X. САМОСОПРЯЖЕННОСТЬ И СУЩЕСТВОВАНИЕ ДИНАМИКИ

Мы привыкли считать, что когда нечто изменяется, оно находится в состоянии изменения, а когда нечто движется, оно пребывает в состоянии движения. Теперь нам известно, что это не так.

Б. РАССЕЛ

X.1. Расширения симметрических операторов

Мы начинаем эту главу с изучения симметрических операторов и их расширений. Прежде всего мы хотим ответить на два вопроса: когда симметрические операторы обладают самосопряженными расширениями, и если такие расширения есть, то как их охарактеризовать? На эти вопросы отвечает развитая фон Нейманом теория индексов дефекта, которую мы будем строить с использованием многих технических приемов, уже применявшихся при доказательстве основного критерия самосопряженности (теорема VIII.3) в гл. VIII.

Начать полезно с объяснения того, почему нас интересуют симметрические несамосопряженные операторы. Очень часто в квантовой механике или квантовой теории поля физические соображения приводят к формальному выражению для гамильтониана системы, которое обычно представляет собой дифференциальный оператор в подходящем L^2-пространстве. Мы говорим «формальному» в том случае, когда область определения гамильтониана не задана точно. Обычно легко найти плотную область, на которой формальный гамильтониан задает корректно определенный симметрический оператор H. Но квантовая динамика должна задаваться унитарной группой, а из теоремы Стоуна (теорема VIII.8) известно, что инфинитезимальный генератор такой группы должен быть самосопряженным. Если замыкание $\overline{H}$ оператора H самосопряжено, то можно использовать $\overline{H}$. Но если $\overline{H}$ не самосопряжено, то естественно спросить: имеет ли $\overline{H}$ самосопряженные расширения? И если таких расширений несколько, то какое из них надо выбрать для описания динамики? В случае, когда самосопряженных расширений существует несколько, они обычно отвечают различному *физическому поведению* описываемой системы. И потому задача выбора «правильного» самосопряженного расширения — это не просто вопрос математической «техники», но проблема, тесно связанная с физикой описываемых явлений. Дальнейшее обсуждение этой проблемы проводится в примерах 1 и 2 этого раздела.

Отметим, что в этом разделе обсуждаются расширения *замкнутых* симметрических операторов. Это не приводит к потере общности, поскольку любой симметрический оператор имеет замыкание, а оператор и его замыкание имеют одни и те же замкнутые расширения.

Теорема X.1. Пусть A — замкнутый симметрический оператор в гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$. Тогда

(1a) Величина $\dim[\operatorname{Ker}(\lambda I - A^*)]$ постоянна при изменении λ в открытой верхней полуплоскости.

(1b) Величина $\dim[\operatorname{Ker}(\lambda I - A^*)]$ постоянна при изменении λ в открытой нижней полуплоскости.

(2) Спектр A заполняет *одно* из следующих множеств в $\mathbb{C}$:
   (a) замкнутую верхнюю полуплоскость;
   (b) замкнутую нижнюю полуплоскость;
   (c) всю плоскость;
   (d) подмножество вещественной оси.

(3) Оператор A самосопряжен тогда и только тогда, когда реализуется случай (2d).

(4) Оператор A самосопряжен тогда и только тогда, когда *обе* размерности, о которых идет речь в (1a) и (1b), равны нулю.

Доказательство. Пусть $\lambda = \nu + i\mu$, $\mu \neq 0$. Поскольку A симметричен,

$$\|(\lambda - A)\varphi\|^2 \geqslant \mu^2 \|\varphi\|^2 \tag{X.1}$$

для всех $\varphi \in D(A)$. Из этого неравенства и замкнутости A немедленно вытекает, что $\operatorname{Ran}(\lambda - A)$ — замкнутое подпространство в $\mathscr{H}$. Более того,

$$\operatorname{Ker}(\lambda - A^*) = \operatorname{Ran}(\bar{\lambda} - A)^{\perp}. \tag{X.2}$$

Эти утверждения доказываются, как в теореме VIII.3, где $\lambda = i$.

Покажем теперь, что при достаточно малых $\eta \in \mathbb{C}$ подпространства $\operatorname{Ker}(\lambda - A^*)$ и $\operatorname{Ker}((\lambda + \eta) - A^*)$ имеют одинаковые размерности. Пусть u из $D(A^*)$ лежит в $\operatorname{Ker}((\lambda + \eta) - A^*)$, причем $\|u\| = 1$. Предположим, что $(u, v) = 0$ для всех $v \in \operatorname{Ker}(\lambda - A^*)$. Тогда, в силу (X.2), $u \in \operatorname{Ran}(\bar{\lambda} - A)$, так что в $D(A)$ существует φ со свойством $(\bar{\lambda} - A)\varphi = u$. В итоге

$$\begin{aligned} 0 = (((\lambda + \eta) - A^*)u, \varphi) &= (u, (\bar{\lambda} - A)\varphi) + \bar{\eta}(u, \varphi) = \\ &= \|u\|^2 + \bar{\eta}(u, \varphi), \end{aligned}$$

