

ИОГАНН фон НЕЙМАН

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Книга Неймана является первым и до сих пор единственным доведенным до конца опытом изложения аппарата квантовой механики с той последовательностью и строгостью, которой требуют обычно при построении математической теории. Поэтому только существованию этой книги мы обязаны нашей уверенностью в том, что квантовая механика представляет собой логически непротиворечивую схему. В частности, именно в этой книге изложено доказательство знаменитой теоремы о невозможности ввести «скрытые параметры» без кардинальной перестройки всей квантовой механики.

Таким образом, книга будет чрезвычайно ценной для всех глубоко изучающих квантовую механику, в первую очередь для студентов старших курсов и аспирантов, как физиков, так и математиков, а также для научных работников этих же дисциплин.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора перевода	7	8. Предварительное рассмотрение проблемы собственных значений	91
Введение	9	9 Отступление: 0 существовании и единственности решения проблемы собственных значений	111
Глава I. Вводные замечания	12	10. Коммутирующие операторы	129
1. Возникновение теории преобразований	12	11. Шпур	136
2. Первоначальные формулировки квантовой механики	14	Глава III. Кvantovomehanicheskaya statistika	148
3. Эквивалентность двух теорий: Теория преобразований	21	1. Статистические утверждения квантовой механики	148
4. Эквивалентность двух теорий: Гильбертово пространство	29	2. Статистическая интерпретация	155
Глава II. Общие свойства абстрактного гильбертова пространства	34	3. Одновременная измеримость и измеримость вообще	158
1. Определение абстрактного пространства Гильberta	34	4. Соотношения неопределенности	172
2. Геометрия гильбертова пространства	42	5. Проекционные операторы как утверждения	184
3. Отступление: Об условиях A.—E.	50	6. Теория излучения	189
4. Замкнутые линейные многообразия	60	Глава IV. Дедуктивное построение теории	221
5. Операторы в гильбертовом пространстве	69	1. Принципиальное обоснование статистической теории	221
6. Проблема собственных значений	80	2. Доказательство статистических формул	234
7. Продолжение	83	3. Выводы из экспериментов	244
		Глава V. Общее рассмотрение	258

1. Измерение и обратимость	258	теоремы в новой механике (2s. f. Phys. 57, 30-70 (1929))	
2. Термодинамические вопросы	266	Введение	325
3. Вопросы обратимости и равновесия	281	I. Квантовомеханическая	337
4. Макроскопическое измерение	293	формулировка основных понятий статистической механики Гиббса	
Глава VI. Процесс измерения	306	II. Проведение доказательств	344
1. Постановка задачи	306	III. Обсуждение результатов	353
2. Составные системы	309	Приложение	357
8. Обсуждение процесса измерения	319		
Дополнение. Доказательство эргодической теоремы и Н-	325		

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

Предлагаемая вниманию читателя монография одного из крупнейших математиков нашего времени, недавно скончавшегося Иоганна фон Неймана посвящена вопросам математического обоснования квантовой механики. Основная заслуга автора состоит в том, что он придал квантовой механике логически последовательную форму, излагая ее как единую теорию, в которой не остается невыясненным ни один принципиальный момент.

Главный математический аппарат его исследований опирается на теорию гильбертова пространства и спектральную теорию самосопряженных операторов. Многие глубокие положения этих теорий были разработаны самим автором в связи с потребностями математического обоснования квантовой механики. Мы имеем здесь прежде всего в виду спектральную теорию неограниченных самосопряженных операторов, действующих в абстрактном гильбертовом пространстве. Значение этих результатов далеко выходит за рамки потребностей квантовой механики; они широко используются в современной математике. Следует подчеркнуть, что в этой книге впервые дано систематическое изложение теории абстрактного гильбертова пространства.

Отмеченная основная направленность книги определила отсутствие в ней каких бы то ни было приложений квантовой механики к физическим задачам, из которых в основном и состоят обычные учебники (например, такие, как книги Шиффа, Зоммерфельда и др.). Единственное исключение составляют изложение вторичного квантования и вывод формул для вероятностей переходов, проведенные в разделе III.6 не в общей абстрактной форме, а для физически совершенно реального случая электромагнитного поля. Зато все величины и понятия, которыми оперирует квантовая механика, обосновываются совершенно точно, все необходимые связи между ними устанавливаются в виде математических теорем, опирающихся на изложенную во второй главе общую математическую теорию. В этом смысле рядом с изложением фон Неймана можно было бы поставить

лишь книгу Дирака. Однако при всей логической красоте и стройности его изложения Дирак позволяет себе использовать понятия, математическая природа которых оставалась в то время невыясненной (Δ -функция). Только теперь мы знаем, что Δ -функция, как и ряд других подобных математических объектов, которые используются физиками, получила математически корректное обоснование в развивающейся за последние годы теории обобщенных функций (С. Л. Соболев, Л. Шварц и др.).

Книга содержит важные оригинальные физические результаты. Во второй части книги автор уделяет много внимания статистическим аспектам квантовой механики как с точки зрения внутренне присущей ей статистической природы, так и с точки зрения квантовомеханического определения понятий статистической физики. Первое заставляет автора последовательно рассматривать не только чистые состояния, но и смеси, в связи с чем он вводит понятие матрицы плотности, оказавшееся чрезвычайно плодотворным в дальнейшем развитии теории. Последнее побуждает к чрезвычайно тщательному анализу макроскопического измерения и введению специальных операторов макроскопических величин и приводит к весьма важному макроскопическому определению энтропии. Наконец, в книге приводится принадлежащее автору доказательство эргодической теоремы в квантовой статистике. В силу важности этого вопроса мы решили добавить к книге перевод, к сожалению мало известной, оригинальной статьи автора.

Стиль Неймана весьма своеобразен и не всегда ригорически следует правилам школьной грамматики. Переводчикам книги М. К. Поливанову и Б. М. Степанову пришлось немало потрудиться, чтобы найти достойный русский эквивалент. Необычно оформление книги — большая часть формул не вынесена в красные строки, а располагается непосредственно внутри текста. Отсутствует и нумерация формул в обычном смысле — только самые важные выражения получают свои специальные названия. Мы пытались сохранить эту особенность, насколько это было возможно по условиям печати.

Н. Н. Боголюбов

Август 1964 г.

ВВЕДЕНИЕ

Предмет этой книги составляет единое и, насколько это возможно и уместно, математически безукоризненное изложение новой квантовой механики, которая за последние годы достигла, в ее существенных частях, вероятно, уже окончательной формы в так называемой «теории преобразований». При этом основной упор сделан на общие и принципиальные вопросы, возникающие в связи с этой теорией. В частности, надо будет подробно исследовать сложные и зачастую все еще не проясненные до конца вопросы интерпретации. Особенно важно, в связи с этим, отношение квантовой механики к статистике и к классической статистической механике. Что же касается разъяснения применений квантовомеханических методов к частным задачам, равно как и изложения отдельных более специальных теорий, ответвляющихся от общей теории, то мы будем, как правило, отвлекаться от них — по крайней мере насколько это возможно без угрозы пониманию общих связей. Это представляется тем более позовительным, что существует или находится в стадии публикации много превосходных изложений подобных вещей¹⁾.

