласуется с тем экспериментальным фактом, что уровни энергии распадаются на $2j$ и $2j+2$ части вместо $2j+1$. Таким образом, мы приходим к предположению, что автоморфизм нашей системы, соответствующий вращению α в пространстве, порождается унитарным оператором $U_\alpha \otimes (D_{1/2})_\alpha$, и это предположение объясняет наблюдаемое расщепление уровней энергии.

Замена U на $U \otimes D_{1/2}$ оказывает влияние на наблюдаемые моментов импульса. Ограничение $U \otimes D_{1/2}$ на однопараметрическую подгруппу K вращений вокруг оси z имеет инфинитезимальную образующую вида $i(\Omega^z \otimes I + I \otimes \Omega_0^z)$, где $\hbar\,\Omega^z$ — самосопряженный оператор, соответствующий моменту импульса относительно оси z в нашей простейшей модели, а Ω_0^z — некоторый самосопряженный оператор в двумерном пространстве $\mathcal{H}_0$.

В соответствии с нашим общим принципом мы определяем момент импульса относительно оси z как наблюдаемую, соответствующую оператору $\hbar\,(\Omega^z \otimes I) + \hbar\,(I \otimes \Omega_0^z)$. Он отличается от оператора, получающегося при каноническом квантовании, на член $\hbar\,(I \otimes \Omega_0^z)$, который, как оказывается, имеет собственные значения $\pm{}^1/_2\hbar$. Эта наблюдаемая называется спиновым моментом или спином (относительно оси z). Такое название (от английского spin — вращение) связано с тем, что расщепление спектральных линий на пары в старой квантовой теории „объяснялось“ приписыванием электрону лишней степени свободы — вращения вокруг собственной оси. Хотя электрон, как мы теперь понимаем, слишком мало похож на классическую частицу, чтобы можно было говорить о „настоящем вращении“, физики по-прежнему находят это представление достаточно полезным. С нашей точки зрения, основное содержание гипотезы о спине заключается в существовании дополнительной наблюдаемой типа момента импульса, соответствующей операторам $\hbar\,(I \otimes \Omega_0^a)$, где роль a может играть x, y или z. По очевидным соображениям наблюдаемая, соответствующая члену $\hbar\,(\Omega^z \otimes I)$, называется орбитальным моментом импульса (относительно оси z). Сохраняется, конечно, только полный момент импульса относительно какой-либо оси.

Одним из наиболее интересных свойств операторов, определяющих спин момента импульса, является то, что они коммутируют с операторами, определяющими наблюдаемые координат. Операторы спина не коммутируют друг с другом, но при добавлении любого из них к операторам, определяющим наблюдаемые координат, образуется полное коммутирующее семейство операторов. Более того, ясно, что любой самосопряженный оператор в $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}(D_{1/2})$ получается простой алгебраической комбинацией операторов вида $A \otimes I$, где A — самосопряженный оператор в $\mathcal{L}^2(E^3)$, и операторов спина. Таким образом, все новые наблюдаемые, образовавшиеся в результате перехода от $\mathcal{L}^2(E^3)$ к $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}(D_{1/2})$, появились вследствие существования спина и выражаются через него.

Динамический оператор нашей модифицированной системы можно записать в виде $H \otimes I + J$, где H — динамический оператор, получающийся в результате канонического квантования, а J — так называемое „спиновое возмущение“. Оператор J можно в простой и симметричной форме выразить через классический потенциал $\mathcal{V}$ и наблюдаемые момента импульса следующим образом:

$$J = -\frac{1}{2m^2c^2}\frac{\mathcal{V}'(\sqrt{x^2+y^2+z^2})}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}(\Omega^x \otimes \Omega_0^x + \Omega^y \otimes \Omega_0^y + \Omega^z \otimes \Omega_0^z)$$

где c — скорость света. Как показывает присутствие c, мы не смогли бы объяснить эту формулу теоретически, не привлекая специальной теории относительности, что вывело бы нас за рамки этого курса.

Выясним теперь, как влияет существование спина на задание собственных векторов энергии с помощью квантовых чисел. Спиновое возмущение J настолько мало, что позволяет нам поставить в соответствие каждому собственному вектору $H \otimes I + J$ собственный вектор $H \otimes I$, так что нам нужно перечислить только собственные векторы $H \otimes I$.