что при $|\eta| < |\mu|$ приводит к противоречию, поскольку, в силу (X.1), $\|\varphi\| \leqslant \|u\|/|\mu|$. Таким образом, если $|\eta| < |\mu|$, то в подпространстве $\mathrm{Ker}((\lambda+\eta)-A^*)$ не существует вектора u, лежащего в $\mathrm{Ker}(\lambda-A^*)^{\perp}$. Теперь простые соображения, основанные на свойствах проекторов (задача 4), показывают, что

$$\dim[\mathrm{Ker}((\lambda+\eta)-A^*)]\leqslant \dim[\mathrm{Ker}(\lambda-A^*)].$$

Аналогичные соображения показывают, что если $|\eta|<|\mu|/2$, то $\dim[\mathrm{Ker}(\lambda-A^*)]\leqslant\dim[\mathrm{Ker}((\lambda+\eta)-A^*)]$, откуда

$$\dim[\mathrm{Ker}(\lambda-A^*)]=\dim[\mathrm{Ker}((\lambda+\eta)-A^*)]$$

при $|\eta|<|\mu|/2$. Поскольку размерность $\dim[\mathrm{Ker}(\lambda-A^*)]$ локально постоянна, она постоянна во всей верхней полуплоскости и постоянна (но, вообще говоря, другая) в нижней полуплоскости. Это доказывает (1).

Из (X.1) вытекает, что при $\mathrm{Im}\,\lambda\neq 0$ оператор $\lambda-A$ всегда обладает ограниченным левым обратным, а из (X.2) следует, что обратный оператор задан всюду тогда и только тогда, когда $\dim[\mathrm{Ker}(\bar\lambda-A^*)]=0$. Таким образом, из части (1) доказываемой теоремы следует, что каждая из открытых полуплоскостей — верхняя и нижняя — целиком принадлежит либо спектру оператора A, либо его резольвентному множеству. С учетом замкнутости $\sigma(A)$ отсюда вытекает (2). Утверждения (3) и (4) представляют собой, в сущности, переформулировки теоремы VIII.3. ∎

Следствие. Если A — полуограниченный замкнутый симметрический оператор, т. е. $(A\varphi,\varphi)\geqslant -M\|\varphi\|^2$, то $\dim[\mathrm{Ker}(\lambda-A^*)]$ постоянна для всех $\lambda\in\mathbb{C}\setminus[-M,\infty)$.

Доказательство. Это следствие вытекает из доказательства теоремы X.1, ибо те же рассуждения о неизменности размерности можно провести для всех вещественных λ из $(-\infty,-M)$, связав тем самым константы, относящиеся к верхней и нижней полуплоскостям. ∎

Следствие. Если в резольвентное множество замкнутого симметрического оператора попадает хотя бы одно вещественное число, то такой оператор самосопряжен.

Доказательство. Так как резольвентное множество открыто и в рассматриваемом случае содержит точку вещественной оси, оно содержит также точки верхней и нижней полуплоскости. Утверждение следствия вытекает тогда из пункта (3) теоремы X.1. ∎

Поскольку размерности ядер операторов $i-A^*$ и $i+A^*$ играют важную роль в теории расширений, удобно дать им специальные наименования.

Определение. Пусть A—симметрический оператор и

$$\mathcal{K}_+ = \operatorname{Ker}(i - A^*) = \operatorname{Ran}(i + A)^\perp,$$
$$\mathcal{K}_- = \operatorname{Ker}(i + A^*) = \operatorname{Ran}(-i + A)^\perp.$$

Множества $\mathcal{K}_\pm$ называются **дефектными подпространствами** оператора A. Пара чисел $n_\pm$, определяемых равенствами $n_\pm = \dim[\mathcal{K}_\pm]$, называется **индексами дефекта** оператора A.

Отметим, что в качестве индексов дефекта может выступать любая пара неотрицательных целых чисел; возможно даже, что n_+ или n_- (или оба они сразу) равны бесконечности. В задаче 1 читателю предлагается построить соответствующие примеры.

Приступим теперь к построению замкнутых симметрических расширений оператора A. Пусть B—некоторое такое расширение. Тогда для $\varphi \in D(B^*)$ и всех $\psi \in D(A)$

$$(\psi, B^*\varphi) = (B\psi, \varphi) = (A\psi, \varphi).$$

Следовательно, $\varphi \in D(A^*)$ и $B^*\varphi = A^*\varphi$, так что

$$A \subseteq B \subseteq B^* \subseteq A^*. \tag{X.3}$$

Введем две полуторалинейные формы на $D(A^*)$:

$$(\varphi, \psi)_A = (\varphi, \psi) + (A^*\varphi, A^*\psi),$$
$$[\varphi, \psi]_A = (A^*\varphi, \psi) - (\varphi, A^*\psi).$$

Подпространство из $D(A^*)$, в котором для любой пары векторов φ, ψ справедливо равенство $[\varphi, \psi]_A = 0$, назовем **A-симметрическим.** Называя подпространство из $D(A^*)$ **A-замкнутым** или **A-ортогональным**, будем иметь в виду внутреннее произведение, задаваемое формой $(\cdot, \cdot)_A$.