С другой стороны, мы включим изложение потребного для целей этой теории математического аппарата — теории гильбертова пространства и так называемых эрмитовых операторов в нем. При этом

¹⁾ Это, среди прочих, следующие исчерпывающие руководства: Sommerfeld, Приложение к Atombau und Spektrallinien, Braunschweig, 1928 (русский перевод: ОНТИ, М. — Л. (1938)); Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik, Leipzig, 1928 (русский перевод: ОНТИ ДНТВУ, Харьков (1938)); Френкель, Волновая механика, 1929 (нем.), 1934 (русск.); Born und Jordan, Elementare Quantenmechanik, Berlin, 1930; Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, Oxford, at the Clarendon Press (1930) (русский перевод: ГГТИ, М. — Л. (1932)).

Из более современных книг на русском языке можно привести: Блохинцев, Основы квантовой механики, «Высшая школа», 1963. Дирак, Принципы квантовой механики (перевод с 4-го английского издания), Физматгиз, 1960. Зоммерфельд, Строение атома и спектры, т. II (перевод с немецкого издания 1951 г.), Гостехиздат, 1956. Ландау и Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963. Шифф, Квантовая механика (перевод со 2-го английского издания), ИЛ, 1957. (Прим. ред.)

потребуется подробно войти и в рассмотрение неограниченных операторов, т. е. расширить теорию (созданную Гильбертом и Хеллингером, Рисом, Шмидтом, Теплицем) за пределы ее классического объема. По поводу метода изложения, принятого здесь, можно заметить следующее: вычисления будут, как правило, производиться с самими операторами (представляющими физические величины), а не с матрицами, которые получаются из них лишь после введения в пространстве Гильberta какой-либо (специальной или произвольной) системы координат. Этот «бескоординатный», т. е. инвариантный и в сильной мере геометризированный способ изложения связан с заметными формальными преимуществами.

Дирак в ряде статей и недавно опубликованной книге²⁾ дал столь краткое и элегантное изложение квантовой механики, также имеющее инвариантный характер, что оно вряд ли может быть пре-взойдено в этом смысле. Поэтому, пожалуй, будет уместным привести здесь некоторые соображения в пользу нашего метода, который существенно отличается от метода Дирака.

Упомянутый, перешедший сейчас вследствие своей прозрачности и элегантности в большую часть квантовомеханической литературы, метод Дирака ни в какой мере не сможет удовлетворить требованиям математической строгости — не сможет, даже если и снизить их как-то естественно и разумно до, впрочем, в теоретической физике обычного уровня. Так, например, этот метод последовательно цепляется за ту фикцию, что каждый самосопряженный оператор можно привести к диагональному виду, что, для операторов, для которых это на самом деле не так, приводит к необходимости вводить «несобственные» функции с самопротиворечивыми свойствами. Такое включение математических «фикций» оказывается иногда неизбежным, даже и в случаях, когда речь идет лишь о подсчете результата наглядно определимого опыта. Это не было бы возражением, будь образование этих, недопустимых в сегодняшних рамках анализа, понятий действительно существенно для новой физической теории. Подобно тому как ньютона механика сразу принесла с собой возникновение в своей тогдашней форме безусловно самопротиворечивого анализа бесконечно малых, так и квантовая механика могла бы подсказать новое построение нашего «анализа бесконечно многих переменных», т. е. вызвать изменение математического аппарата, а не физической теории. Это, однако, ни в коей мере не так, и, напротив, будет показано, что квантовомеханическую «теорию преобразований» можно столь же ясно и единообразно обосновать и математически безуоризненным образом. При этом надо подчерк-

²⁾ Ср. Proc. Roy. Soc. London, vol. 109 (1925) и следующие выпуски, в особенности 113 (1926). Независимо от Дирака Йордан (P. Jordan, Z. Physik, Bd. 40 (1926)) и Лондон (F. London, Z. Physik, Bd. 40 (1926)) предложили аналогичное обоснование теории.

нуть, что корректное построение отнюдь не состоит в математическом уточнении и разъяснении метода Дирака, но требует с самого начала отличающегося приема — именно, опирается на гильбертову спектральную теорию операторов.

При анализе принципиальных вопросов будет, в частности, показано, как статистические формулы квантовой механики могут быть получены из небольшого числа фундаментальных качественных допущений. Далее будет подробно обсужден вопрос о том, можно ли свести статистический характер квантовой механики к некоторой неоднозначности (т. е. неполноте) в нашем описании природы — ведь такое объяснение лучше всего отвечало бы тому общему принципу, что всякое вероятностное суждение есть следствие неполноты наших знаний. Такое объяснение с помощью «скрытых параметров», равно как и родственное ему другое, приписывающее «скрытые параметры» наблюдателю, а не наблюдаемой системе, предлагалось не однажды. Между тем оказывается, что это едва ли может удастся удовлетворительным образом, или, более точно, — такое объяснение несовместимо с некоторыми основными качественными постулатами квантовой механики³⁾.

Будет также исследовано отношение этой статистики к термодинамике. Подробное рассмотрение показывает, что известные трудности классической механики, связанные с «предположением о беспорядке», требуемым для обоснования термодинамики, могут быть здесь устранены⁴⁾.

³⁾ Ср. гл. IV и гл. VI, 3.

⁴⁾ Ср. гл. V и Дополнение.

ГЛАВА I

ВВОДНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

1. Возникновение теории преобразований

Здесь не место указывать на огромные успехи, достигнутые квантовой теорией в период с 1900 по 1925 гг. в ходе развития, над которым господствуют имена Планка, Эйнштейна и Бора⁵⁾.

К концу этого процесса развития представилось ясным и не оставляющим никаких сомнений, что все элементарные процессы, т. е. все происходящее в атомно-молекулярном масштабе, управляются «прерывными» законами квантов. Почти для всех задач имелись и количественные квантово-теоретические методы, которые большей частью вели к результатам, более или менее хорошо согласующимся с опытом. И что имело наибольшее принципиальное значение — само мышление теоретико-физического исследования восприняло ту идею, что господствующий во всем доступном восприятию макрокосмическом мире принцип непрерывности («*natura non facit saltus*») возникает лишь в результате процесса усреднения в по существу своему прерывном мире — благодаря тому, что человек обычно сразу аппроприирует только сумму многих квадрильонов элементарных процессов, так что истинная природа единичного процесса оказывается полностью завуалированной все нивелирующим законом больших чисел.

Тем не менее к этому времени не существовало математико-физической системы квантовой теории, которая обнимала бы единым образом все дотоле известное, не говоря уже о такой, которая одновременно включала бы в себя монументальную замкнутость взорванной квантовыми явлениями системы механика — электродина-

⁵⁾ Его основными этапами были: открытие Планком квантовых законов для случая «черного» равновесного излучения (ср., например, изложение Planck'a в его книге *Wärmestrahlung*, Leipzig, 1906; доказательство корпускулярной природы света (теории световых квантов) Einstein'ом (Ann. d. Physik [4], Bd. 17 (1905)), представившее первый пример дуализма волна — частица, который, как мы теперь знаем, господствует во всей микроскопической физике; перенос этих двух групп закономерностей на модель атома, выполненный Bohr'ом, Phil. Mag. 26 (1913); Z. Physik 6 (1920).