Пространство всех собственных векторов H с главным квантовым числом n и орбитальным квантовым числом l имеет размерность $2l+1$ и определяет $2(2l+1)$-мерное подпространство собственных векторов $H \otimes I$. В соответствии с формулой Клебша-Гордана ограничение $U \otimes D_{{}^1/_2}$ на это подпространство является прямой суммой $D_{i-{}^1/_2} \oplus D_{i+{}^1/_2}$. Соответственно наше пространство собственных векторов разлагается в прямую сумму двух пространств размерностей $2l$ и $2l+2$.

Собственные векторы, которые лежат в первой части, имеют главное квантовое число n, орбитальное квантовое число 1, внутреннее квантовое число $j = l - {}^1/_2$ и спиновое квантовое число $s = -{}^1/_2$. Векторы, лежащие во второй части, имеют главное квантовое число n, орбитальное квантовое число l, внутреннее квантовое число $j = l + {}^1/_2$ и спиновое квантовое число $s = {}^1/_2$. Зная любые два из трех квантовых чисел l, j, s, можно определить третье из равенства $j + s = l$. Квантовое число j в отличие от l и s имеет точное значение, не зависящее от предположения, что J мало. Главное квантовое число n определяет собственное значение энергии только с точностью до небольшой поправки, вносимой возмущением J.

Множество всех собственных векторов с данными значениями главного, орбитального и спинового квантовых чисел является $(2j+1)$-мерным пространством, где j — внутреннее квантовое число. Собственные векторы полного момента импульса $\hbar(\Omega^z \otimes I + I \otimes \Omega_0^z)$ относительно оси z образуют естественный базис в этом пространстве, причем соответствующие собственные значения меняются от $-\hbar j$ до $\hbar j$ с интервалом $\hbar$. Если j является полуцелым, то все собственные значения являются полуцелыми кратными $\hbar$. Эти полуцелые множители называются магнитными квантовыми числами m соответствующих векторов и состояний. Имеется в точности одно состояние с заданными главным, внутренним, магнитным и спиновым квантовыми числами n, j, m, s, причем три из них можно выбрать произвольным образом так, чтобы выполнялись следующие условия: $s = \pm{}^1/_2$, $|m| \leqslant j$ и m — полуцелое, $j = {}^1/_2, {}^3/_2, {}^5/_2, \ldots$, n — целое и больше чем $j + s$.

Поскольку основное встречающееся здесь представление группы вращений имеет вид $U \otimes D_{{}^1/_2}$, электрон считается „частицей со спином ${}^1/_2$“. Для других „элементарных частиц“ представление $D_{{}^1/_2}$ может заменяться другими. Если эту роль играет D_j, то говорят о частице со спином j. Фотон, например, имеет спин 1, некоторые мезоны — спин 0.

3.5 Атом с n электронами и принцип Паули

Классическая механическая система, соответствующая модели Резерфорда атома с n электронами, имеет гамильтониан

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{(p_x^j)^2 + (p_y^j)^2 + (p_z^j)^2}{2m} - \sum_{j=1}^{n} \frac{ne^2}{\sqrt{x_j^2 + y_j^2 + z_j^2}} - \sum_{\substack{i,j=1,\\ i \neq j}}^{n} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

(мы по-прежнему пренебрегаем движением ядра). Здесь m и e — масса и заряд электрона соответственно и

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}.$$

При каноническом квантовании этой системы мы получили бы квантовую систему, гильбертовым пространством которой служило бы $\mathcal{L}^2(E^3)$, а динамическим оператором H — некоторое самосопряженное расширение формального дифференциального оператора

$$\psi \to -\frac{\hbar}{2m} \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_j^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_j^2} \right) - \frac{ne^2}{\hbar} \sum_{j=1}^{n} \frac{\psi}{\sqrt{x_j^2 + y_j^2 + z_j^2}} - \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\substack{i,j=1,\\ i \neq j}}^{n} \frac{\psi}{r_{ij}}$$

Положим $H = H_0 + H''$, где H_0 — самосопряженное расширение формального дифференциального оператора, получаемого из H отбрасыванием последнего члена. Мы видим теперь, что если рассматривать $\mathcal{L}^2(E^{3n})$ как $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{L}^2(E^3) \otimes \cdots \otimes \mathcal{L}^2(E^3)$ (n множителей, соответствующих n электронам), то оператор H_0 можно записать в виде

$$H_0 = \sum_{j=1}^{n} I \otimes I \otimes \cdots \otimes H' \otimes I \otimes \cdots \otimes I,$$

j-й множитель где H' — самосопряженное расширение формального дифференциального оператора

$$\psi \to -\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) - \frac{e^2}{\hbar\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\psi$$

