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

$$\|c_1 P_{E_1}(\varphi) + \ldots + c_S P_{E_S}(\varphi)\|^2 = \sum_{i,j} c_i \overline{c}_j \left(P_{E_i}(\varphi)|P_{E_j}(\varphi)\right) = \sum_{i,j} c_i \overline{c}_j \left(P_{E_i\cap E_j}(\varphi)|\varphi\right) =$$

$$= \sum_j |c_j|^2 \left(P_{E_j}(\varphi)|\varphi\right) = \sum_j |c_j|^2 \mu(E_j) = \int\limits_{\mathcal{M}} \left|c_1\chi_{E_1} + \ldots + c_S\chi_{E_S}\right|^2 d\mu.$$

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 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

[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.

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

$$(q_1, \ldots, q_{3n}) \to (q_1, \ldots, q_{j-1}, q_j - a, q_{j+1}, \ldots, q_{3n})$$

в конфигурационном пространстве. Но эта группа индуцирует группу унитарных преобразований W_a^j в $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \mu)$:

$$W_a^j\, \psi(q_1, \ldots, q_{3n}) = \psi(q_1, \ldots, q_{j-1}, q_j - a, q_{j+1}, \ldots, q_{3n}).$$

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 $q_1, \ldots, q_{3n}$, 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

[9]) Последнее утверждение не всегда верно, см. примечание на стр. 10. — *Прим. ред.*

$-(1/c_j)\partial Y/\partial q_j$ (поскольку $\dot{Q}_j$ коммутирует с H_T). Это означает, что в любом „достаточно гладком“ состоянии ψ справедливо равенство

$$\frac{d^2}{dt^2}\big(Q_j(\psi)|\psi\big) = -\frac{1}{c_j}\left(\frac{\partial Y}{\partial q_j}\psi\,\middle|\,\psi\right).$$

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 $(Q_1(\psi)|\psi)$, $\ldots$, $(Q_{3n}(\psi)|\psi)$. 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

$$c_j\frac{d^2q_j}{dt^2} = -\frac{\partial Y}{\partial q_j},$$

т. е. классическую систему с массами $c_1,\ldots,c_{3n}$ и потенциальной энергией Y. Однако наши уравнения можно также записать в виде

$$c_j\hbar\,\frac{d^2q_j}{dt^2} = -\hbar\,\frac{\partial Y}{\partial q_j},$$

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

$$\dot{Q}_j = i(HQ_j - Q_jH) = -\frac{i\hbar}{m_j}\frac{\partial}{\partial q_j} = \frac{\hbar}{im_j}\frac{\partial}{\partial q_j}.$$

[10]) Kato T., Trans. Amer. Mat. Soc., **70** (1951), 195.

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 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):

$$\begin{aligned} &Q_jQ_k - Q_kQ_j = P_jP_k - P_kP_j = 0,\\ &Q_jP_k - P_kQ_j = i\hbar\,\delta_j^k. \end{aligned}$$

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 $\mathcal{L}^2(E^{3n})$

[11]) Доказательство, приведенное фон Нейманом, см. в *Annals of Math.*, **33** (1932), 567.

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

$$\int\limits_E \cdots \int \rho(q_1, \ldots, q_{3n})\, dq_1, \ldots, dq_{3n}$$

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 очевиден. Предполагая, что ψ достаточное число раз дифференцируема, вычислим среднее значение j-й компоненты импульса, т. е. $P_j(\psi|\psi)$. Оно равно

$$\begin{aligned}\frac{\hbar}{i}\int\cdots\int \frac{\partial\psi}{\partial q_j}\,\overline{\psi}\,dq_1,\ldots,dq_{3n} &= \frac{\hbar}{i}\int\cdots\int \frac{\partial}{\partial q_j}\left(\sqrt{\rho}\,e^{iS}\right)\cdot\sqrt{\rho}\,e^{-iS}\,dq_1,\ldots,dq_{3n} = \\ &= \frac{\hbar}{i}\int\cdots\int\left(\sqrt{\rho}\,\frac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial q_j}\right)dq_1,\ldots,dq_{3n} + \frac{\hbar}{i}\int\cdots\int \rho i\frac{\partial S}{\partial q_j}\,dq_1,\ldots,dq_{3n} = \\ &= \frac{\hbar}{i}\int\cdots\int\frac{1}{2}\frac{\partial\rho}{\partial q_j}\,dq_1,\ldots,dq_{3n} + \frac{\hbar}{i}\int\cdots\int\rho i\frac{\partial S}{\partial q_j}\,dq_1,\ldots,dq_{3n}.\end{aligned}$$

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.