ника — теория относительности. Вопреки несомненно оправданному притязанию квантовой теории на универсальность, ей недоставало необходимого для этого формального и идеологического аппарата; она представляла собою нелегкую для распутывания смесь существенно различных, независимых, разнородных и частью противоречащих друг другу допущений и предписаний. Самыми разительными пунктами были: принцип соответствия, наполовину принадлежащий классической механике и электродинамике, но играющий решающую роль в окончательном прояснении положения вещей, самопротиворечивая двойственность природы света (волны и частицы — ср. прим.⁵⁾ и прим.¹⁴⁸⁾ на стр. 211) и, наконец, существование неквантованных (апериодических) и квантованных (периодических или условно периодических) движений^{6).}

Решение принес тысяча девятьсот двадцать пятый год. На основе предложенного Гайзенбергом подхода Борну, Гайзенбергу, Йордану и, несколько позже, Дираку удалось выстроить новую систему квантовой теории, первую замкнутую систему квантовой теории, которую получила физика. Лишь чуть позже Шредингер из совершенно другого исходного пункта нашел «волновую механику», которая к тому же и, как вскоре выяснилось, была (по крайней мере в математическом смысле, ср. I. 3, 4) эквивалентна системе Гайзенберга, Борна, Йордана и Дирака^{7).}

На основе борновского статистического толкования квантово-теоретического описания природы⁸⁾ Дирак и Йордан⁹⁾ смогли сплавить обе теории в единую «теорию преобразований», в которой обе эти теории объединяются, дополняя друг друга, и в которой оказалось возможным математически особенно простое понимание физических вопросов.

Можно еще упомянуть (хотя это и не относится собственно к нашему предмету), что теперь, после того как Гаудсмит и Уленбек открыли еще магнитный момент и спин электрона, исчезли почти

⁶⁾ Благодаря Эпштейну и Зоммерфельду стали известны добавляющиеся к механическим законам квантовые законы для условно-периодического движения (ср., например, Sommerfeld, Atombau und Spektrallinien, 4 Aufl. Braunschweig, 1924, русск. перевод: Зоммерфельд, Строение атома и спектры, М.—Л., ГНТИ, 1926, а также перевод с издания 1951 г., т. 1, М., Гостехиздат, 1956). Напротив, было твердо установлено, что свободно движущаяся материальная точка или планета на гиперболической орбите (в отличие от эллиптических орбит) «неквантованы». Читатель найдет полное изложение этой фазы развития квантовой теории в книгах: Reich, Die Quantentheorie, ihre Ursprung und ihre Entwicklung, Berlin, 1921 или Landé, Fortschritte der Quantentheorie, Dresden, 1922.

⁷⁾ Это было доказано Schrödinger'ом, Ann. Physik [4] 79 (1926).

⁸⁾ Z. Physik, Bd. 37 (1926).

⁹⁾ Ср. прим.²⁾ на стр. 10 и также книгу: Schrödinger, Abhandlungen zur Wellenmechanik, Leipzig, 1928.

все трудности первоначальной квантовой теории, так что сегодня мы обладаем безукоризненной системой механики. Правда, упомянутое ранее великое единство с электродинамикой и теорией относительности еще не восстановлено, однако, по крайней мере, есть универсально справедливая механика, в которую квантовые закономерности входят с естественной необходимостью и которая удовлетворительно объясняет большую часть наших опытов¹⁰⁾.

2. Первоначальные формулировки квантовой механики

В целях предварительной ориентировки расскажем кратко, как принципиально ставится задача в «матричной механике» Гайзенберга — Борна — Йордана и в «волновой механике» Шредингера.

В обеих теориях сперва задается классическая механическая задача, характеризуемая гамильтоновой функцией $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$. (Это означает, как известно, — детальнее смотри в учебниках механики — следующее:

Пусть система имеет k степеней свободы, т. е. ее состояние в каждый момент фиксируется заданием численных значений k координат q_1, \dots, q_k . Ее энергия есть заданная функция координат и их производных по времени

$$E = L(q_1, \dots, q_k, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k)$$

и именно, как правило, квадратичная функция производных $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$. С помощью соотношений

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1}, \dots, p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$$

для координат q_1, \dots, q_k вводятся «сопряженные импульсы» p_1, \dots, p_k , которые в случае сделанного выше предположения зависят от q_1, \dots, q_k линейно. Во всяком случае можно исключить $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$ из L с помощью p_1, \dots, p_k , так что будет

$$E = L(q_1, \dots, q_k, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k) = H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k).$$

¹⁰⁾ Современное положение вещей можно охарактеризовать тем, что теория приводит к полному успеху, пока она имеет дело с отдельными электронами или с электронными оболочками атомов или молекул, а именно с электростатическими силами, равно как и с электромагнитными процессами при испускании, распространении и преобразовании света. Напротив, кажется, что в проблемах атомного ядра и во всех попытках установить общую и релятивистскую теорию электромагнетизма теория, несмотря на значительные успехи в решении частных задач, всегда ведет к огромным трудностям, которые вряд ли удастся преодолеть без введения существенно новых идей.

Эта H и есть гамильтонова функция.) В обеих теориях мы хотели бы теперь узнать, исходя из этой гамильтоновой функции, возможно больше об истинном, т. е. квантовом, поведении этой системы¹¹⁾ — прежде всего определить возможные энергетические уровни, затем найти относящиеся к ним «стационарные состояния», посчитать «вероятности переходов» между ними и т. д.¹²⁾.

Наставление, предлагаемое для решения этой задачи матричной теорией, состоит в следующем: надо найти систему $2k$ матриц $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ ¹³⁾, которые, во-первых, удовлетворяют условиям

$$\begin{aligned} Q_m Q_n - Q_n Q_m &= 0, \quad P_m P_n - P_n P_m = 0, \\ P_m Q_n - Q_n P_m &= \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{при } m \neq n, \\ \frac{\hbar}{2\pi i} 1 & \text{при } m = n \end{array} \right\} \quad (m, n = 1, \dots, k) \end{aligned}$$

¹¹⁾ Движение по классической механике, как известно, полностью определяется гамильтоновой функцией, поскольку она дает нам уравнения движения

$$\dot{q}_l = \frac{\partial H}{\partial p_l}, \quad \dot{p}_l = -\frac{\partial H}{\partial q_l} \quad (l = 1, \dots, k).$$

До открытия квантовой механики пытались схватить квантовые явления, сохранив эти уравнения движения и лишь налагая дополнительные квантовые условия (ср. прим. ⁶⁾ на стр. 13). Уравнения движения определяли для каждого, заданного в момент $t = 0$, набора значений $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$ дальнейшее развитие со временем, «орбиту» системы в $2k$ -мерном «фазовом пространстве» $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$. Поэтому всякое дополнительное условие оказывается приводящим к ограничению всех возможных начальных значений (орбит) определенной подсистемой. (Соответственно малому числу допустимых орбит будут возможны лишь некоторые уровни энергии.) Хотя квантовая механика и порвала полностью с этим приемом, все-таки ясно, что функция Гамильтона должна и в ней играть большую роль. В самом деле, весь наш опыт доказывает справедливость боровского принципа соответствия, который утверждает, что квантовая теория должна давать те же результаты, что и классическая механика в так называемом пределе больших квантовых чисел.

¹²⁾ Три последних понятия заимствованы из доквантовомеханического, развитого преимущественно Бором, круга идей теории квант. Позже мы еще детально проанализируем их с точки зрения квантовой механики (ср. относящуюся сюда диракову теорию излучения, изложенную в III. 6). Их историческое развитие можно проследить по работам Бора относительно структуры атома, опубликованным с 1913 по 1916 г.

¹³⁾ Как показывает более детальный математический анализ, эта задача необходимо приводит к бесконечным матрицам. Мы не будем здесь входить в детали свойств этих матриц, поскольку они будут рассмотрены позже во всей подробности. Пока достаточно знать, что формальные алгебраические операции с этими матрицами следует понимать в смысле известных правил матричного сложения и умножения. В частности, под 0 и 1 мы понимаем нулевую и единичную матрицы (со всеми элементами, тождественно равными нулю, и с элементами, равными единице на главной диагонали, и остальными нулевыми соответственно).

