

таких, что $\psi_n = 0$ для достаточно больших n и $\psi_n \in \bigotimes_{k=1}^n D$ для каждого n . Множество D_A плотно в $\mathcal{F}(\mathcal{H})$, так как D плотно в \mathcal{H} . Положим $A^{(0)} = 0$ и $d\Gamma(A) = \sum_{n=0}^{\infty} A^{(n)}$. Оператор $d\Gamma(A)$ имеет смысл на D_A и, как легко видеть, симметричен. По теореме VIII.33, $A^{(n)}$ в существенном самосопряжен на $\bigotimes_{k=1}^n D$. Таким образом,

$A^{(n)} + \mu i$ имеет плотную область значений на $\bigotimes_{k=1}^n D$, если $\mu \in \mathbb{R}$ и $\mu \neq 0$. Отсюда немедленно следует, что $d\Gamma(A) \pm i$ имеет плотную область значений на D_A . Итак, $d\Gamma(A)$ в существенном самосопряжен на D_A . Если A — квантовомеханический оператор, соответствующий энергии свободной частицы, то $d\Gamma(A)$ называется *вторично квантованным* оператором энергии свободной частицы. Он коммутирует с проекторами на симметричное и антисимметричное пространства Фока, откуда следует, что $d\Gamma(A) \upharpoonright \mathcal{F}_s(\mathcal{H})$ и $d\Gamma(A) \upharpoonright \mathcal{F}_a(\mathcal{H})$ в существенном самосопряжены на $D \cap \mathcal{F}_s(\mathcal{H})$ и $D \cap \mathcal{F}_a(\mathcal{H})$ соответственно.

Часть (b) теоремы VIII.33 выполняется и в том случае, когда A_1, \dots, A_N — произвольные ограниченные операторы. По техническим причинам мы отложим доказательство до гл. XIII, где обсудим также некоторые случаи, когда A_1, \dots, A_N не ограничены и не самосопряжены.

VIII.11. Три математические проблемы квантовой механики

В этом небольшом разделе мы хотим кратко описать математическую модель квантовой механики и три возникающие здесь математические проблемы.

В Замечаниях мы обсудим возможности «вывода» этой модели из различных аксиоматических схем.

Квантовомеханические системы описываются операторами и векторами в сепарабельных гильбертовых пространствах \mathcal{H} . Каждому вектору единичной длины из \mathcal{H} отвечает некоторое физическое состояние. Два таких вектора соответствуют одному и тому же состоянию тогда и только тогда, когда они отличаются лишь комплексным множителем, равным по модулю единице. Каждой наблюдаемой сопоставляется самосопряженный оператор A в \mathcal{H} . Если система находится в состоянии φ и мы измеряем наблюдаемую, соответствующую A , то распределение вероятности результатов измерения описывается величиной $d(\varphi, P_\lambda \varphi)$, где P_λ — проекторнозначная мера, ассоциированная с A . Иными

словами, вероятность того, что результат измерения лежит в интервале $[a, b]$, $a, b \in \mathbb{R}$, равна $(\varphi, P_{[a, b]}\varphi)$. Динамика этой системы задается непрерывной однопараметрической группой унитарных операторов $U(t)$. Если система находится в состоянии φ в момент $t=0$, то при $t=t_0$ она будет в состоянии $U(t_0)\varphi$. Для большинства систем существует особенно удобная реализация \mathcal{H} в виде пространства $L^2(M, d\mu)$ и простое соответствие между классическими наблюдаемыми и их квантовомеханическими аналогами — самосопряженными операторами в $L^2(M, d\mu)$ (см. пример ниже).

Особый интерес представляет самосопряженный генератор H группы $U(t)$. Он называется гамильтонианом и соответствует классической наблюдаемой «энергия». Векторы $\varphi \in D(H)$ удовлетворяют уравнению

$$\frac{d}{dt}[U(t)\varphi] = iH[U(t)\varphi],$$

которое называется уравнением Шредингера. Представляет интерес точечный спектр H , поскольку соответствующие собственные функции суть стационарные состояния системы. Типичный отклик системы на внешнее возбуждение — переход из одного стационарного состояния в другое с испусканием света, частота которого пропорциональна разности между соответствующими точками спектра.

Имеются три общих математических проблемы, возникающих в любой квантовомеханической модели.

(1) *Самосопряженность*. В большинстве случаев физические соображения диктуют формальное выражение для гамильтониана и других наблюдаемых как операторов на некоторой реализации \mathcal{H} в виде $L^2(M, d\mu)$. Мы говорим «формальное», потому что области определения не устанавливаются. Обычно нетрудно найти область, на которой данное формальное выражение есть корректно определенный симметрический оператор. Первая математическая проблема — доказать самосопряженность в существенном, или, если оператор не обладает этим свойством, исследовать различные самосопряженные расширения и выбрать «правильную» наблюдаемую.

(2) *Спектральный анализ*. Вторая проблема — исследовать спектры наблюдаемых (в частности, гамильтониана) и оценить местоположение и кратности точечных спектров.

(3) *Теория рассеяния*. Третья проблема — описать каким-нибудь способом поведение системы при больших t .

