

Атом водорода в квантовой механике и квантование на искривленных поверхностях

© А.Г. Чирков, А.Я. Бердников

Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 20 июня 2000 г.)

С помощью формулы разложения Титчмарша получены новые правила квантования классических систем, обобщающие традиционные и переходящие в них в случае существования перехода к декартовым координатам. Найдено уравнение, обобщающее уравнение Шредингера на произвольные натуральные системы. Принцип минимальной связи (сильный принцип эквивалентности) позволяет распространить это уравнение на произвольные искривленные пространства.

В монографии [1] В.А. Стеклов так формулирует основные задачи математической физики: "Задача физики об охлаждении тел, переведенная на язык анализа и соответствующим образом обобщенная, приводит к двум вопросам чистого анализа первостепенной важности: А) к задаче интегрирования линейного дифференциального уравнения при соответствующих граничных условиях (нахождению собственных или фундаментальных функций и собственных или характеристических чисел); В) к задаче о разложении произвольных функций в сходящиеся ряды по собственным функциям".

Обычно в физической литературе основное внимание уделяется задаче А, а задача В практически не обсуждается. Так, явная формула разложения по собственным функциям задачи об атоме водорода приведена только в [2,3], хотя для теории возмущений задача В является не менее важной, чем задача А.

Существует три метода решения задачи В. Это прежде всего общая спектральная теория линейных самосопряженных операторов в гильбертовом пространстве (см., например, [4,5]). Затем методы теории интегральных уравнений, начала которой были заложены Г. Вейлем. Другой, но близкий подход к теоремам разложения изложен в работе Э. Титчмарша [6], в которой даются доказательства справедливости разложений, основанные на контурном интегрировании и теории вычетов. Этот метод, таким образом, позволяет избежать привлечения и теории интегральных уравнений, и общей теории линейных операторов. Последнее особенно важно по следующим причинам. Обычно физики практически никогда не различают понятия самосопряженного и симметричного оператора. Это ведет сразу к двум неприятностям: во-первых, область задания оператора в гильбертовом пространстве остается неясной, что не позволяет применять методы спектральной теории; во-вторых, в область определения оператора включаются все функции, для которых аналитические действия в выражении оператора имеют смысл, вне зависимости от того, входят ли сами эти функции (а также результат применения к ним оператора) в гильбертово пространство или нет [7]. Строгое рассмотрение последнего слу-

чая требует введения понятия оснащенного гильбертова пространства [8].

Кроме того, в руководствах по физике очень часто написано, что каждый самосопряженный оператор имеет полную ортогональную систему (базис) собственных векторов. Это так в случае компактных самосопряженных операторов, но гамильтониан никогда не бывает компактным. Другие общие критерии, когда это так, трудно сформулировать, но иногда так бывает и для гамильтонианов (гармонический осциллятор). Этим частным случаем, по-видимому, и кончаются интересные примеры, когда справедлив вышеупомянутый принцип; операторы, как правило, имеют и так называемый непрерывный спектр. В результате таких интуитивных действий формула разложения в широко известной задаче об атоме водорода [2,3] оказывается, вообще говоря, неверной.

Метод Титчмарша позволяет построить разложение по нормированным собственным функциям только методами классического математического анализа и избежать всех указанных трудностей. Кроме того, как будет ясно из изложения, он вполне доступен по используемой технике. Поскольку метод Титчмарша малоизвестен, то приведены основные положения его теории, необходимые для получения разложения в задаче квантовой механики об атоме водорода.

На основании этих результатов получены новые правила квантования классических систем, обобщающих традиционные и переходящие в них случаи существования перехода к декартовым координатам.

Термин "квантование" возник в двадцатые годы в физической литературе и с самого начала употреблялся в двух смыслах. Во-первых, это дискретизация множества значений той или иной физической величины, во-вторых, это построение исходя из классической механической системы с s -числовой функцией Гамильтона $H(p, q, t)$ оператора Гамильтона $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}, t)$, где \hat{p}, \hat{q} — операторы, сопоставляемые классическим каноническим переменным. В предлагаемой работе термин "квантование" употребляется в этом втором значении.

Традиционная схема квантования Вейля-Гейзенберга применяется к классическим системам только с плоским

фазовым пространством и только в декартовых координатах [14]. В общем случае задача квантования не является тривиальной и однозначной.