и для которых, во-вторых, матрица

$$W = H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$$

становится диагональной.

Мы не будем здесь входить в детали происхождения этих уравнений, в особенности первой группы — так называемых «правил коммутации», которые определяют все некоммутативное матричное исчисление в этой теории. Читатель найдет исчерпывающее изложение этого предмета в работах, цитированных в прим.¹⁾ (стр. 9). Величина h — это планковский квант действия. Диагональные элементы W , пусть w_1, w_2, \dots , будут тогда различными возможными уровнями энергии системы. Элементы матриц Q_1, \dots, Q_k — $q_{mn}^{(1)}, \dots, q_{mn}^{(k)}$ известным образом определяют вероятности перехода системы (из состояния m с энергией w_m в состояние n с энергией w_n , $w_m > w_n$) и испускаемое при этом излучение.

Вдобавок следует заметить, что матрица

$$W = H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$$

не определяется полностью набором $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ и гамильтоновой функцией $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ классической механики, поскольку Q_l и P_l не коммутируют между собой (при умножении), в то время как в случае классической механики было бы совершенно бессмысленным различать между, скажем, $p_1 q_1$ и $q_1 p_1$ в $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$. Поэтому надо еще установить в H порядок множителей q_l и p_l в дополнение к классическому смыслу этого выражения в отдельных членах. В общем эта процедура не проведена, но для важнейших частных случаев известны целесообразные нормировки. (В простейшем случае, когда рассматриваемая система состоит из v частиц и, следовательно, имеет $k = 3v$ координат q_1, \dots, q_{3v} , — скажем так, что $q_{3\mu-2}, q_{3\mu-1}, q_{3\mu}$ суть три декартовых координаты μ -й частицы, $\mu = 1, \dots, v$, — в которых взаимодействие этих частиц определяется потенциальной энергией $V(q_1, \dots, q_{3v})$, вообще не возникает неоднозначностей такого рода. Классической функцией Гамильтона будет тогда

$$H(q_1, \dots, q_{3v}, p_1, \dots, p_{3v}) =$$

$$= \sum_{\mu=1}^v \frac{1}{2m_{\mu}} (p_{3\mu-2}^2 + p_{3\mu-1}^2 + p_{3\mu}^2) + V(q_1, \dots, q_{3v}),$$

где m_{μ} — масса μ -й частицы, а $p_{3\mu-2}, p_{3\mu-1}, p_{3\mu}$ — компоненты ее импульса. Что будет означать это после подстановки матриц $Q_1, \dots, Q_{3v}, P_1, \dots, P_{3v}$, совершенно ясно. В частности, не возникает никаких затруднений с потенциальной энергией, поскольку все Q_1, \dots, Q_{3v} между собою коммутируют.) Существенно, что дозволены только

эрмитовы матрицы, т. е. такие матрицы $A = \{a_{mn}\}$, для которых тождественно выполняется $a_{mn} = \bar{a}_{nm}$ (элементы a_{mn} могут быть комплексными!). Отсюда $H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ должна быть эрмитовой, если эрмитовы все $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$, что вносит определенное ограничение в упомянутую задачу определения правильного порядка сомножителей, ни в коей мере недостаточное, однако, чтобы однозначно определить $H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ по классической функции $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ ¹⁴⁾.

Напротив, наставление волновой механики гласит следующее: сперва надо образовать гамильтонову функцию $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$, а затем составить для произвольной функции $\psi(q_1, \dots, q_k)$ в конфигурационном пространстве системы (а не в фазовом пространстве, т. е. p_1, \dots, p_k не входят в ψ) дифференциальное уравнение

$$H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right) \psi(q_1, \dots, q_k) = \lambda \psi(q_1, \dots, q_k).$$

При этом

$$H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_i}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right)$$

надо понимать в само собой разумеющемся смысле как функциональный оператор. Например, в указанном выше случае

$$H(q_1, \dots, q_{3v}, p_1, \dots, p_{3v}) =$$

$$= \sum_{\mu=1}^v \frac{1}{2m_\mu} (p_{3\mu-2}^2 + p_{3\mu-1}^2 + p_{3\mu}^2) + V(q_1, \dots, q_{3v})$$

переводит функцию $\psi(q_1, \dots, q_{3v})$ в

$$\sum_{\mu=1}^v \frac{1}{2m_\mu} \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial q_{3\mu-2}^2} \psi + \frac{\partial^2}{\partial q_{3\mu-1}^2} \psi + \frac{\partial^2}{\partial q_{3\mu}^2} \psi \right) + V\psi$$

¹⁴⁾ Если матрицы Q_1, P_1 — эрмитовы, то ни Q_1P_1 ни P_1Q_1 не обязаны быть такими, но зато всегда эрмитова $\frac{1}{2}(Q_1P_1 + P_1Q_1)$. Но уже в случае $Q_1^2P_1$ начинают конкурировать как $\frac{1}{2}(Q_1^2P_1 + P_1Q_1^2)$, так и $Q_1P_1Q_1$ (правда, если $P_1Q_1 - Q_1P_1 = \frac{\hbar}{2\pi i} 1$, то эти два выражения совпадают), в случае $Q_1^2P_1^2$ — три выражения $\frac{1}{2}(Q_1^2P_1^2 + P_1^2Q_1^2)$, $Q_1P_1^2Q_1$ и $P_1Q_1^2P_1$ и т. д. (теперь уже не все эти выражения совпадают и в упомянутом частном случае). Мы не будем сейчас вдаваться в это подробнее, поскольку развивающееся далее операторное исчисление позволит много яснее разобраться в этих соотношениях.

(мы опустили в V и ψ переменные q_1, \dots, q_{3v}). Поскольку операция $q_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}$ отлична от операции¹⁵⁾ $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} q_1$, здесь снова возникает неопределенность, связанная с порядком сомножителей q_m и p_m в $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$, однако Шредингер показал, как можно устранить эту неоднозначность путем сведения к определенному вариационному принципу и притом так, чтобы результирующее дифференциальное уравнение оказалось самосопряженным¹⁶⁾. Ну а это дифференциальное уравнение («волновое уравнение») приобретает характер проблемы собственных значений, если интерпретировать λ как параметр собственных значений и наложить на собственную функцию $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k)$ требования, скажем, исчезновения на краю конфигурационного пространства (пространства координат q_1, \dots, q_k), и, конечно, регулярности и однозначности в нем. По смыслу волновой теории собственные значения λ (как в дискретном, так и в непрерывном спектре)¹⁷⁾ представляют собой возможные энергетические уровни. Также и (комплексные) собственные функции, принадлежащие им, связаны с соответствующими (стационарными в смысле Бора) состояниями системы. Так для системы из v электронов ($k = 3v$ см. выше, e — заряд электрона) плотность заряда электрона с номером μ , который по Шредингеру надо представить себе «размазанным» по всему пространству $x, y, z (= q_{3\mu-2}, q_{3\mu-1}, q_{3\mu})$, измеренная в точке x, y, z , задается выражением

$$e \underbrace{\int \dots \int}_{3v-3} |\psi(q_1, \dots, q_{3\mu-3}, x, y, z, q_{3\mu+1}, \dots, q_{3v})|^2 \times \\ \times dq_1 \dots dq_{3\mu-3} dq_{3\mu+1} \dots dq_{3v}.$$

¹⁵⁾ Мы имеем

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} (q_1 \psi) = q_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \psi + \frac{h}{2\pi i} \psi,$$

тем самым получаем

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} q_1 - q_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} = \frac{h}{2\pi i} 1,$$

где 1 есть тождественный (переводящий ψ в себя самое) оператор, т. е. $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}$ и q_1 удовлетворяют тем же правилам коммутации, что и матрицы P_1 и Q_1 .