Лемма. Пусть A—замкнутый симметрический оператор. Тогда

(a) Замкнутые симметрические расширения оператора A суть сужения A^* на A-замкнутые A-симметрические подпространства из $D(A^*)$.

(b) Множества $D(A)$, $\mathcal{K}_+$ и $\mathcal{K}_-$ суть A-замкнутые взаимно A-ортогональные подпространства из $D(A^*)$ и

$$D(A^*) = D(A) \oplus_A \mathcal{K}_+ \oplus_A \mathcal{K}_-.$$

(c) Существует взаимно однозначное соответствие между A-замкнутыми A-симметрическими подпространствами $S \subset D(A^*)$, содержащими $D(A)$, и A-замкнутыми A-симметрическими подпространствами $S_1 \subset \mathcal{K}_+ \oplus_A \mathcal{K}_-$, задаваемое равенством $S = D(A) \oplus_A S_1$.

Доказательство. Для доказательства (a) заметим, что из (X.3) следует, что любое симметрическое расширение A содержится в A^*. Далее, расширение замкнуто тогда и только тогда, когда его область определения A-замкнута, и симметрично тогда и только тогда, когда его область определения A-симметрична.

Для доказательства (b) отметим, что $D(A)$ само по себе A-замкнуто, поскольку замкнут оператор A, а $\mathcal{K}_\pm$ тоже A-замкнуты, поскольку они уже замкнуты в более слабой топологии, порождаемой обычным внутренним произведением. Ортогональность этих трех подпространств доказывается прямым вычислением, которое мы опускаем. Предположим, что $\psi \in D(A^*)$ и $\psi \perp_A D(A) \oplus_A \mathcal{K}_+ \oplus_A \mathcal{K}_-$. Для $\varphi \in D(A)$ имеем $(\varphi, \psi) + (A^*\varphi, A^*\psi) = (\varphi, \psi)_A = 0$, так что

$$(\varphi, \psi) = -(A\varphi, A^*\psi).$$

Следовательно, $A^*\psi \in D(A^*)$ и $A^*A^*\psi = -\psi$. Далее, из соотношения

$$(A^* + i)(A^* - i)\psi = (A^*A^* + I)\psi = 0$$

заключаем, что $(A^* - i)\psi \in \mathcal{K}_-$. Но если $\varphi \in \mathcal{K}_-$, то

$$\begin{aligned} i(\varphi, (A^* - i)\psi) &= (\varphi, \psi) + (A^*\varphi, A^*\psi) = \\ &= (\varphi, \psi)_A = 0, \end{aligned}$$

поскольку $\psi \perp_A \mathcal{K}_-$. Таким образом, $(A^* - i)\psi = 0$, т. е. $\psi \in \mathcal{K}_+$. Поскольку $\psi \perp_A \mathcal{K}_+$, то $\psi = 0$, что и завершает доказательство (b).

Пусть S_1 есть A-замкнутое A-симметрическое подпространство в $\mathcal{K}_+ \oplus_A \mathcal{K}_-$ и $\varphi = \varphi_0 + \varphi_1$, $\psi = \psi_0 + \psi_1$, где $\varphi_0, \psi_0 \in D(A)$; $\varphi_1, \psi_1 \in S_1$. Тогда $[\varphi_0, \psi_0]_A = 0$, ибо A — симметрический оператор, и $[\varphi_1, \psi_1]_A = 0$, ибо подпространство S_1 A-симметрично. Далее,

$$\begin{aligned} [\varphi_0, \psi_1]_A &= (A^*\varphi_0, \psi_1) - (\varphi_0, A^*\psi_1) = \\ &= (A\varphi_0, \psi_1) - (\varphi_0, A^*\psi_1) = 0 \end{aligned}$$

в силу того, что $\varphi_0 \in D(A)$ и $\psi_1 \in D(A^*)$. Аналогичное рассуждение показывает, что $[\varphi_1, \psi_0]_A = 0$. Таким образом,

$$[\varphi, \psi]_A = [\varphi_0, \psi_0]_A + [\varphi_1, \psi_0]_A + [\varphi_0, \psi_1]_A + [\varphi_1, \psi_1]_A = 0$$

и $S = D(A) \oplus_A S_1$ представляет собой A-симметрическое подпространство, которое A-замкнуто, поскольку $D(A)$ и S_1 оба A-замкнуты и A-ортогональны.

Обратно, пусть S является A-замкнутым A-симметрическим подпространством в $D(A^*)$, содержащим $D(A)$. Пусть $S_1 = S \cap (\mathcal{K}_+ \oplus_A \mathcal{K}_-)$. Тогда S_1 очевидно A-замкнуто и A-симметрично. Предположим теперь, что $\varphi \in S$. Тогда вектор φ однозначно представим в виде $\varphi = \varphi_0 + \varphi_1$, где $\varphi_0 \in D(A)$ и $\varphi_1 \in \mathcal{K}_+ \oplus_A \mathcal{K}_-$. Поскольку $D(A) \subset S$, то $\varphi_0 \in S$, откуда вытекает, что φ_1 также лежит в S. В итоге $\varphi_1 \in S_1$ и $S = D(A) \oplus_A S_1$. Это доказывает (c). ∎

Теперь мы подготовлены к доказательству основной теоремы этого раздела.