Метод Титчмарша

Пусть функция $y = y(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \{\lambda - q(x)\}y = 0, \quad (1)$$

где $q(x)$ — данная функция x , определенная на некотором интервале (a, b) и некоторым граничным условиям [6].

В приложениях часто функция $q(x)$ обладает особенностью на одном или на обоих концах рассматриваемого интервала или же интервал простирается до бесконечности в одном или обоих направлениях. Это так называемые сингулярные задачи.

Рассмотрим случай, когда интервалом является вещественная полуось $(0, \infty)$, а функция $q(x)$ непрерывна в каждом конечном интервале. Пусть теперь $\varphi(x) = \varphi(x, \lambda)$ и $\theta(x) = \theta(x, \lambda)$ — такие решения уравнения (1), что определитель вронского $W_x(\varphi, \theta) = W_0(\varphi, \theta) = 1$. Тогда при любом вещественном значении λ уравнение (1) имеет решение

$$\psi(x, \lambda) = \theta(x, \lambda) + m(\lambda)\varphi(x, \lambda), \quad (2)$$

принадлежащее $L^2(0, \infty)$. Функция $m(\lambda)$ называется функцией Вейля–Титчмарша, о которой предполагается следующее: $m(\lambda)$ — аналитическая функция λ , регулярная в верхней полуплоскости, и $\text{Im } m(\lambda) < 0$ [6]. В этом случае, если известны два линейно независимых решения $\varphi_1(x, \lambda)$ и $\varphi_2(x, \lambda)$ с вронскианом $\omega(\lambda) = W[\varphi_1, \varphi_2] \neq 0$, нужный результат достигается делением на $\omega(\lambda)$. Пусть функция $f(y) \in L^2(0, \infty)$ и пусть

$$\begin{aligned} \Phi(x, \lambda) = & \psi(x, \lambda) \int_0^x \varphi(y, \lambda) f(y) dy \\ & + \varphi(x, \lambda) \int_x^\infty \psi(y, \lambda) f(y) dy, \end{aligned} \quad (3)$$

где φ и ψ — функции определенные выше.

Тогда при каждом x функция $\Phi(x, \lambda)$ аналитична по λ и регулярна при $\text{Im } m(\lambda) > 0$ или $\text{Im } m(\lambda) < 0$. В этом случае, когда известны $\varphi_1(x, \lambda)$ и $\varphi_2(x, \lambda)$ с вронскианом $\omega(\lambda) = W[\varphi_1, \varphi_2]$, соответствующее выражение для $\Phi(x, \lambda)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi(x, \lambda) = & \frac{\varphi_2(x)}{\omega(\lambda)} \int_0^x \varphi_1(y) f(y) dy \\ & + \frac{\varphi_1(x)}{\omega(\lambda)} \int_x^\infty \varphi_2(y) f(y) dy. \end{aligned} \quad (3a)$$

Очевидно, что функция $\Phi(x, \lambda)$ выражается через функцию Грина $G(x, y, \lambda)$

$$G(x, y, \lambda) = \begin{cases} \psi(x, \lambda)\varphi(y, \lambda), & y \leq x \\ \varphi(x, \lambda)\psi(y, \lambda), & y > x \end{cases} \quad (4)$$

следующим соотношением

$$\Phi(x, \lambda) = \int_0^\infty G(x, y, \lambda) f(y) dy. \quad (5)$$

Общая формула разложения Титчмарша имеет вид

$$f(x) = \lim_{\substack{R \rightarrow \infty \\ \delta \rightarrow 0}} \left\{ -\frac{1}{i\pi} \int_{-R+i\delta}^{R+i\delta} \Phi(x, \lambda) d\lambda \right\}. \quad (6)$$

Можно доказать [6], что

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \int_0^\lambda \{-\text{Im } m(k + i\delta)\} dk = k(\lambda), \quad (7)$$

где $k(\lambda)$ — неубывающая функция λ .

