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 $\mathrm{g} = T_{\alpha_1\alpha_2}f$, где $f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha_1)$, $\mathrm{g} \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M}, \alpha_1)$ то $(|f|^2\alpha_1, f/|f|) = (|\mathrm{g}|^2\alpha_2, \mathrm{g}/|\mathrm{g}|)$, поскольку $\mathrm{g} = \sqrt{d\alpha_1/d\alpha_2}\, f$. 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.

$$\sigma = \frac{d}{dt}\sqrt{\frac{dV_{t^\alpha}}{d\alpha}}\Bigg|_{t=0}.$$

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“ на-

блюдаемыми $\cos\theta$ 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 $i(HQ_f - Q_fH)$.

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.

[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.*