Теорема X.2. Пусть A — замкнутый симметрический оператор. Замкнутые симметрические расширения оператора A находятся во взаимно однозначном соответствии с частичными изометриями (относительно исходного внутреннего произведения) пространства $\mathscr{K}_+$ в $\mathscr{K}_-$. Если U — одна из таких изометрий с начальным подпространством $I(U) \subseteq \mathscr{K}_+$, то отвечающее ей замкнутое симметрическое расширение A_U задано на области

$$D(A_U) = \{\varphi + \varphi_+ + U\varphi_+ \mid \varphi \in D(A),\ \varphi_+ \in I(U)\}$$

и

$$A_U(\varphi + \varphi_+ + U\varphi_+) = A\varphi + i\varphi_+ - iU\varphi_+.$$

Если $\dim[I(U)] < \infty$, то индексы дефекта A_U равны

$$n_\pm(A_U) = n_\pm(A) - \dim[I(U)].$$

Доказательство. Пусть A_1 — замкнутое симметрическое расширение оператора A. Из доказанной выше леммы мы знаем, что $D(A_1) = D(A) \oplus_A S_1$, где S_1 есть A-замкнутое A-симметрическое подпространство в $\mathscr{K}_+ \oplus_A \mathscr{K}_-$. Если $\varphi \in S_1$, то имеет место однозначное разложение $\varphi = \varphi_+ + \varphi_-$. Из A-симметричности S_1 следует, что

$$\begin{aligned} 0 &= (A^*\varphi, \varphi) - (\varphi, A^*\varphi) = \\ &= 2i(\varphi_-, \varphi_-) - 2i(\varphi_+, \varphi_+), \end{aligned}$$

откуда

$$\|\varphi_+\|^2 = \|\varphi_-\|^2. \tag{X.4}$$

Поскольку S_1 — подпространство в $\mathscr{K}_+ \oplus_A \mathscr{K}_-$, (X.4) показывает, что отображение $\varphi_+ \mapsto \varphi_-$ задает изометрию подпространства $\mathscr{K}_+$ в $\mathscr{K}_-$. Обозначим соответствующее частично изометрическое отображение через U. Тогда

$$D(A_1) = \{\varphi + \varphi_+ + U\varphi_+ \mid \varphi \in D(A),\ \varphi_+ \in I(U)\} \tag{X.5}$$

и

$$A_1(\varphi + \varphi_+ + U\varphi_+) = A^*(\varphi + \varphi_+ + U\varphi_+) = A\varphi + i\varphi_+ - iU\varphi_+. \tag{X.6}$$

Обратно, пусть U — изометрия подпространства $\mathscr{K}_+$ в $\mathscr{K}_-$; определим $D(A_1)$ и A_1 формулами (X.5) и (X.6). Тогда $D(A_1)$ есть A-замкнутое A-симметрическое подпространство в $D(A^*)$, так что, в силу леммы, A_1 — замкнутое симметрическое расширение A.

Утверждение об индексах дефекта легко вывести, рассмотрев области значений операторов $i + A_1$ и $i - A_1$, заданных на $D(A_1)$. ∎

Следствие. Пусть A — замкнутый симметрический оператор с индексами дефекта n_+ и n_-. Тогда

(a) A самосопряжен тогда и только тогда, когда $n_+ = 0 = n_-$.

(b) A обладает самосопряженными расширениями тогда и только тогда, когда $n_+ = n_-$. Существует взаимно однозначное соответствие между самосопряженными расширениями оператора A и унитарными отображениями из $\mathcal{K}_+$ на $\mathcal{K}_-$.

(c) Если $n_+ = 0 \neq n_-$ или $n_- = 0 \neq n_+$, то A не имеет нетривиальных симметрических расширений (такие операторы называются **максимальными симметрическими**).

Пример 1. Рассмотрим с нескольких точек зрения пример, уже приводившийся в § VIII.2. Пусть T — оператор $i\,d/dx$ в $L^2(0, 1)$ с областью определения $D(T) = \{\varphi \mid \varphi \in AC[0, 1], \varphi(0) = 0 = \varphi(1)\}$. В § VIII.2 было показано, что T^* — это оператор $i\,d/dx$, определенный на $D(T^*) = AC[0, 1]$.