Учитывая этот факт, формально получаем, что при $R \rightarrow \infty$ и $\delta \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \text{Im} \left[-\frac{1}{\pi} \int_{-R+i\delta}^{R+i\delta} \Phi(x, \lambda) d\lambda \right] \rightarrow & \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x, \lambda) dk(\lambda) \\ & \times \int_0^\infty \varphi(y, \lambda) f(y) dy. \end{aligned} \quad (8)$$

Отсюда, в частности, следует, что разложение содержит интегралы Стильтьеса. Таким образом,

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x, \lambda) dk(\lambda) \int_0^\infty \varphi(y, \lambda) f(y) dy. \quad (9)$$

Если положить

$$g(\lambda) = \int_0^\infty \varphi(y, \lambda) f(y) dy, \quad (10)$$

то формула (9) примет вид

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x, \lambda) g(\lambda) dk(\lambda). \quad (11)$$

Далее,

$$\int_0^\infty \{f(x)\}^2 dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \{g(\lambda)\}^2 dk(\lambda). \quad (12)$$

Это так называемое равенство Парсеваля. В случае интервала $(0, \infty)$ спектр может быть определен как множество точек λ , образующих дополнение к множеству точек, в окрестности которых функция $k(\lambda)$ постоянна. Если $m(\lambda)$ — мероморфная функция, то спектр совпадает с множеством ее полюсов (точечный спектр). Интервал же, во всех точках которого $k(\lambda)$ возрастает, принадлежит непрерывному спектру.

Пусть спектр точечный, т.е. особенностями $m(\lambda)$ являются только полюсы в точках $\lambda_0, \lambda_1, \dots$, и пусть r_0, r_1, \dots — соответствующие вычеты. Тогда функции

$$\psi_n(x) = \sqrt{r_n} \varphi(x, \lambda_n) \quad (13)$$

образуют ортонормированную систему [6].

Атом водорода

Пусть

$$q(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r}, \quad 0 < r < \infty, \quad (14)$$

где l — целое положительное число или нуль.

Соответствующее уравнение (1) имеет вид

$$\frac{d^2 y}{dr^2} + \left\{ \varepsilon + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} y = 0. \quad (15)$$

Здесь r — безразмерная величина, равная отношению соответствующей размерной величины к $a_0 = \hbar^2/mc^2$, $\lambda = \varepsilon = 2E\hbar^2/mc^4$. Уравнение (15) получается из уравнения для радиальной части $R(r)$ волновой функции относительного движения заменой $y = rR$. Положив $y = r^{-l}Y$, $\varepsilon = s^2$, приходим к уравнению

$$Y'' - \frac{2l}{r}Y' + \left(s^2 + \frac{2}{r} \right) Y = 0. \quad (16)$$

Используя для нахождения решений метод Лапласа [9], получаем

$$\varphi_1(r, \varepsilon) = r^{-l} \oint_C (z+is)^{k-l-1} (z-is)^{-k-l-1} e^{rz} dz, \quad (17)$$

где C — замкнутый контур, охватывающий точки is и $-is$, $\arg(z+is)$ и $\arg(z-is)$ изменяются при обходе контура от $-\pi$ до π ; $k = i/s$, и

$$\varphi_2(x, \varepsilon) = r^{-l} \int_{-\infty}^{(is+)} (z+is)^{k-l-1} (z-is)^{-k-l-1} e^{rz} dz, \quad (18)$$

где петля охватывает точку is и не содержит точки $-is$. Здесь $\arg(z-is)$ изменяется от $-\pi$ до π , а $\arg(z+is)$ для значений s , лежащих в первом квадранте, изменяется от π до π . Согласно Уиттекеру и Ватсону [9], имеем

$$\varphi_2(r, \varepsilon) = \frac{2\pi i e^{i\pi k}}{\Gamma(k+l+1)} (2is)^{-l-1} W_{k-l-\frac{1}{2}}(-2isr). \quad (19)$$

Вычисляя $\omega(\varepsilon) = r^{-2l} W[l_1, l_2]$, где через l_1, l_2 обозначены интегралы в (17), (18), получим

$$\omega(\varepsilon) = \frac{-2\pi i (2is)^{-2l-1} (1 - e^{2i\pi k})}{\Gamma(l-k+1)} \Gamma(-l-k). \quad (20)$$

Рассмотрим теперь функцию

$$\Phi(x, \varepsilon) = \frac{\varphi_2(r)}{\omega(\varepsilon)} \int_0^r \varphi_1(z) f(z) dz + \frac{\varphi_1(r)}{\omega(\varepsilon)} \int_r^\infty \varphi_2(z) f(z) dz. \quad (21)$$

Эта функция имеет полюсы в нулях функции $\omega(\varepsilon)$, т.е. в точках:

$$k_n = n_r + l + 1; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (22)$$

или

$$\varepsilon = \varepsilon_n = -\frac{1}{(n_r + l + 1)^2} = -\frac{1}{n^2}, \quad (23)$$

где n_r — радиальное квантовое число, n — главное квантовое число.