¹⁶⁾ Ср. его первые две статьи в книге, цитированной в прим.⁹⁾ (стр. 13), также Ann. Phys. [4] 79 (1926).

¹⁷⁾ Ср. первую из упомянутых в прим.¹⁶⁾ работ Шредингера. Точное определение спектра и его частей будет дано позже в §§ II.6—II.9.

(Чтобы полный заряд вышел бы равным e , функция ψ должна быть нормирована условием

$$\underbrace{\int \dots \int}_{3v} |\psi(q_1 \dots q_{3v})|^2 dq_1 \dots dq_{3v} = 1.$$

[Интегрирование по всем $3v$ переменным!] Причем для каждого из $\mu = 1, \dots, v$ получается то же уравнение.)

Кроме того, волновая механика может делать высказывания и относительно систем, не находящихся в боровских стационарных состояниях¹⁸⁾, а именно следующим образом:

Если состояние не стационарно, т. е. изменяется со временем, тогда волновая функция $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k; t)$ содержит время и меняется согласно дифференциальному уравнению

$$-H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right) \psi(q_1, \dots, q_k; t) = \\ = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_k; t)^{19)}.$$

Это значит, что для $t = t_0$ ψ может быть задана произвольным образом, а затем однозначно определяется для всех t . Даже стационарные ψ , как можно заключить из сравнения двух шредингеровых дифференциальных уравнений, в действительности зависят от времени, но только для них время входит согласно

$$\psi(q_1, \dots, q_k; t) = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} H t} \psi(q_1, \dots, q_k; 0),$$

т. е. t появляется только в множителе, равном единице по абсолютной величине и не зависящем от q_1, \dots, q_k (т. е. постоянном в конфигурационном пространстве), так что, например, определенное выше распределение плотности заряда не изменяется. (Мы будем вообще предполагать — и обнаружим, что это оправдается в дальнейшем более детальными рассуждениями, — что множитель в ψ , равный единице по модулю и постоянный [в конфигурационном пространстве], принципиально ненаблюдаем.)

Поскольку собственные функции первого дифференциального уравнения образуют полную ортогональную систему²⁰⁾, мы можем

¹⁸⁾ В первоначальном понимании матричной механики (ср. наше изложение выше) не существовало такого общего понятия состояния, для которого стационарные состояния оказываются частным случаем. Только стационарные, сопоставленные собственным значениям энергии, состояния были предметом теории.

¹⁹⁾ $H = H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ может даже явно содержать время t . Естественно, что тогда, вообще говоря, не будет вовсе никаких стационарных состояний.

²⁰⁾ Если имеется только дискретный спектр. Ср. II. 6.

разложить по ним всякую $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k)$. Если ψ_1, ψ_2, \dots суть собственные функции (все опять не зависящие от времени) и $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ — соответствующие им собственные значения, то разложение имеет вид

$$\psi(q_1, \dots, q_k) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(q_1, \dots, q_k)^{21}).$$

Если же ψ зависит от времени, то t войдет в коэффициенты a_n (на-против, собственные функции ψ_1, ψ_2, \dots не должны здесь, как и всюду далее, зависеть от времени). Таким образом, если $\psi = \psi(q_1, \dots, q_k)$, с которой мы имеем дело, есть в действительности $\psi(q_1, \dots, q_k; t_0)$, то, с учетом того, что

$$\psi = \psi(q_1, \dots, q_k; t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \psi_n,$$

$$H\psi = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) H\psi_n = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n(t) \psi_n$$

и

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \psi = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{h}{2\pi i} \dot{a}_n(t) \psi_n,$$

из второго дифференциального уравнения сравнением коэффициентов получим

$$\frac{h}{2\pi i} \dot{a}_n(t) = -\lambda_n a_n(t), \quad a_n(t) = c_n e^{-\frac{2\pi i}{h} \lambda_n t},$$

т. е.

$$a_n(t) = e^{-\frac{2\pi i}{h} \lambda_n (t-t_0)} a_n(t_0) = e^{-\frac{2\pi i}{h} \lambda_n (t-t_0)} a_n,$$

$$\psi = \psi(q_1, \dots, q_k, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{2\pi i}{h} \lambda_n (t-t_0)} a_n \psi_n(q_1, \dots, q_k).$$

Следовательно, если ψ не стационарна, т. е. если не все a_n , за исключением одного, обращаются в нуль, то ψ (при изменении t) уже больше не меняется лишь на (в пространстве состояний) постоянный множитель абсолютной величины 1. Поэтому будут, вообще говоря, изменяться и определенные выше плотности заряда и, значит, в пространстве возникнут реальные электрические колебания²²⁾.

²¹⁾ Эти, так же как и все последующие разложения в ряды, сходятся «в среднем». Мы это рассмотрим в П. 2.

²²⁾ Что в стационарных состояниях (и только в таких) такие колебания отсутствуют, было одним из наиболее важных постулатов Бора 1913 г. Классическая электродинамика находится в прямом противоречии с этим.

Мы видим, что основные понятия и практические наставления обеих теорий звучат заметно различно. Тем не менее с самого начала они всегда приводили к одним и тем же результатам, даже и тогда, когда это касалось деталей, в которых обе они отличались от более ранних концепций квантовой теории²³⁾. Эта необычайная ситуация была, как указано в I.1, вскоре прояснена²⁴⁾ Шредингером, доказавшим их математическую эквивалентность. Мы обратимся сейчас к этому доказательству эквивалентности и в то же время поясним общую теорию преобразований Дирака—Йордана (которая объединяет эти две теории).

3. Эквивалентность двух теорий: Теория преобразований

Фундаментальная проблема матричной теории состояла в отыскании матриц $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ таких, чтобы, во-первых, удовлетворялись перестановочные соотношения из I.2 (стр. 15) и, во-вторых, чтобы некоторая определенная функция этих матриц $H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$ становилась диагональной матрицей. Эта задача была разделена Борном и Йорданом уже в их первой публикации на две части следующим образом:

Сначала разыскивались какие-нибудь матрицы $\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k$, которые должны были лишь удовлетворять перестановочным соотношениям, что легко достигается²⁵⁾; при этом, вообще говоря,

$$\bar{H} = H(\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k)$$

не оказывалась диагональной матрицей. Затем правильные решения разыскивались в форме

$$Q_1 = S^{-1}\bar{Q}_1 S, \dots, Q_k = S^{-1}\bar{Q}_k S, \quad P_1 = S^{-1}\bar{P}_1 S, \dots, P_k = S^{-1}\bar{P}_k S,$$

где S могла быть произвольной матрицей (но все же обладающей обратной матрицей S^{-1} со свойствами $S^{-1}S = SS^{-1} = 1$). Поскольку из выполнения перестановочных соотношений для $\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k$ следует (тождественно в силу свойств S !) и их справедливость для $Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k$ и поскольку $\bar{H} = H(\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k)$ переходит в $H = H(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$, где

²³⁾ Ср. вторую работу Шредингера, упомянутую в прим. ¹⁶⁾ на стр. 18.

²⁴⁾ Ср. прим. ⁷⁾ на стр. 13.

²⁵⁾ Ср., например, §§ 20, 23 книги Борна и Йордана, упомянутой в прим. ¹⁾ на стр. 9.