Поскольку оператор T столь прост и поскольку область определения сопряженного оператора T^* известна нам в явном виде, мы можем построить самосопряженные расширения T, не прибегая к помощи только что развитой техники. Поучительно с этого и начать. Предположим, что S — симметрическое расширение T. Так как $D(S^*) \subset D(T^*)$, то функции из $D(S^*)$ абсолютно непрерывны и $S^*\varphi = i\,d\varphi/dx$. Следовательно, при $\varphi \in D(S)$ и $\psi \in D(S^*)$ интегрирование по частям дает

$$(S\varphi, \psi) - (\varphi, S^*\psi) = \overline{\varphi(1)}\,\psi(1) - \overline{\varphi(0)}\,\psi(0) = 0. \qquad (X.7)$$

Отсюда в случае $S = T$ мы видим, почему T не самосопряжен. Граничные условия, наложенные на функции из $D(T)$, столь сильны, что функции из $D(T^*)$ не надо подчинять никаким граничным условиям, для того чтобы обратить в нуль правую часть (X.7). Поэтому все, что необходимо сделать,— это расширить множество функций из $D(S)$, подчиняя их более общим граничным условиям, так чтобы равенство (X.7) требовало выполнения *тех же самых* граничных условий от функций из $D(S^*)$. Сделаем это. Пусть S — самосопряженное расширение T и $\varphi \in D(S) \setminus D(T)$. Тогда (X.7) требует, чтобы $|\varphi(1)|^2 = |\varphi(0)|^2$, а поскольку $\varphi \notin D(T)$, то $\varphi(0) \neq 0$, и потому существует такое α с $|\alpha| = 1$, что $\varphi(1) - \alpha\varphi(0) = 0$. Если ψ — любая другая функция из $D(S)$, то (X.7) требует, чтобы $\psi(1) = \alpha\psi(0)$ с *тем же самым* α. Следовательно, $S \subset T_\alpha$, где $T_\alpha = i\,d/dx$ на

$$D(T_\alpha) = \{\varphi \mid \varphi \in AC[0, 1],\ \varphi(1) = \alpha\varphi(0)\}.$$

Поскольку T_α симметричен, а S самосопряжен, то $S = T_\alpha$ для некоторого α.

Теперь определим, какие T_α самосопряжены. Выберем $\varphi \in D(T_\alpha)$ и $\psi \in D(T_\alpha^*)$. Тогда (X.7) требует, чтобы

$$\bar{\alpha}\,\overline{\varphi(0)}\,\psi(1)-\overline{\varphi(0)}\,\psi(0)=0,$$

и потому $\psi(1)=\alpha\psi(0)$. Таким образом, $\psi \in D(T_\alpha)$ и $D(T_\alpha^*)=D(T_\alpha)$, т. е. T_α самосопряжен при каждом α. В итоге множество самосопряженных расширений оператора T представляет собой набор операторов $\{T_\alpha \mid \alpha \in \mathbb{C},\ |\alpha|=1\}$.

Покажем теперь, как этот же результат можно получить с помощью общей техники, развитой в настоящем разделе. Для определения подпространства $\mathcal{K}_+$ нужно найти решения уравнения $T^*\psi = i\psi$. Если $\psi \in D(T^*)$, то $\psi \in AC[0, 1]$ и равенство $i\,d\psi/dx = i\psi$ означает, что функция ψ' также абсолютно непрерывна. Повторение этого рассуждения показывает, что любое решение уравнения $T^*\psi = i\psi$ на самом деле бесконечно дифференцируемо и удовлетворяет уравнению $\psi' = \psi$. Значит, $\mathcal{K}_+ = \{ce^x \mid c \in \mathbb{C}\}$ и аналогично $\mathcal{K}_- = \{ce^{-x} \mid c \in \mathbb{C}\}$. Следовательно, индексы дефекта оператора T суть $\langle 1, 1\rangle$. Пусть

$$\varphi_+ = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{e^2-1}}\,e^x \quad \text{и} \quad \varphi_- = \frac{\sqrt{2}\,e}{\sqrt{e^2-1}}\,e^{-x}$$

— нормированные векторы из $\mathcal{K}_\pm$. Тогда частичными изометриями из $\mathcal{K}_+$ в $\mathcal{K}_-$ будут только отображения $\varphi_+ \mapsto \gamma\varphi_-$, где $|\gamma|=1$. По теореме X.2 единственными симметрическими расширениями оператора T будут операторы $A_\gamma = i\,d/dx$ с областями определения

$$D(A_\gamma)=\{\varphi+\beta\varphi_+ + \gamma\beta\varphi_- \mid \varphi \in D(T),\ \beta \in \mathbb{C}\}.$$

В силу последнего утверждения теоремы X.2 каждый A_γ имеет нулевые индексы дефекта и, следовательно, самосопряжен. Для того чтобы убедиться в совпадении этих операторов с теми, которые мы построили чуть выше, отметим, что для $\psi \in D(A_\gamma)$

$$\psi(0)=\frac{\beta(1+\gamma e)\sqrt{2}}{\sqrt{e^2-1}} \quad \text{и} \quad \psi(1)=\frac{\beta(\gamma+e)\sqrt{2}}{\sqrt{e^2-1}},$$

и потому

$$\psi(1)=\frac{\gamma+e}{1+\gamma e}\,\psi(0)=\alpha\psi(0), \quad \text{где} \quad |\alpha|=\left|\frac{\gamma+e}{1+\gamma e}\right|=1.$$

Обратно, если $\psi(1)=\alpha\psi(0)$, то ψ можно записать в виде $\psi=\varphi+\beta\varphi_+ + \gamma\beta\varphi_-$ с некоторым β и $\gamma=(\alpha-e)/(1-\alpha e)$. Следовательно, $A_\gamma = T_\alpha$.