Далее,

$$\omega'(\varepsilon_n) = -\frac{8\pi^2 (n_r)!}{(n_r + 2l + 1)!} \frac{(n_r + l + 1)^{2l+4}}{2^{2l+3}}. \quad (24)$$

Имеем также при $\varepsilon = \varepsilon_n$

$$\begin{aligned} \varphi_1(r, \varepsilon_n) &= \varphi_2(r, \varepsilon_n) \\ &= r^{l+1} e^{-\frac{r}{n}} \frac{2\pi i (n_r)!}{[(n+l)!]^2} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{n} \right), \end{aligned} \quad (25)$$

где L_p^m — присоединенные полиномы Лежандра.

Значит, $\Phi(x, \varepsilon)$ при $\varepsilon = \varepsilon_n$ имеет вычет

$$\begin{aligned} &\frac{2^{2l+2} (n_r)!}{[(n+1)!]^3 n^{2l+4}} r^{l+1} e^{-\frac{r}{n}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{n} \right) \\ &\times \int_0^\infty z^{l+1} e^{-\frac{z}{n}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2z}{n} \right) f(z) dz. \end{aligned} \quad (26)$$

Сумма таких членов дает ту часть разложения, которая соответствует отрицательным точкам спектра [6]. Из (26) находим ортонормированную систему функций, по которой производится разложение

$$\begin{aligned} \psi_{nl}(r, \varepsilon_n) &= \frac{2^{l+1}}{n^{l+2}} \frac{[(n_r)!]^{1/2}}{[(n+l)!]^{3/2}} \\ &\times r^{l+1} e^{-\frac{r}{n}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{n} \right) = r R_{nl}, \end{aligned} \quad (27)$$

где R_{nl} — радиальные функции дискретного спектра в задаче об атоме водорода [2,3].

Запишем далее $\varphi_1(r, \varepsilon)$ в виде

$$\begin{aligned} \varphi_1(r, \varepsilon) = & r^{-l} \int_{-\infty}^{(-is+)} (z+is)^{k-l-1} (z-is)^{-k-l-1} e^{rz} dz \\ & + r^{-l} \int_{-\infty}^{(is+)} (z+is)^{k-l-1} (z-is)^{-k-l-1} e^{rz} dz, \end{aligned} \quad (28)$$

где в первом интеграле $\arg(z+is)$ изменяется от $-\pi$ до π ; $\arg(z-is)$ — от $-\pi$ до $-\pi$; во втором интеграле $\arg(z+is)$ изменяется от π до π , а $\arg(z-is)$ — от $-\pi$ до π ; второе слагаемое в (28) совпадает, таким образом, с $\varphi_2(x, \varepsilon)$.

Отметим, что при $\varepsilon = \varepsilon_n$ первый интеграл в (28) не имеет особой точки и обращается в нуль. Поэтому нельзя, вообще говоря, получать волновые функции непрерывного спектра подстановкой комплексного значения параметра ε в функции дискретного спектра [2,10]. Характерно при этом, что нормировочный интеграл, например, в [10] вычисляет для полной функции (28). Увеличивая во втором слагаемом в (28) $\arg s$ на π , находим

$$\varphi_1(r, \varepsilon) = \varphi_2(r, \varepsilon) + e^{2\pi i k} \varphi_2(r, \varepsilon) \quad (29)$$

в отличие от соотношения (25), где $\varphi_1(r, \varepsilon) = \varphi_2(r, \varepsilon)$ и, значит,

$$\omega(\varepsilon e^{2\pi i}) = -e^{-2\pi i k} \omega(\varepsilon). \quad (30)$$