в $\mathcal{L}^2(E^3)$. Член H'' описывает взаимодействие электронов и препятствует полному разложению нашей системы в тензорное произведение. Оказывается, однако, что этот член можно аппроксимировать оператором вида

$$\sum_{j=1}^{n}(I \otimes I \otimes \cdots \otimes H''' \otimes \cdots \otimes I),$$

где H''' — оператор $\mathcal{L}^2(E^3)$ вида $\psi \to f(\sqrt{x^2+y^2+z^2})\,\psi$. Таким образом, мы будем считать, что

$$H = \sum_{j=1}^{n}(I \otimes I \otimes \cdots \otimes (H' + H''') \otimes I \otimes \cdots \otimes I) + P,$$

где P — „малое возмущение“.

Мы видели в предыдущем разделе, что канонического квантования недостаточно даже в случае атома с одним электроном, и в соответствии с результатами этого раздела мы сразу же заменим $\mathcal{L}^2(E^3)$ на $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}(D_{1/2})$, а $H' + H'''$ — на $(H' + H''') \otimes (I + J)$, где J — другое малое возмущение. Таким образом, гильбертово пространство нашей системы будет тензорным произведением $2n$ множителей, n из которых бесконечномерны, а другие n имеют размерность 2. Если мы отбросим J и P, то получим систему с большой группой симметрий. Каждая перестановка n символов и каждое множество n вращений E^3 определяет естественным образом унитарный оператор, который коммутирует с невозмущенным динамическим оператором. Как и в разд. 3.4, мы можем описывать стационарные состояния такой системы квантовыми числами.

Действительно, пусть $\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n$ — набор собственных векторов оператора $H' + H'''$, причем φ_k имеет квантовые числа n_k, j_k, m_k, s_k (мы считаем, что в пространстве E^3 выбрана некоторая определенная ось — например, ось z). Тогда $\varphi_1 \otimes \varphi_2 \otimes \varphi_3 \otimes \cdots \otimes \varphi_n$ будет собственным вектором невозмущенного динамического оператора; этот вектор мы можем задавать $4n$ квантовыми числами: $n_1, n_2, \ldots, n_n; j_1, j_2, \ldots, j_n; m_1, m_2, \ldots, m_n; s_1, s_2, \ldots, s_n$. Далее, такие векторы образуют базис дискретной части пространства относительно нашего оператора. Мы предположим, что настоящий динамический оператор настолько близок к невозмущенному, что каждый его собственный вектор соответствует только одному из векторов $\varphi_1 \otimes \varphi_2 \otimes \cdots \otimes \varphi_n$, так что базис собственных векторов этого оператора также описывается множеством $4n$ квантовых чисел. Состояние, соответствующее набору квантовых чисел $n_1, n_2, \ldots, n_n; j_1, j_2, \ldots, j_n; m_1, m_2, \ldots, m_n; s_1, s_2, \ldots, s_n$, можно представить себе как такое, в котором первый электрон находится в состоянии с квантовыми числами n_1, j_1, m_1, s_1, второй — в состоянии с квантовыми числами n_2, j_2, m_2, s_2 и т. д.

При сопоставлении этой теории с данными спектроскопии оказывается, что в ней получается очень много лишних собственных векторов. На самом деле встречаются те и только те из этих векторов, которые лежат в антисимметрическом подпространстве

$$(\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}(D_{1/2}))\ Ⓐ\ (\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}(D_{1/2}))\ Ⓐ \ldots Ⓐ\ (\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}(D_{1/2}))$$

полного тензорного произведения. Для объяснения этого явления приходится вносить еще одну поправку в каноническое квантование: гильбертовым пространством нашей системы должно быть n-кратное антисимметрическое тензорное произведение $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}(D_{1/2})$ на себя, а не полное тензорное произведение; динамическим оператором должно быть ограничение на это антисимметрическое подпространство первоначального динамического оператора. Это существенное уменьшение пространства состояний оказывает сильное влияние на основные наблюдаемые нашей системы: некоторые из них пропадают, другие отождествляются. На этот случай почти дословно переносится все то, что мы говорили на стр. 90–91 о симметрических тензорных произведениях. Электроны, так же как фотоны, имеют гораздо большее сходство с возмущениями в упругой среде, чем с классическими частицами: меняя местами какие-либо два из них, мы не вносим никакого изменения в физическую систему.