Обсудим теперь ту же проблему с «физической» точки зрения. Предположим, что у нас есть гладкий волновой пакет $\varphi(x)$ на $[0, 1]$, который обращается в нуль около граничных точек и который сдвигается направо (рис. X.1). Для достаточно малых y

(таких, что пакет не достигает конечной точки) сдвиги даются семейством операторов $U(y)$: $\varphi(x) \to \varphi(x-y)$. В квантовой механике сдвиги должны быть представлены унитарной группой, генератор которой есть оператор импульса. В случае пакета $\varphi(x)$ это так и есть:

$$\lim_{y\to 0} \frac{U(y)\varphi-\varphi}{iy} = \lim_{y\to 0} \frac{\varphi(x-y)-\varphi(x)}{iy} = i\frac{d\varphi}{dx}.$$

В итоге генератор сдвигов действует на функции с носителем, не содержащим граничных точек, как оператор $i\,d/dx$. На самом

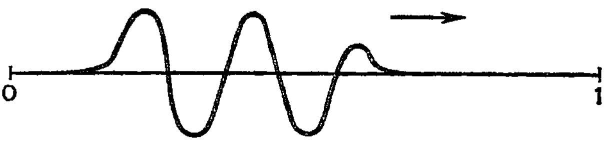

Рис. X.1. Волновой пакет $\varphi(x)$.

деле $i\,d/dx$ симметричен на $C_0^1(0, 1)$—множестве C^1-функций с компактным носителем на $(0, 1)$, и его замыкание есть как раз наш оператор T. Но T не самосопряжен и причина ясна: мы задали сдвиги $U(y)$ только на таких функциях, носители которых не содержат нуля и единицы, и потому только для достаточно малых y (зависящих от носителя). Нужно еще уточнить, что произойдет, когда волновой пакет достигнет конца отрезка $[0, 1]$! Если мы хотим, чтобы сдвиги представлялись унитарной группой, то надо считать, что части волнового пакета, выходящие за одну границу отрезка $[0, 1]$, должны возвращаться через другую (так, как будто отрезок $[0, 1]$ свернут в окружность). Таким образом, унитарность требует, чтобы

$$\int_0^1 |\varphi(x-y)|^2\,dx = \int_0^1 |\varphi(x)|^2\,dx,$$

где $x-y$ означает сдвиг по модулю 1. Но у нас остается еще свобода в выборе фазы части волнового пакета, входящей через точку нуль. В силу принципа суперпозиции все функции при своем возвращении через нуль должны изменяться на одинаковую фазу. Следовательно, «сдвиги» различных типов как раз и задаются путем фиксирования α, $|\alpha|=1$, и требования, чтобы все приемлемые волновые пакеты $\psi_y \equiv \varphi(\cdot+y)$ удовлетворяли условию $\psi_y(1)=\alpha\psi_y(0)$ для *всех* «моментов времени» y. Именно такое движение и задается с помощью $\exp\{iyT_\alpha\}$, где T_α—оператор, описанный выше. Таким образом, даже в этой физически тривиальной ситуации мы убеждаемся в том, что *различные* самосопряженные расширения соответствуют *различной физике*.

Простой и полезный критерий существования самосопряженного расширения у симметрического оператора дает доказываемая ниже теорема, но сначала дадим такое

Определение. Антилинейное отображение C: $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$ (т. е. $C(\alpha\varphi + \beta\psi) = \bar{\alpha}C\varphi + \bar{\beta}C\psi$) называется **сопряжением**, если оно сохраняет норму и если $C^2 = I$.

Теорема X.3 (теорема фон Неймана). Пусть A — симметрический оператор, и пусть существует сопряжение C со свойствами C: $D(A) \to D(A)$ и $AC = CA$. Тогда A имеет равные индексы дефекта и потому обладает самосопряженными расширениями.

Доказательство. Мы знаем, что $C^2 = I$ и $CD(A) \subseteq D(A)$, поэтому $CD(A) = D(A)$. Предположим, что $\varphi_+ \in \mathcal{K}_+$ и $\psi \in D(A)$. Тогда

$$0 = \overline{(\varphi_+, (A+i)\psi)} = (C\varphi_+, C(A+i)\psi) = \\ = (C\varphi_+, (A-i)C\psi).$$