Следовательно, для вещественных положительных ε

$$\frac{\varphi_2(r, \varepsilon)}{\omega(\varepsilon)} - \frac{\varphi_2(r, \varepsilon e^{2\pi i})}{\omega(\varepsilon e^{2\pi i})} = \frac{\varphi_1(r, \varepsilon)}{\omega(\varepsilon)}, \quad (31)$$

Поэтому

$$\text{Im } \Phi(x, \varepsilon) = \frac{\varphi_1(r, \varepsilon)}{2i\omega(\varepsilon)} \int_0^\infty \varphi_1(z, \varepsilon) f(z) dz, \quad (32)$$

где

$$i\omega(\varepsilon) = 2\pi(2s)^{-2l-1} \left(1 - e^{-\frac{2\pi}{s}}\right) \left[\prod_{m=1}^l (m^2 + 1/s^2) \right]^{-1}. \quad (32a)$$

Следовательно, та часть разложения, которая соответствует непрерывному спектру, имеет вид

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{\prod_{m=1}^l (m^2 + 1/s^2) (2s)^{2l+1}}{[1 - \exp(-2\pi/s)] s} \varphi_1(r, s^2) ds^2 \\ & \times \int_0^\infty \varphi_1(z, s^2) f(z) dz. \end{aligned} \quad (33)$$

Из (33) находим нормированные собственные функции, по которым производится разложение

$$\begin{aligned} \psi_l(r, s^2) = & r \frac{\sqrt{2}}{[1 - \exp(-2\pi/s)]^{1/2}} \\ & \times \prod_{m=1}^l (m^2 + 1/s^2)^{1/2} (2|s|r)^l e^{isr} \\ & \times F(-i/s + l + 1; 2l + 2; -2isr), \end{aligned} \quad (34)$$

где $F(\alpha, \beta, \gamma)$ — вырожденная гипергеометрическая функция.

Функция (34) опять множителем r отличается от радиальных волновых функций непрерывного спектра в задаче об атоме водорода [10].

Окончательно формула разложения функции $f(r) \in L^2([0, \infty); dr)$ имеет вид

$$f(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{nl} \psi_{nl}(r, \varepsilon) + \int_0^\infty a_l(s^2) \psi_l(r, s^2) ds^2 \quad (35)$$

и коэффициенты вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} a_{nl} = & \int_0^\infty f(r) \overline{\psi_{nl}}(r, \varepsilon) dr, \\ a_l(s^2) = & \int_0^\infty f(r) \overline{\psi_l}(r, s^2) dr, \end{aligned} \quad (36)$$

где чертой обозначено комплексное сопряжение.

Аналогичным образом можно получить [6], что разложение произвольной функции $g(\vartheta, \varphi) \in L^2(S^2; d\vartheta; d\varphi)$, где ϑ, φ — угловые координаты на поверхности сферы S^2 , имеет вид

$$g(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} b_{lm} \Theta_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (37)$$

$$\Theta_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\sin \vartheta} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (38)$$

где $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ — сферические гармоники [11], и коэффициенты b_{lm} вычисляются по формуле

$$b_{lm} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} g(\vartheta, \varphi) \overline{\Theta_{lm}}(\vartheta, \varphi) d\vartheta d\varphi. \quad (39)$$

Функция Θ_{lm} отличается от традиционно используемых множителем $\sqrt{\sin \vartheta}$. Стандартно используемое разложение имеет вид (см., например, [3, с. 42])

$$\begin{aligned} F(r, \vartheta, \varphi) = & \sum_{l,m} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \left\{ \sum_n C_{nlm} R_{nl}(r) \right. \\ & \left. + \int_0^\infty C_{slm} R_{sl}(r) ds^2 \right\}, \end{aligned} \quad (40)$$

где коэффициенты разложения вычисляются по формулам

$$C_{nlm} = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} F(r, \vartheta, \varphi) R_{nl}(r) Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi,$$

$$C_{slm} = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} F(r, \vartheta, \varphi) R_{sl}(r) Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (41)$$