В соответствии с терминологией, принятой на стр. 91, электроны являются фермионами. Тот факт, что фотоны являются бозонами и имеют спин 1, а электроны являются фермионами и имеют спин $^1/_2$, оказывается иллюстрацией общего закона: бозоны всегда имеют целый спин, а фермионы — полуцелый.

Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n$ — собственные векторы оператора $H' + H'''$ с квантовыми числами $n_1, n_2, \ldots; j_1, j_2, \ldots; m_1, m_2, \ldots; s_1, s_2, \ldots$. Тогда собственные векторы $\varphi_{i_1} \otimes \varphi_{i_2} \otimes \cdots \otimes \varphi_{i_n}$, где $i_1, i_2, \ldots, i_n$ — произвольная перестановка индексов $1, 2, \ldots, n$, соответствуют одному и тому же собственному значению невозмущенного динамического оператора в полном тензорном произведении. Далее, нетрудно показать, что множество всех линейных комбинаций векторов $\varphi_{i_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{i_n}$ пересекается с антисимметрическим тензорным произведением n пространств $\mathcal{L}^2(E^3) \otimes \mathcal{H}(D_{1/2})$ по пространству размерности не больше 1, причем это пересечение имеет размерность 1 тогда и только тогда, когда φ_i линейно независимы.

Отсюда следует, что если все n четверок квантовых чисел $n_1, j_1, m_1, s_1; n_2, j_2, m_2, s_2; \ldots$ различны, то существует в точности одно стационарное состояние, соответствующее этому набору квантовых чисел; это состояние не зависит от того, в каком порядке стоят четверки квантовых чисел. Если же хотя бы две из этих четверок равны, то соответствующего состояния не существует вовсе. Тот факт, что не существует стационарного состояния, в котором два или большее число электронов имеют одинаковые квантовые числа, называется принципом Паули. Он был сформулирован до открытия квантовой механики в терминах старой квантовой теории.

После указанных выше исправлений каноническое квантование атома Резерфорда дает математическую модель атомных явлений, которая чрезвычайно успешно объясняет и предсказывает результаты спектроскопических измерений и химических опытов. Оказывается возможным, по крайней мере в принципе, свести всю химию к чисто математическим задачам. К сожалению, эти задачи, как правило, настолько сложны, что даже с помощью современных вычислительных машин мы не в состоянии заменить химика-экспериментатора. Далее, полученная модель является только приблизительной (правда, в обычных условиях это приближение вполне достаточно), поскольку она не принимает во внимание эффектов, связанных с теорией относительности. Когда энергии настолько велики, что релятивистские эффекты играют важную роль, приходится строить новую, более тонкую теорию, которая разработана пока только частично и еще очень несовершенна.

Во многих случаях квантовая механика атома позволяет получить сравнительно простую качественную картину химических явлений, в то время как точное количественное описание их чрезвычайно сложно или вообще невозможно. В качестве одного примера мы в заключение коротко расскажем о том, как квантовая механика объясняет существование периодической системы элементов. Читатель увидит, что исправления нашей системы, связанные со спином и с принципом Паули, играют при этом важную роль. Не только данные спектроскопии, но и химические свойства элементов были бы совершенно другими, если бы каноническое квантование было непосредственно применимо к атому Резерфорда.

Если бы не принцип Паули, то наиболее устойчивым стационарным состоянием атома было бы такое, в котором каждый электрон находится в состоянии с главным квантовым числом 1. Поэтому следовало бы ожидать постепенного более или менее монотонного изменения свойств атома с возрастанием числа электронов, а не периодического изменения, которое наблюдается на самом деле. Однако в силу принципа Паули в состоянии с главным квантовым числом 1 может находиться не более двух электронов: когда $n = 1, l = m = 0$ и s может принимать только два значения $\pm^1/_2$. Поэтому, когда мы переходим к атому лития с тремя электронами, хотя бы один электрон должен находиться в состоянии с $n = 2$. Возможно всего 8 электронов с $n = 2$: может быть $l = 0$, $m = 0$, $s = \pm 1/2$ или $l = 1$, $m = -1, 0, 1$, $s = \pm 1/2$; таким образом имеются 2 электрона с $l = 0$ и 6 с $l = 1$. Когда мы перейдем к натрию, атому с 11 электронами, один из них должен будет находиться в состоянии с $n = 3$.