Поскольку C отображает $D(A)$ на $D(A)$, вектор $C\varphi_+$ лежит в $\mathcal{K}_-$, так что C: $\mathcal{K}_+ \to \mathcal{K}_-$. Аналогичное рассуждение показывает, что C: $\mathcal{K}_- \to \mathcal{K}_+$. Наконец, так как C сохраняет норму, получаем

$$\dim[\mathcal{K}_+] = \dim[\mathcal{K}_-]. \blacksquare$$

Пример 2 (шредингерова частица на полупрямой). Пусть A — оператор $-d^2/dx^2$ в $L^2(0, \infty)$ с областью определения $C_0^\infty(0, \infty)$. Операция комплексного сопряжения коммутирует с A, и потому из теоремы X.3 следует равенство индексов дефекта оператора A. Мы хотим найти решения уравнений $A^*\varphi = \pm i\varphi$. Поскольку $L^2(0, \infty) \subset \mathcal{D}'_{(0, \infty)}$, мы интересуемся слабыми решениями (см. § V.4) уравнений $-d^2\varphi/dx^2 = \pm i\varphi$. Из теоремы о регулярности (теорема IX.25) следует, что эти решения бесконечно дифференцируемы и, таким образом, являются классическими решениями. Согласно элементарной теории обыкновенных дифференциальных уравнений, классическими решениями уравнения $-\varphi''(x) = i\varphi(x)$ служат функции

$$\exp\{(-1+i)x/\sqrt{2}\}, \qquad \exp\{(1-i)x/\sqrt{2}\},$$

а классическими решениями уравнения $-\varphi''(x) = -i\varphi(x)$ — функции

$$\exp\{(1+i)x/\sqrt{2}\}, \qquad \exp\{(-1-i)x/\sqrt{2}\}.$$

Поскольку только $\exp\{(-1+i)x/\sqrt{2}\}$ и $\exp\{(-1-i)x/\sqrt{2}\}$ лежат в $L^2(0, \infty)$, мы видим, что индексы дефекта равны $\langle 1, 1\rangle$. Используя теорему X.2 и проводя анализ, похожий на рассуждения второй части примера 1, читатель легко покажет (задача 5), что самосопряженные расширения A можно параметризовать с помощью множества $\mathbb{R} \cup \{\infty\}$, задавая

$$D(A_a) = \{\psi \mid \psi \in AC^2[0, \infty],\ \psi'(0) + a\psi(0) = 0\},$$

если $a \in \mathbb{R}$, и

$$D(A_\infty) = \{\psi \mid \psi \in AC^2[0, \infty],\ \psi(0) = 0\}.$$

Все расширения действуют на отвечающих им областях определения как $-d^2/dx^2$. Пространство $AC^2[0, \infty]$ представляет собой множество функций из $L^2(0, \infty)$, у которых слабые производные лежат в $AC[0, \infty]$; в частности, эти функции непрерывно дифференцируемы.

Физическая интерпретация этих граничных условий такова. Поскольку оператор импульса равен $-i\,d/dx$ и $-i(d/dx)\exp\{-ikx\} = -k\exp\{-ikx\}$, функция $\exp\{-ikx\}$ — это плоская волна, движущаяся налево с импульсом $k > 0$; иначе говоря, это приходящая волна с импульсом k. Функция $\exp\{ikx\}$ — это уходящая волна с импульсом k. Пусть $a < \infty$ фиксировано. Функции $\exp\{\pm ikx\}$ из-за своего поведения на ∞ не лежат в $L^2(0, \infty)$, но мы игнорируем это, так как сейчас интересуемся их поведением вблизи начала. Однако и около нуля ни $\exp\{ikx\}$, ни $\exp\{-ikx\}$ не лежат в $D(A_a)$, поскольку они не удовлетворяют граничным условиям. Но если взять $\alpha = (ik - a)/(ik + a)$, то $\exp\{-ikx\} + \alpha\exp\{ikx\}$ удовлетворяет граничным условиям $\psi'(0) + \alpha\psi(0) = 0$ и (с точностью до поведения на ∞) лежит в $D(A_a)$. Таким образом, оператор A_a порождает динамику, согласно которой плоская волна с импульсом k отражается в начале координат, меняя фазу на величину $\alpha(k) = (ik - a)/(ik + a)$. Случай $a = \infty$ отвечает потенциалу твердой стенки, когда изменение фазы при всех импульсах равно $\alpha = -1$. Подчеркнем, что изменение фазы различных плоских волн различно для разных самосопряженных расширений. Таким образом, *разные* самосопряженные расширения отвечают *разной физике*.

Менее тривиальное применение теоремы X.3 демонстрируется в следующем примере, для которого важно только *существование* некоторого самосопряженного расширения. Читателю рекомендуется сравнить этот пример с похожим на него доказательством теоремы Бохнера (теорема IX.9), где соответствующее утверждение о существовании выводилось из теоремы Стоуна.

Пример 3 (проблема моментов Гамбургера). Пусть ρ — положительная мера на $\mathbb{R}$ и

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} x^n\, d\rho(x). \qquad \text{(X.8)}$$

Числа a_n называются **моментами** меры ρ. Проблема моментов Гамбургера состоит в отыскании требований к последовательности вещественных чисел $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$, гарантирующих существование меры, удовлетворяющей (X.8). Известно весьма элегантное решение этой проблемы.