Очевидная разница между разложениями Титчмарша и Бете–Солпитера состоит в том, что в первом случае якобиан преобразования разделяется симметрично между функциями разложения, а во втором стоит целиком только в выражении для коэффициентов. На самом деле разложения (40), (41) следуют из разложения Титчмарша, если учесть, что его функции образуют полную ортонормированную систему в пространстве $L^2([0, \infty); dr) \otimes L^2(S^2; d\vartheta, d\varphi)$, а стандартные функции в пространстве $L^2(R^3; dx dy dz) = L^2(R^3; r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi)$. В свою очередь эта разница приводит к тому, что решение уравнения Шредингера $\psi(r, \vartheta, \varphi)$, найденное в сферических координатах, не имеет прямого физического смысла плотности вероятности, а функции Титчмарша таковыми являются, так как, например, распределение вероятностей по радиальной координате $w(r) = r^2 R_{nl}^2 = \psi_{nl}^2$. Последнее свойство есть тривиальное следствие общих теорем теории вероятностей о пересчете плотности вероятности в криволинейные координаты [12].

Квантование натуральных систем

Проблема квантования заключается в построении оператора Гамильтона $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t)$ по c -числовой функции Гамильтона классической задачи, которая предполагается известной. Эта замена само по себе не является тривиальной и однозначной процедурой, особенно в криволинейных и обобщенных координатах, ибо существует много способов выбрать вид оператора \hat{p} и порядок расстановки операторов \hat{q} и \hat{p} в $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t)$ [13,14].

Рассмотрим натуральную механическую систему — тройку (M, T, V) , где M — гладкое многообразие (пространство положений), T — риманова метрика на M (положительно определенная квадратичная форма — кинетическая энергия), V — гладкая функция на M (потенциал силового поля) [15]. Движение такой системы — гладкие отображения $q: R^1 \rightarrow M$, являющиеся экстремальными функционала действия с функцией Лагранжа $L = T - V$. В локальных координатах функция Лагранжа имеет вид

$$L = \frac{1}{2} g_{ik} \dot{q}^i \dot{q}^k - V(q), \quad (42)$$

так что функция Гамильтона, соответствующая (42), равна

$$H = \frac{1}{2} g^{ik} \pi_i \pi_k + V(q), \quad (43)$$

где $\pi_i = g_{ik} \dot{q}^k$ — обобщенный импульс.

Локальные координаты q^i, π_i являются каноническими на кокасательном расслоении T^*M гладкого многообразия M . В случае нетривиальных значений $g_{ik} \neq \delta_{ik}$ традиционная схема квантования становится существенно неоднозначной. Однако вышеизложенные результаты позволяют сделать эту процедуру вполне определенной. Действительно, традиционная схема решения квантовых задач в криволинейных координатах выглядит следующим образом. Сначала проводится квантование классической системы в декартовых координатах, в результате чего (в шредингеровском координатном представлении) кинетической энергии $T = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m$ сопоставляется оператор $\hat{T} = -\hbar^2 \Delta/2m$ (Δ — оператор Лапласа–Бельтрами, определенный на касательном расслоении гладкого многообразия M), а затем производится пересчет в криволинейные координаты q . Как отмечено в предыдущем разделе, получающаяся волновая функция $\psi(q) = \psi(x(q))$ (x — совокупность декартовых координат) не является амплитудой вероятности и соответственно не описывает никаких физических состояний.

Учитывая разложение Титчмарша, можно поступить другим образом — вывести, исходя из предыдущей схемы, уравнение для амплитуды вероятности $\tilde{\psi}(q)$ сразу. Очевидно, что функции Титчмарша $\tilde{\psi}(q)$ и $\psi(q)$ связаны соотношением $\tilde{\psi}(q) = g^{1/4} \psi(x(q))$, где $g = \det|g_{ik}|$. Поступая таким образом, придем к уравнению для $\tilde{\psi}(q)$

$$\left[\left(g^{-1/4} \frac{\partial}{\partial q^i} g^{1/4} \right) g^{ik} \left(g^{1/4} \frac{\partial}{\partial q^k} g^{-1/4} \right) \tilde{\psi} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(q)] \right] \tilde{\psi} = 0 \quad (44)$$

или

$$\tilde{\Delta} \tilde{\psi}(q) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(q)] \tilde{\psi}(q) = 0, \quad (45)$$

где $\tilde{\Delta} = g^{1/4} \Delta g^{-1/4}$.