Так продолжается и далее. Существует всего

$$2(2 \cdot 0 + 1) + 2(2 \cdot 1 + 1) + \ldots + 2(2(n-1) + 1) = 2(1 + 3 + 5 + \ldots) = 2n$$

различных множеств квантовых чисел, если главное квантовое число равно n. Поэтому вплоть до атома с $2 + 8 + 18 + 1 = 29$ электронами — атома меди — не должно быть атомов, в которых один из электронов вынужден перейти в состояние с $n = 4$. На самом деле, однако, взаимодействие электронов изменяет собственные значения энергии настолько, что большему главному квантовому числу не всегда соответствует более высокий уровень энергии. Как показывает более тщательный анализ, действительный порядок будет таков: 1–0, 2–0, 2–1, 3–0, 3–1, 4–0, 3–2, 4–1, 5–0, 4–2, 5–1, 6–0, 4–3, 5–2, 6–1, 7–0, 6–2 (здесь первое число равно n, а второе равно l). Вообще, когда собственные значения энергии для двух n близко друг к другу, соответствующие состояния могут заполняться в обратном порядке. Приводимая ниже таблица показывает, сколько электронов каждого типа (т. е. с данными n и l) имеется в атомах, начиная с 18-го и кончая 30-м.

После цинка заполнение шести состояний типа 4–1 дает последовательно атомы галлия, германия, мышьяка, селена, брома и криптона. Заполнение состояний 5–0, 4–2 и 5–1 продолжается точно так же, как 4–0, 3–2 и 4–1, и дает новую серию из 18 элементов, начинающуюся с активного металла и заканчивающуюся инертным газом. Только переходя к атому с 58 электронами, мы получаем электрон с $l = 3$. Имеется 14 состояний типа 4–3, и элементы, внешние электроны атомов которых находятся в этих состояниях, называются редкоземельными. Они представляют некоторую аномалию, поскольку к тому времени, когда электроны дойдут до состояния 5–3, ядра станут слишком велики, чтобы быть устойчивыми.

Таблица 1.

Число электронов в различных состояниях

		Состояние электрона								
N	Название	1–0	2–0	2–1	3–0	3–1	4–0	3–2	4–1	5–0
18	Аргон	2	2	6	2	6	–	–	–	–
19	Калий	2	2	6	2	6	1	–	–	–
20	Кальций	2	2	6	2	6	2	–	–	–
21	Скандий	2	2	6	2	6	2	1	–	–
22	Титан	2	2	6	2	6	2	2	–	–
23	Ванадий	2	2	6	2	6	2	3	–	–
24	Хром	2	2	6	2	6	1	5	–	–
25	Марганец	2	2	6	2	6	2	5	–	–
26	Железо	2	2	6	2	6	2	6	–	–
27	Кобальт	2	2	6	2	6	2	7	–	–
28	Никель	2	2	6	2	6	2	8	–	–
29	Медь	2	2	6	2	6	1	10	–	–
30	Цинк	2	2	6	2	3	2	10	–	–

Атомы, в которых прибавляется первый электрон с новым основным числом, имеют аналогичные свойства. Это атомы водорода и активных щелочных металлов. Те атомы, которые имеют на один электрон меньше, являются инертными газами. Аналогично обстоит дело с другими элементами, где, впрочем, периодичность проявляется не столь явно. Длина периодов, конечно, меняется. Первый период имеет длину 2, следующие два — длину 8, следующие два — 18 и последний полный период — длину 32. Первый и второй элементы первого периода подобны первым и последним элементам следующих двух периодов соответственно. Первые два и последние шесть элементов из периодов длины 8 подобны соответственно первым двум и последним шести элементам периодов длины 18, Наконец, если исключить редкоземельные элементы, то остающиеся элементы периода длины 32 подобны элементам периодов длины 18.

Мы не объяснили, конечно, почему из периодичности квантовых чисел должна следовать периодичность химических свойств. Для этого нам потребовалось бы построить квантовую теорию химических реакций, что не входило в наши планы.

ПРИЛОЖЕНИЕ.