$S^{-1}\bar{H}S = H^{26}$), то единственное, что надо требовать от S , — это чтобы $S^{-1}\bar{H}S$ была диагональной матрицей при заданной \bar{H} . Следовало бы, конечно, еще позаботиться о том, чтобы при этом $S^{-1}\bar{Q}_1S, \dots$ остались эрмитовыми, как были \bar{Q}_1, \dots . Однако при более внимательном рассмотрении оказывается, что этому дальнейшему требованию к S всегда можно удовлетворить позже; поэтому сейчас в этом предварительном рассуждении мы оставим его без внимания.

Следовательно, требуется привести данную \bar{H} к диагональной форме с помощью преобразования $S^{-1}\bar{H}S$. Давайте поэтому точно сформулируем, что это значит!

Пусть матрица \bar{H} имеет элементы $h_{\mu\nu}$, искомая матрица S — элементы $s_{\mu\nu}$ и (также неизвестная) диагональная матрица H — диагональные элементы w_μ и, следовательно, общий элемент $w_\mu \delta_{\mu\nu}$ ²⁷⁾. $H = S^{-1}\bar{H}S$ утверждает то же, что и $SH = \bar{H}S$, а последнее означает (если мы приравняем друг другу соответствующие, определяемые по известным правилам матричного умножения элементы с обеих сторон равенства):

$$\sum_v s_{\mu v} \cdot w_v \delta_{v\rho} = \sum_v h_{\mu v} \cdot s_{v\rho},$$

т. е.

$$\sum_v h_{\mu v} \cdot s_{v\rho} = w_\rho \cdot s_{\mu\rho}.$$

Отдельные столбцы $s_{1\rho}, s_{2\rho}, \dots$ матрицы S ($\rho = 1, 2, \dots$) и соответствующие диагональные элементы w_ρ матрицы H являются, следовательно, решениями так называемой проблемы собственных значений, которая записывается следующим образом:

$$\sum_v h_{\mu v} x_v = \lambda \cdot x_\mu \quad (\mu = 1, 2, \dots)$$

²⁶⁾ Поскольку

$$S^{-1} \cdot 1 \cdot S = 1, \quad S^{-1} \cdot aA \cdot S = a \cdot S^{-1}AS,$$

$$S^{-1} \cdot (A + B) \cdot S = S^{-1}AS + S^{-1}BS, \quad S^{-1} \cdot AB \cdot S = S^{-1}AS \cdot S^{-1}BS,$$

то для любого матричного полинома $P(A, B, \dots)$

$$S^{-1}P(A, B, \dots)S = P(S^{-1}AS, S^{-1}BS, \dots).$$

Взяв в качестве P левые части перестановочных соотношений, убедимся в их инвариантности; взяв в качестве P величину H , получим $S^{-1}\bar{H}S = H$.

²⁷⁾ $\delta_{\mu\nu}$ — это хорошо известный символ Кронекера:

$$\delta_{\mu\nu} = 1 \text{ при } \mu = \nu,$$

$$\delta_{\mu\nu} = 0 \text{ при } \mu \neq \nu.$$

(тривиальное решение $x_1 = x_2 = \dots = 0$ естественно исключается). Действительно, $x_v = s_{vp}$, $\lambda = w_p$ есть решение. (Решение $x_v \equiv 0$ и, следовательно, $s_{vp} \equiv 0$ [для всех v] не относится к делу, поскольку тогда p -й столбец S исчез бы тождественно, в то время как S обладает обратной матрицей S^{-1} !). Замечательно, что в существенном единственно такие решения и возможны.

В самом деле, полученное выше уравнение означает, что преобразование вектора $x = \{x_1, x_2, \dots\}$ с помощью матрицы \bar{H} равняется тому же вектору, умноженному на число λ . Преобразуем $x = \{x_1, x_2, \dots\}$ с помощью S^{-1} и обозначим полученный при этом вектор через $y = \{y_1, y_2, \dots\}$. Если мы преобразуем y с помощью H , то это будет то же, что преобразование x с помощью $HS^{-1} = S^{-1}\bar{H}S \cdot S^{-1} = S^{-1} \cdot \bar{H}$, а следовательно то же, что преобразование λx с помощью S^{-1} , т. е. λy . Далее Hy имеет компоненты

$$\sum_v w_\mu \delta_{\mu v} y_v = w_\mu y_\mu,$$

а λy — компоненты λy_μ , т. е. требуется, чтобы $w_\mu y_\mu = \lambda y_\mu$ для всех $\mu = 1, 2, \dots$, а это означает, что $y_\mu = 0$ для всех $w_\mu \neq \lambda$. Это означает, если обозначить через η^p вектор, у которого p -я компонента есть 1, а все остальные — нули, — что y есть линейный агрегат таких η^p , для которых $w_p = \lambda$, — в частности, y нуль, если таковых вовсе нет. Значение x получается применением S к y , следовательно, x есть определенный выше линейный агрегат векторов η^p , преобразованных с помощью S . Компонента $S\eta^p$ с номером μ есть (поскольку v -й компонентой η^p была δ_{vp}): $\sum_v s_{\mu v} \delta_{vp} = s_{\mu p}$. Если мы теперь будем понимать p -й столбец S : s_{1p}, s_{2p}, \dots как вектор, то x будет линейным агрегатом всех столбцов, для которых $w_p = \lambda$, — в частности, x есть нуль, если таковых не существует. Таким образом, наше первоначальное утверждение доказано: w_1, w_2, \dots — это единственные собственные значения и $x_v = s_{vp}$, $\lambda = w_p$ — в существенном единственных решения.

Это весьма важно, поскольку не только знания S и H достаточно для определения всех решений проблемы собственных значений, но и наоборот, мы можем определить S и H , коль скоро мы решили проблему собственных значений полностью. Например, для H : w_μ составлено из всех решений λ и каждое такое λ появляется в ряду w_1, w_2, \dots столько раз, сколько есть принадлежащих ему линейно-

независимых решений x_1, x_2, \dots ²⁸⁾, тем самым w_1, w_2, \dots уже определены с точностью до порядка следования²⁹⁾.

Таким образом, центральная проблема матричной теории — это решение уравнения проблемы собственных значений:

$$E_1. \quad \sum_v h_{\mu v} x_v = \lambda \cdot x_\mu \quad (\mu = 1, 2, \dots).$$

Перейдем теперь к волновой теории. Основное уравнение этой теории «волновое уравнение»:

$$E_2. \quad H\varphi(q_1, \dots, q_k) = \lambda \cdot \varphi(q_1, \dots, q_k),$$

где H — уже обсуждавшийся дифференциальный оператор. Надо отыскать все решения $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ и λ , исключая тривиальное: $\varphi(q_1, \dots, q_k) = 0$ и λ произвольно. Это похоже на то, что требовалось в E_1 : последовательность x_1, x_2, \dots может рассматриваться как функция x_v «прерывной» переменной v (со значениями 1, 2, ...), соответствующая функции $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ «непрерывных» переменных q_1, \dots, q_k ; λ каждый раз играет одну и ту же роль. И только линейное преобразование

$$x_\mu \rightarrow \sum_v h_{\mu v} x_v$$

на первый взгляд совсем не похоже на преобразование

$$\varphi(q_1, \dots, q_k) \rightarrow H\varphi(q_1, \dots, q_k).$$

Как же достичь аналогии?

Мы рассматривали индекс v как переменную и установили параллель между ней и k переменными q_1, \dots, q_k , т. е. между положительным целым числом и произвольной точкой k -мерного конфигурационного пространства (которое мы будем отныне называть пространством Ω). Поэтому нельзя ожидать, что \sum_v можно перенести в Ω

в виде суммы, скорее правильной аналогией будет интеграл $\underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} \dots dq_1 \dots dq_k$ (или, короче, $\int \dots dv, dv$ — элемент объема

²⁸⁾ Ведь столбцы $s_{1\rho}, s_{2\rho}, \dots$ — матрицы S с таким ρ , что $w_\rho = \lambda$ образуют полный набор решений и в качестве столбцов матрицы, имеющей обратную, должны быть линейно независимы.