Симметрия (самосопряженность) оператора $\tilde{\Delta}$ относительно скалярного произведения $(\tilde{\varphi}, \tilde{\psi}) = \int \overline{\tilde{\varphi}(q)} \tilde{\psi}(q) dq$ (черта означает комплексное сопряжение, $dq = dq^1 \dots dq^n$) очевидна из цепочки равенств $(\tilde{\Delta} \tilde{\varphi}, \tilde{\psi}) = (\Delta \varphi, \psi) = (\varphi, \Delta \psi) = (\tilde{\varphi}, \tilde{\Delta} \tilde{\psi})$. Введем далее операторы проекций обобщенного импульса

$$\hat{\pi}_i = -i\hbar g^{-1/4} \frac{\partial}{\partial q^i} g^{1/4},$$

удовлетворяющие коммутационным соотношениям $[\hat{\pi}_i, q^i] = -i\hbar \delta_i^i$, $[\pi_i, \pi_k] = 0$. При этом сопряженный оператор

$$\hat{\pi}_i^* = +i\hbar g^{1/4} \frac{\partial}{\partial q^i} g^{-1/4},$$

так что оператор кинетической энергии $T = -\hbar^2 \pi^* \pi / 2m$.

Перестановочные соотношения $[\hat{\pi}_i, q^i] = -i\hbar \delta_i^i$, $[\pi_i, \pi_k] = 0$, $[q^i, q^k] = 0$ алгебраически тождественны обычным перестановочным соотношениям Гейзенберга. Однако операторы $\hat{\pi}_i, q^k$ определяют представление унитарно

не эквивалентное представлению Шредингера. Теоремы единственности Диксмые и фон Неймана–Стоуна [16] в этом случае не имеют места, так как операторы $\hat{\pi}_i$ не симметрические.

Оператор обобщенного импульса, соответствующий радиальной координате (оператор радиального импульса), имеет вид $\hat{\pi}_r = \partial/\partial r + (n-1)/2r$, где n — размерность многообразия M , с областью определения $D(\hat{\pi}_r) = \{\psi \in L^2((0, \infty), dr); (\psi' + (n-1)/2r) \in L^2((0, \infty), dr)\}$. Этот результат совпадает с соотношением (7.8.2) из [17], где вид оператора радиального импульса постулирован. Интересно, что только при $n = 3$ квадрат оператора радиального импульса совпадает с зависящей от r частью оператора Лапласа–Бельтрами, умноженной на $(-\hbar^2)$.

Уравнение (45) содержит возможности обобщений. Действительно, с точки зрения теории многообразий даже плоское пространство вовсе не просто: по сравнению с обычным дифференцируемым многообразием оно имеет гораздо более богатую структуру, ибо на нем задана аффинная связность. В декартовой системе координат присутствие этой связности не ощущается, так как символы Кристоффеля обращаются в нуль. Однако если физические законы сформулированы в плоском пространстве на языке криволинейных координат, то связность становится наблюдаемой. В большинстве так записанных законов входят символы Кристоффеля, а не тензор Римана, следовательно, их уравнения выглядят одинаково независимо от того, плоско многообразие или искривлено. Таким образом, естественно постулировать, что форма уравнения Шредингера (45) для искривленных многообразий, на которых не существует глобальной декартовой системы координат, та же, что и в криволинейных координатах в плоском многообразии. Этот постулат аналог принципа минимальной связи в общей теории относительности [18].

Кроме того, используя методы, развитые Ю.П. Гончаровым (см., например, [19,20]), можно обобщить уравнение (45) на многообразия с нетривиальной топологией.

Задача квантования натуральных систем (квантование классической системы, заданной на неплоском конфигурационном пространстве) была анонсирована еще в первой работе Э. Шредингера, однако решение проблемы было представлено только в декартовых координатах.

Широкое обсуждение квантовой теории на римановых многообразиях в математических работах началось почти сразу после создания современной квантовой механики [21,22]. Выражение для обобщенного интеграла, полученное в настоящей работе, совпадает с найденным в ВКБ приближении в [23]. Точный оператор Шредингера имеет вид $-\hbar^2/2m(\Delta - \alpha R)$, где Δ — оператор Лапласа–Бельтрами, R — скалярная кривизна, $\alpha = 1/3$. Значение постоянной α существенно зависит от выбранной схемы квантования: в схеме Лю и Кьяна [24] $\alpha = 1/8$, Андерхилл [25] нашел $\alpha = 1/2$, в схеме геометрического квантования [26] было найдено значение $\alpha = 1/6$. Вудхаус [27], Ву [28] и Эммрих [29] получили значение $\alpha = 0$.