Теорема X.4. Последовательность вещественных чисел $\{a_n\}$ служит моментами положительной меры на $\mathbb{R}$ тогда и только тогда, когда для всех N и всех $\beta_0, \ldots, \beta_N \in \mathbb{C}$

$$\sum_{n, m=0}^{N} \bar{\beta}_n \beta_m a_{n+m} \geqslant 0. \tag{X.9}$$

Доказательство. Предположим сначала, что ρ — положительная мера и (X.8) выполнено. Тогда

$$\sum_{n, m=0}^{N} \bar{\beta}_n \beta_m a_{n+m} = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \sum_{n=0}^{N} \beta_n x^n \right|^2 d\rho \geqslant 0.$$

Обратно, предположим, что справедливо (X.9). Пусть P — множество полиномов на $\mathbb{R}$ с комплексными коэффициентами. Определим на P полуторалинейную форму

$$\left(\sum_{n=0}^{N} \beta_n x^n, \ \sum_{m=0}^{N} \alpha_m x^m \right) = \sum_{n=0}^{N} \sum_{m=0}^{N} \bar{\beta}_n \alpha_m a_{n+m}.$$

В силу (X.9) эта форма неотрицательна. Пусть $Q = \{\psi \mid \psi \in P, (\psi, \psi) = 0\}$ и $\mathcal{H}$ — гильбертово пространство, полученное пополнением P/Q относительно внутреннего произведения $(\cdot, \cdot)$. Рассмотрим отображение A: $P \longrightarrow P$, определяемое формулой

$$A\colon \sum_{n=0}^{N} \beta_n x^n \longmapsto \sum_{n=0}^{N} \beta_n x^{n+1}.$$

Нетрудно увидеть, что A симметрично и что $A: Q \longrightarrow Q$, поскольку в силу неравенства Шварца

$$(A\psi, A\psi) = |(A^2\psi, \psi)| \leqslant (A^2\psi, A^2\psi)^{1/2} (\psi, \psi)^{1/2}.$$

Таким образом, A поднимается до симметрического оператора $\hat{A}$ в $\mathcal{H}$ с областью определения P/Q. Если через C обозначить обычное комплексное сопряжение на P, то C также поднимается до отображения $\hat{C}$: $P/Q \longrightarrow P/Q$. Легко проверить, что $\hat{C}$ продолжается до сопряжения на $\mathcal{H}$ и что $\hat{A}\hat{C} = \hat{C}\hat{A}$. В силу теоремы X.3 оператор $\hat{A}$ имеет некоторое самосопряженное расширение; обозначим его $\tilde{A}$. Пусть ρ — спектральная мера вектора 1 в P. Тогда

$$\int x^n \, d\rho(x) = (1, \tilde{A}^n 1) = (1, x^n) = a_n. \blacksquare$$

В гл. XVI мы увидим, что теорему X.4 можно доказать другим способом, применяя теорему Хана—Банаха, а в § X.6 мы обсудим проблему Гамбургера с точки зрения единственности ее решения.

Дополнение к § X.1. Движение на полупрямой, метод Вейля [1])

Любой болван способен изрекать общие истины, но только глубокий ум различает те частности, к которым они относятся.

ДЖОРДЖ ЭЛИОТ (ДАНИЕЛЬ ДЕРОНДА)

В этом дополнении мы обсуждаем как классическое, так и квантовомеханическое движение частицы в потенциале на полупрямой. Сравнение этих двух случаев ясно проявляет аналогии и различия между классической и квантовой механикой и предоставляет возможность применить теоремы об индексах дефекта для построения теории Вейля обыкновенных дифференциальных уравнений. Кроме того, решение квантовомеханической задачи на полупрямой можно использовать при анализе многомерных сферически симметричных потенциалов (см. пример 4).

Начнем с классического случая. Пусть $x(t)$ и $v(t)$—положение и скорость частицы, движущейся на полупрямой $(0, \infty)$ в потенциале $V(x)$, который мы будем считать непрерывно дифференцируемым с производной $V'(x)$, удовлетворяющей условию Липшица равномерно на каждом компактном подмножестве из $(0, \infty)$. Гамильтониан этой системы равен $H(x, v) = mv^2/2 + V(x)$, а уравнения движения имеют вид

$$\dot{x}(t) = v(t), \qquad \dot{v}(t) = -V'(x(t))/m. \tag{X.10}$$

Для любых заданных $x_0 > 0$, v_0, $t_0 > 0$ стандартные соображения, основанные на теории сжимающих отображений (см. § V.6), доказывают существование единственной пары $\langle x(t), v(t)\rangle$, дающей для всех t, близких к t_0, решение уравнений (X.10), удовлетворяющее условиям $x(t_0) = x_0$, $v(t_0) = v_0$. Следующее предложение показывает, что единственный случай, когда локальное решение не продолжается до глобального,—это случай частицы, достигающей нуля или уходящей на бесконечность за конечное время.

[1]) В оригинале: limit point—limit circle methods.—*Прим. ред.*