²⁹⁾ Поскольку произвольная перестановка столбцов S одновременно с соответствующей перестановкой строк S^{-1} переставляет таким же образом диагональные элементы H , порядок w_1, w_2, \dots фактически неопределен и неустановим.

$dq_1 \dots dq_k$ в Ω). Матричному элементу $h_{\mu\nu}$, который зависит от двух переменных типа индекса ν , тогда соответствует функция

$$h(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k),$$

в которой q_1, \dots, q_k и q'_1, \dots, q'_k независимо пробегают всю область Ω . Преобразование

$$x_\mu \rightarrow \sum_y h_{\mu y} x_y \quad \text{или} \quad x_\nu \rightarrow \sum_{y'} h_{\nu y'} x_{y'}$$

должно перейти тем самым в

$$\varphi(q_1, \dots, q_k) \rightarrow$$

$$\rightarrow \underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} h(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k,$$

а проблема собственных значений E_{1*} , которая может быть записана как

$$E_1. \quad \sum_{y'} h_{yy'} x_{y'} = \lambda \cdot x_y$$

переходит в

$$E_3. \quad \underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} h(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k = \\ = \lambda \cdot \varphi(q_1, \dots, q_k).$$

Задачи собственных значений типа E_3 широко изучались в математике и действительно могут быть представлены в виде, в сильной степени аналогичном проблеме E_{1*} . Они называются «интегральными уравнениями»³⁰⁾.

Однако, к несчастью, E_2 . не представляется в такой форме или, точнее, она может быть представлена в этой форме лишь, если для дифференциального оператора

$$H = H\left(q_1, \dots, q_k, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right)$$

³⁰⁾ Теория интегральных уравнений обрела свою определенную форму. в работах Фредгольма и Гильберта. Исчерпывающее изложение, дополненное литературными ссылками, можно найти в книге Куранта и Гильберта Courant—Hilbert, Methoden der Mathematischen Physik, Berlin, 1931. (Русский перевод: Методы математической физики, Гостехиздат, 1951.)

может быть найдена такая функция $h(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k)$, что

$$I. \quad H\varphi(q_1, \dots, q_k) =$$

$$= \underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} h(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq_1 \dots dq_k$$

выполняется тождественно (т. е. для всех $\varphi(q_1, \dots, q_k)$).

Эту $h(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k)$, если она существует, будем впредь называть (интегральным) «ядром» функционального оператора H , а сам H тогда называется «интегральным оператором».

Но такое преобразование вообще невозможно, т. е. дифференциальные операторы H никогда не являются интегральными операторами. Даже простейший функциональный оператор, преобразующий каждую φ в самое себя, — этот оператор называется 1 — не является таковым. Остановимся на этом операторе, положив ради простоты $k = 1$. Итак, требуется, чтобы было:

$$\Delta_1. \quad \varphi(q) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} h(q, q') \varphi(q') dq'.$$

Заменим $\varphi(q)$ на $\varphi(q + q_0)$, положим $q = 0$ и введем переменную интегрирования $q'' = q' + q_0$. Тогда $\varphi(q_0) = \int_{-\infty}^{\infty} h(0, q'' - q_0) \varphi(q'') dq''$.

Если мы теперь заменим q_0, q'' на q, q' , мы увидим, что $h(0, q' - q)$ решает задачу, так же как и $h(q, q')$, так что мы вправе считать, что $h(q, q')$ зависит лишь от $q' - q$. Тогда требование формулируется так:

$$\Delta_2. \quad \varphi(q) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} h(q' - q) \varphi(q') dq', \quad (h(q, q') = h(q' - q)).$$

Заменяя снова $\varphi(q)$ на $\varphi(q + q_0)$, убедимся, что достаточно рассмотреть случай $q = 0$:

$$\Delta_3. \quad \varphi(0) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} h(q) \varphi(q) dq.$$

Замена $\varphi(q)$ на $\varphi(-q)$ показывает, что $h(-q)$ есть, так же как $h(q)$, решение и, следовательно, $h_1(q) = \frac{1}{2}(h(q) + h(-q))$ — тоже, так что $h(q)$ можно считать четной функцией q .

Ясно, что этим условиям невозможно удовлетворить: если мы выберем $\varphi(q) > 0$ для $q \geq 0$, $\varphi(0) = 0$, то из Δ_3 . следует, что $h(q) = 0$ для $q \geq 0$ ³¹⁾. Если же мы выберем $\varphi(q) = 1$, то получится

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(q) dq = 1,$$

тогда как из предыдущего безусловно следует

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(q) dq = 0.$$

Несмотря на это, Дирак лицемерно допустил существование функции такого рода:

$$\Delta_4. \quad \delta(q) = 0 \text{ для } q \geq 0, \quad \delta(q) = \delta(-q), \quad \int \delta(q) dq = 1.$$

Она удовлетворила бы Δ_3 :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q) \varphi(q) dq &= \varphi(0) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q) dq + \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q) \{ \varphi(q) - \varphi(0) \} dq = \\ &= \varphi(0) \cdot 1 + \int_{-\infty}^{\infty} 0 \cdot dq = \varphi(0). \end{aligned}$$

а следовательно, также Δ_1 . и Δ_2 . Мы должны представлять себе эту функцию исчезающей везде, кроме начала координат, и настолько сильно бесконечной в этой точке, что полный интеграл от нее все же оказывается равным единице³²⁾.

Если уж мы признаем эту функцию, то можно будет представлять самые разнообразные дифференциальные операторы, как операторы

³¹⁾ Точнее, если мы возьмем за основу интеграл в смысле Лебега, то для $q \geq 0$ должно быть $h(q) = 0$, исключая множество меры нуль, т. е. за исключением этого множества $h(q) \equiv 0$ тождественно.

³²⁾ Площадь под кривой $\delta(q)$ мы должны представлять себе как бесконечно узкий и бесконечно высокий пик в точке $q = 0$, таким образом, что его площадь равна единице, скажем как предельное поведение функции

$\sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-aq^2}$ при $a \rightarrow +\infty$, но это все равно невозможно не в меньшей мере.

интегральные, если в дополнение к $\delta(q)$ ввести и ее производные. Тогда находим, что

$$\begin{aligned} \frac{d^n}{dq^n} \varphi(q) &= \frac{d^n}{dq^n} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q - q') \varphi(q') dq' = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^n}{\partial q^n} \delta(q - q') \varphi(q') dq' = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(n)}(q - q') \varphi(q') dq', \\ q^n \varphi(q) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q - q') q^n \varphi(q') dq', \end{aligned}$$

т. е. что $\frac{d^n}{dq^n}$ и q^n имеют интегральные ядра $\delta^{(n)}(q - q')$ и $\delta(q - q') q^n$ соответственно. По той же схеме мы можем найти интегральные ядра сколь угодно сложных дифференциальных операторов. При нескольких переменных q_1, \dots, q_k к цели приводят произведения δ -функций, например:

$$\begin{aligned} &\underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} \delta(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \delta(q_k - q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\dots \left[\int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q'_1, q'_2, \dots, q'_k) \delta(q_1 - q'_1) dq'_1 \right] \delta(q_2 - q'_2) dq'_2 \right] \dots \right] \times \\ &\quad \times \delta(q_k - q'_k) dq'_k = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\dots \left[\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q_1, q'_2, \dots, q'_k) \delta(q_2 - q'_2) dq'_2 \right] \dots \right] \delta(q_k - q'_k) dq'_k = \\ &\quad = \dots = \varphi(q_1, q_2, \dots, q_k), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} \delta'(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \delta(q_k - q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k = \\ &= \frac{d}{dq_1} \underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} \delta(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \\ &\quad \dots \delta(q_k - q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k = \frac{d}{dq_1} \varphi(q_1, \dots, q_k), \end{aligned}$$

и так далее.