Разработке и применению техники решения этих проблем посвящена большая часть томов II и III. Самосопряженность изу-

чается в гл. X, спектральный анализ в гл. XI и XIII, а теория рассеяния в гл. XII.

Мы не утверждаем, что все интересные математические задачи, возникающие в квантовой механике, относятся к одному из трех перечисленных типов, отнюдь нет. Но это три центральные проблемы в строгом математическом описании квантовой механики.

Пример (n -электронный атом). Опишем кратко приближенную модель n -электронного атома. Классическая энергия n электронов равна

$$h = \sum_{k=1}^n \frac{(p_x^k)^2 + (p_y^k)^2 + (p_z^k)^2}{2m} - \sum_{k=1}^n \frac{ne^2}{|r_k|} + \sum_{\substack{k, l=1 \\ k \neq l}}^n \frac{e^2}{|r_k - r_l|},$$

где p_x^k, p_y^k, p_z^k суть x, y, z -компоненты импульса k -го электрона, $r_k = \langle x_k, y_k, z_k \rangle$ — его координаты, m и e — масса и заряд. Член $-ne^2/|r_k|$ — потенциальная энергия k -го электрона, обусловленная притяжением протонов ядра; член $e^2/|r_k - r_l|$ — вклад в потенциальную энергию, обусловленный отталкиванием между k -м и l -м электронами.

В качестве гильбертова пространства возьмем $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^{3n})$ и установим следующее соответствие между классическими наблюдаемыми и операторами в \mathcal{H} (мы выбираем систему единиц, в которой \hbar равна единице):

$$p_x^k \rightarrow \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad p_y^k \rightarrow \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial y_k}, \quad p_z^k \rightarrow \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z_k};$$

x_k, y_k, z_k соответствуют умножению на x_k, y_k, z_k ;

$$h \rightarrow H = - \sum_{k=1}^n \frac{1}{2m} \Delta_k + V(r_1, \dots, r_n),$$

где

$$\Delta_k = \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2},$$

а V обозначает оператор, действующий как умножение на функцию

$$- \sum_{k=1}^n \frac{ne^2}{|r_k|} + \sum_{\substack{k, l=1 \\ k \neq l}}^n \frac{e^2}{|r_k - r_l|}.$$

Все эти операторы в существенном самосопряжены на $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{3n})$, хотя доказательство для H вовсе не очевидно (см. § X.2). Динамика определяется унитарной группой $U(t) = e^{-iHt}$.

Если $\varphi \in \mathcal{H}$, $\|\varphi\| = 1$ — состояние системы при $t = 0$, то

$$\int_{x_k=a}^b \int_{R^{3n-1}} |\varphi(x_1, \dots, z_n)|^2 dx_1 \dots dz_n$$

— вероятность того, что при $t = 0$ x -координата k -й частицы лежит в интервале (a, b) , а

$$\int_{x_k=a}^b \int_{R^{3n-1}} |(U(t_0)\varphi)(x_1, \dots, z_n)|^2 dx_1 \dots dz_n$$

— та же вероятность, но при $t = t_0$. Очевидно, что спектральный анализ H и поведение e^{-itH} при больших t — сложные математические проблемы.

Отметим, что эта модель — довольно грубое приближение n -электронного атома в силу ряда причин. Мы не учли спин электронов и принцип запрета Паули. Мы не учли также движение ядра, считая его неподвижным. И наконец, эта модель нерелятивистская.

ЗАМЕЧАНИЯ

§ VIII.1. Развитие теории неограниченных операторов стимулировалось попытками строгого математического обоснования квантовой механики, которые предпринимались в конце 20-х годов. Систематическое изложение теории принадлежит фон Нейману (von Neumann, Allgemeine Eigenwerttheorie Hermiteischer Funktionaloperatoren, *Math. Ann.*; 102 (1929—1930), 49—131) и Стоуну (M. Stone, Linear Transformations in Hilbert Spaces and their Applications to Analysis, Amer. Math. Soc. Colloq. Publ. 15, New York, 1932). Техника применения графиков для анализа неограниченных операторов была развита фон Нейманом (von Neumann, Über Adjungierte Funktionaloperatoren, *Ann. Math.* (2), 33 (1936), 294—310).

Функция на $[a, b] \subset \mathbb{R}$ называется *абсолютно непрерывной*, если для любого заданного $\varepsilon > 0$ существует такое $\delta > 0$, что

$$\sum_{i=1}^n |f(x'_i) - f(x_i)| < \varepsilon$$

для любого конечного набора интервалов $[x_i, x'_i]$, удовлетворяющих условию

$$\sum_{i=1}^n |x'_i - x_i| < \delta.$$

Для таких функций справедлива *основная теорема анализа*:

Если f абсолютно непрерывна на $[a, b]$, то f почти всюду дифференцируема, $f'(x) \in L^1[a, b]$ и f — неопределенный интеграл от $f'(x)$. Обратно, если $g(x) \in L^1[a, b]$, то неопределенный интеграл $G(x)$ от $g(x)$ абсолютно непрерывен и $G'(x) = g(x)$ почти всюду.