Все указанные операторы Шредингера в плоском пространстве в криволинейных координатах сводятся к оператору Лапласа–Бельтрами ($R = 0$). В то же время, как очевидно из результатов Титчмарша и уравнения (44), в этом случае существует ненулевая поправка к оператору Лапласа, обращающаяся в нуль только в декартовой системе координат. Характерно, что в отличие от настоящей работы, где уравнение (44) получено элементарным путем только из физического смысла волновой функции как амплитуды вероятности, все указанные работы имеют чисто математический характер и достаточно сложны.

Список литературы

- [1] Стеклов В.А. Основные задачи математической физики. М.: Наука, 1983. 432 с.
- [2] Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: ГИФМЛ, 1960. 562 с.
- [3] Фок В.А. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976. 376 с.
- [4] Данфорд Н., Шварц. Линейные операторы. Т. 2. Спектральная теория. М.: Мир, 1966. 1063 с.
- [5] Като Т. Теория возмущения линейных операторов. М.: Мир, 1972. 740 с.
- [6] Титчмарш Э. Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка. Т. 1. М.: ИЛ, 1960. 276 с.
- [7] Батыгин В.В., Бухвалов А.В. Вероятностные основы квантовой механики. Гильбертово пространство как пространство состояний. Л.: Изд-во ЛПИ им. М.И. Калинина, 1982. 80 с.
- [8] Березин Ф.А., Шубин М.А. Уравнение Шредингера. М.: Изд-во МГУ, 1983. 392 с.
- [9] Уиттекер Э.Т., Ватсон Дж.Н. Курс современного анализа. Т. 2. М.: ГИФМЛ, 1963. 515 с.
- [10] Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. М.: ГИФМЛ, 1963. 702 с.
- [11] Лебедев Н.Н. Специальные функции и их приложения. М.: ГИФМЛ, 1963. 358 с.
- [12] Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Т. 2. М.: Мир, 1985. 751 с.
- [13] Эмх Ж. Алгебраические методы в статистической механике и квантовой теории поля. М.: Мир, 1976. 423 с.
- [14] Березин Ф.А. Квантование // Изв. АН СССР. Сер. математ. 1974. Т. 38. № 5. С. 1116–1179.
- [15] Козлов В.В. Симметрия, топология и резонансы в квантовой механике. Изд-во Удмуртского гос. университета, 1995. 429 с.
- [16] Харт Н. Геометрическое квантование в действии. М.: Мир, 1985. 343 с.
- [17] Рихтмайер Р. Принципы современной математической физики. Т. 2. М.: Мир, 1982. 381 с.
- [18] Шутц Б. Геометрические методы математической физики. М.: Мир, 1984. 303 с.
- [19] Goncharov Yu. // Mod. Phys. Lett. A. 1994. Vol. 9. N 34. P. 3175–3183.
- [20] Goncharov Yu. // Phys. Lett. 1997. Vol. B398. P. 32–40.
- [21] Dokew J.S. Functional Integration and Its Application / Ed. A.M. Arthur. Oxford: Clarendon Press, 1974. P. 34–52.

- [22] *Landsman N.P.* Mathematical Topics Between Classical and Quantum Mechanics. New York: Springer Verlag, 1998. 529 c.
- [23] *Landsman N.P.* // J. Geom. Phys. N 12. P. 93–132.
- [24] *Liu Z.-J., Qian M.* // Trans. Amer. Math. Soc. 1992. Vol. 331. P. 321–333.
- [25] *Underhill J.* // J. Math. Phys. 1978. Vol. 19. P. 1932–1935.
- [26] *Smatyki J.* Geometric Quantization and Quantum Mechanics. Berlin: Springer Verlag, 1980. 407 p.
- [27] *Woodhouse N.M.J.* Geometric Quantization. 2nd ed. Oxford: Clarendon Press, 1992. 531 p.
- [28] *Wu Y.* // J. Math. Phys. 1998. Vol. 39. P. 867–875.
- [29] *Emmrich C.* // Commun. Math. Phys. 1993. Vol. 151. P. 515–530.