1. Высшие правила отбора. Возрастающий интерес к этому вопросу побуждает нас остановиться на нем несколько подробнее, не ограничиваясь кратким замечанием сделанным на стр. 61. Мы видели, что квантовая механика в ее классической форме, идущей от фон Неймана является следствием семи более или менее естественных аксиом (1–6 и 8) и одной более или менее произвольной аксиомы 7. Аргументы, которые приводились для оправдания этой аксиомы 7, вполне позволяли нам принять ее в более общем виде.

Было бы интересно посмотреть, как изменится теория фон Неймана, если ослабить аксиому 7, предположив, что логика может иметь нетривиальный центр. Для всех систем, удовлетворяющих аксиомам 1–6, центр логики является σ-полной булевой алгеброй, и простейшим случаем (кроме тривиального) является тот, когда эта алгебра дискретна, т. е. когда каждый элемент алгебры является объединением минимальных элементов. При этом минимальные элементы определяются однозначно и вся логика в целом однозначно представляется в виде прямой суммы своих компонент, имеющих тривиальные центры. Таким образом, естественное небольшое ослабление аксиомы 7 состоит в следующем.

Аксиома 7'. *Логика $\mathcal{L}$ системы имеет дискретный центр, и каждая компонента центрального разложения изоморфна структуре замкнутых подпространств сепарабельного бесконечномерного гильбертова пространства.*

Пусть $\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_2 \oplus \ldots$ — такое разложение и $\mathcal{H}_j$ — гильбертово пространство, соответствующее $\mathcal{L}_j$. Положим $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \ldots$; тогда $\mathcal{L}$ изоморфна подструктуре $\mathcal{L}_0$ структуры всех замкнутых подпространств $\mathcal{H}$, замкнутое подпространство $M \subseteq \mathcal{H}$ принадлежит $\mathcal{L}_0$ тогда и только тогда, когда M является замкнутой линейной оболочкой подпространств $M_1, M_2, \ldots$, где $M_j \subseteq \mathcal{H}_j$. Пусть α — вероятностная мера на $\mathcal{L}$ и α'_j — ее ограничение на $\mathcal{L}_j$. Тогда $\alpha'_j = \gamma_j\,\alpha_j$, где $\gamma_j > 0$, $\sum\limits_{j=1}^{\infty} \gamma_j = 1$ — вероятностная мера на $\mathcal{L}_j$. Обратно, если α_j — вероятностная мера на $\mathcal{L}_j$, где $j = 1, 2, \ldots$, и γ_j — неотрицательные действительные числа с суммой 1, то существует единственная вероятностная мера α на $\mathcal{L}$, такая, что

$$\alpha(M_1, M_2, \ldots) = \gamma_1\,\alpha_1 + \gamma_2\,\alpha_2 + \ldots$$

Соображения, аналогичные приведенным на стр. 62 и использующие аксиому 8 и теорему Глисона, сразу же приводят к заключению, что каждая вероятностная мера на $\mathcal{L}$ определяет некоторое состояние.

Ясно, что мера α может определять чистое состояние только в том случае, когда $\alpha(\mathcal{H}_j) = 0$ для всех j, кроме одного. Таким образом, наиболее общее чистое состояние мы получим, выбирая произвольный единичный вектор φ в некотором $\mathcal{H}_j$ и полагая

$$\alpha(M_1, M_2, \ldots) = (P_{M_j}(\varphi)|\varphi),$$

где P_{M_j} — проектор на M_j. Соображения, приведенные на стр. 63, позволяют нам, как и прежде, отождествлять наблюдаемые с самосопряженными операторами в $\mathcal{H}$. Однако теперь наблюдаемую определяет уже не любой самосопряженный оператор A в $\mathcal{H}$, а только такой, у которого все операторы P^A_E, входящие в его спектральное разложение, являются проекторами на элементы $\mathcal{L}_0$. Это имеет место в том и только в том случае, когда A переводит каждое $\mathcal{H}_j$, в себя. Итак, мы имеем в точности ту же ситуацию, которая описана на стр. 63: чистые состояния соответствуют единичным векторам в некотором гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, а наблюдаемые — самосопряженным операторам в $\mathcal{H}$. Однако теперь встречаются уже не все единичные векторы и не все самосопряженные операторы. Вектор φ встречается только в том случае, когда он лежит в одном из замкнутых подпространств $\mathcal{H}_j$, а самосопряженный оператор A встречается в том и только в том случае, когда $A(\mathcal{H}_j) \subseteq \mathcal{H}_j$, для всех j. По терминологии Уайтмена, Вика и Вигнера [Wightman, Wick, Wigner, *Phys. Rev.*. **88** (1952), 101-105] между $\mathcal{H}_j$ и $\mathcal{H}_k$ при $j \neq k$ действуют „высшие правила отбора“. В только что упомянутой статье приводятся физические подтверждения того, что эти высшие правила отбора должны существовать. Эквивалентность факта существования высших правил отбора и замены аксиомы 7 аксиомой 7' независимо заметил Генри Митчел.

Эквивалентная формулировка аксиомы 7' звучит следующим образом: логика $\mathcal{L}$ эквивалентна структуре всех замкнутых подпространств гильбертова пространства $\mathcal{H}$, проекторы на которые принадлежат некоторой алгебре фон Неймана, имеющей дискретный центр и не содержащей конечных компонент. Если мы отбросим ограничения на алгебру фон Неймана, то придем к новому ослаблению аксиомы 7, при котором центр $\mathcal{L}$ уже не обязан быть дискретным и допускает „бесконечно малые“ компоненты в центральном разложении; в этом случае логика $\mathcal{L}$ изоморфна множеству всех проекторов в факторе фон Неймана — Мюррея типа II или III. Мы не будем пытаться дать полный анализ этого более общего случая, а ограничимся только двумя замечаниями; 1) если центр имеет недискретную часть, то чистые состояния не могут существовать; 2) если центр недискретен, то могут существовать однопараметрические группы автоморфизмов, которые эффективно действуют на центре; инфинитезимальные образующие таких групп не соответствуют никаким наблюдаемым.

Обсуждение высших правил отбора и близких вопросов с несколько иной точки зрения читатель найдет в работах швейцарских ученых [Lauch, *Helv. Phys. Acta*, **33** (1960), 711–726; Lauch, Misra, там же, **34** (1961), 669–709].

2. Дополнительные библиографические указания. Читатель найдет подробное систематическое изложение теории бесконечно дифференцируемых многообразий в книгах Ленга [Lang S., Introduction to differentiable manifolds, Wiley-Interscience, New York, 1962] и Хелгасона [Helgason S., Differential geometry and symmetric spaces Academic, Press New York, 1962; русский перевод: Хелгасон С., Дифференциальная геометрия и симметрические пространства, изд-во „Мир“, М., 1964].

Идея использования теории информации для объяснения роли канонических состояний Гиббса (разд. 1.5) возникла у автора независимо, но впервые появилась в литературе, по-видимому, у Джейнеса [Jaynes E. T., *Phys. Rev.*, **106** (1957), 620-630].

Вопрос о разложении в прямой интеграл, поднятый на стр. 60, был изучен Арланом Ремси в его гарвардской диссертации. По-видимому, получить здесь достаточно общий результат будет значительно сложнее, чем предполагал автор, когда писал эту страницу.

Утверждение относительно вопросов, допускающих одновременные ответы, сделанное на стр. 60, было доказано Варадараджаном [Varadarajan V. S., *Comm. Pure Appl. Math.*, **16** (1962), 189-217]. Доказательство облечено в достаточно изящную форму „некоммутативной теории вероятностей“ и ее связей с квантовой механикой.

Понятие „естественного гильбертова пространства“, использованное в разд. 2.6 для обобщенных координат, было, по-видимому, впервые опубликовано Шварцем Schwartz L., Publications de l'Institute Statistique Univ. Paris, **6** (1957), 241-256], который также ввел естественные пространства L^p. Автор пришел к этому понятию независимо, и оно встречалось в неопубликованном варианте этих заметок 1956 г.

Другие подходы к квантованию в обобщенных координатах можно найти в следующей литературе:

1. Brillouin L., Les tenseurs en mechanique et en elasticité Chap. IX, Dover, New York, 1946.
2. de Witt B. S., *Phys. Rev.*, **85** (1952), 653–661
3. Segal I. E., *J. Math. Phys.*, **1** (1960), 468–488

Страницы 171–175, где идет речь о бесконечномерных линейных системах, были написаны под сильным влиянием статьи Кука [Cook J. M., *Trans. Amer. Math. Soc.*, **74** (1953), 222-245]. Развитие этой темы и дальнейшие ссылки можно найти в книге Сигала [Segal I. E., Mathematical problems of relativistic physics, American Mathematical Society, 1963; готовится к печати русский перевод].

Оглавление