Так можно навязать интегральное представление **I**. практически всем операторам.

Коль скоро есть такое представление, аналогия между E_1 . и E_3 . становится полной, нужно лишь заменить u , u' , $\sum_{u'}$, x на

$$q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k; \underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} \dots dq'_1 \dots dq'_k; \varphi.$$

Как векторам x , соответствуют функции $\varphi(q_1, \dots, q_k)$, так и матрицам h_{uv} нужно поставить в соответствие интегральные ядра $h(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k)$; однако еще целесообразней рассматривать эти ядра прямо как матрицы и соответственно считать q_1, \dots, q_k индексами строк, а q'_1, \dots, q'_k индексами столбцов, соответствующими u и u' . Мы тогда имеем, кроме обычных матриц $\{h_{uv}\}$ с дискретными совокупностями столбцов и строк, нумерованными числами $1, 2, \dots$, еще другие $\{h(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k)\}$ (интегральные ядра), для которых каждая совокупность характеризуется k -переменными, непрерывно пробегающими все Ω .

Эта аналогия может показаться чисто формальной, но в действительности это не так, ибо индексы u и u' могут также рассматриваться как координаты в пространстве состояний: именно, если понимать их как квантовые числа (в смысле теории Бора: как номера возможных орбит в фазовом пространстве, которые оказываются дискретными вследствие запретов, накладываемых квантовыми условиями).

Мы не будем прослеживать далее этот ход мысли, развивая который Дирак и Йордан очертили единую теорию квантовых процессов. «Несобственные» конструкции (такие, как $\delta(x)$, $\delta'(x)$) играют в нем решающую роль — они лежат за пределами обычно употребляемых математических методов, а мы надеемся описать квантовую механику с помощью именно этих последних методов. Поэтому мы перейдем к другому (шредингерову) методу объединения обеих теорий.

4. Эквивалентность двух теорий: Гильбертово пространство

Метод, намеченный в I. 3, приводил к аналогии между «дискретным» пространством значений индекса $Z = (1, 2, \dots)$ и непрерывным конфигурационным пространством Ω механической системы (Ω k -мерно, где k число классических механических степеней свободы системы). Неудивительно, что такая аналогия не могла быть достигнута без некоторого насилия над формализмом и математикой. Пространства Z и Ω в действительности весьма различны и любая попытка соотнести их должна приводить к большим трудностям³³⁾.

³³⁾ Впрочем, к унификации такого рода задолго до квантовой механики стремился Е. Н. Мюнге — основоположник так называемого «общего анализа». Ср. статью на эту тему: H e l l i n g e r — T ö p l i z, Math. Enzyklopädie Bd. II 3, 9 Leipzig, 1927.

Однако, что нам в самом деле нужно, это вовсе не соотношение между Z и Ω , но только соотношение между функциями в этих двух пространствах, т. е. между последовательностями x_1, x_2, \dots , которые суть функции в Z , и волновыми функциями $\varphi(q_1, \dots, q_k)$, являющимися функциями в Ω . Единственно эти функции и представляют собой те объекты, которые входят в постановку квантовой механической задачи.

В теории Шредингера важную роль играет интеграл

$$\underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k;$$

он должен быть равен единице для того, чтобы функции φ можно было дать физическую интерпретацию (ср. I.2). В матричной теории, напротив (ср. проблему **E₁** в I.3), решающую роль играет вектор x_1, x_2, \dots . На этот вектор всегда накладывается условие конечности суммы $\sum_v |x_v|^2$ в духе гильбертовой теории такого рода задач о собственных значениях (ср. ссылку в прим. ³⁰) на стр. 25). Обычно даже, чтобы исключить тривиальное решение $x_v \equiv 0$, устанавливают нормировку $\sum_v |x_v|^2 = 1$. Это побуждает нас ограничить круг допустимых в Z или Ω функций такими, для которых

$$\sum_v |x_v|^2 \quad \text{или} \quad \underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

конечны, поскольку лишь для таких функций \sum_v или $\underbrace{\int \dots \int}_{\Omega}$ могут

быть сделаны равными единице умножением на постоянную, т. е. функции можно нормировать в обычном смысле ³⁴). Мы назовем множества таких функций F_Z и F_Ω соответственно.

³⁴⁾ Многократно отмечалось, что в теории Шредингера для волновой функции φ существенно лишь требование конечности интеграла

$$\underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k.$$

Так что, например, φ может быть сингулярна, может обращаться в бесконечность, если только указанный интеграл остается конечным. Поучительным примером такого рода оказывается атом водорода в релятивистской теории Дирака, ср. D i r a c, Proc. Roy. Soc., Lond., 117 (1928); и W. G o g d o n, Z. Physik 48 (1928).

Далее, выполняется теорема: F_Z и F_{Ω} изоморфны (Fischer u. F. Riesz)^{35).}

Точнее это означает следующее: Возможно установить однозначное соответствие между F_Z и F_{Ω} , т. е. каждой последовательности x_1, x_2, \dots с конечной $\sum_v |x_v|^2$ сопоставить функцию $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ с конечным $\underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$ и на-

оборот, так что соответствие будет линейным и изометрическим. «Линейность» означает: если x_1, x_2, \dots соответствует $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ и y_1, y_2, \dots соответствует $\psi(q_1, \dots, q_k)$, то ax_1, ax_2, \dots и $x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots$ соответствуют $a\varphi(q_1, \dots, q_k)$ и $\varphi(q_1, \dots, q_k) + \psi(q_1, \dots, q_k)$; «изометричность» означает: для соответствующих друг другу x_1, x_2, \dots и $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ выполняется $\sum_v |x_v|^2 = \underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$ (понятие «изометрии» связано

с тем, что принято рассматривать x_1, x_2, \dots и $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ как векторы, а $\sqrt{\sum_v |x_v|^2}$ и $\sqrt{\underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k}$

как соответствующие «длины»). Вдобавок, если x_1, x_2, \dots и y_1, y_2, \dots отвечают соответственно $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ и $\psi(q_1, \dots, q_k)$, то будет даже

$$\sum_v x_v \bar{y}_v = \underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k$$

(и обе части абсолютно сходятся). По поводу этого последнего пункта заметим, что собственно можно было бы желать, чтобы выполнялось

$$\sum_v x_v = \underbrace{\int \dots \int}_{\Omega} \varphi(q_1, \dots, q_k) dq_1 \dots dq_k$$

или нечто в этом роде, т. е. полной аналогии между суммированием с одной стороны, и интегрированием с другой, однако ближайшее

³⁵⁾ В главе о гильбертовом пространстве мы вернемся к доказательству этой теоремы (ср. II, 2, 3, особенно *теорема 5.* в II, 2). Заметим, что для многих целей достаточно только части этой теоремы, которая доказывается много проще; именно: изоморфизма между F_{Ω} и соответствующей частью F_Z ; доказательство этой части восходит к Hilbert'у (Gött. Nachr., 1906). Так, первоначальное Шредингерово доказательство эквивалентности (ср. прим. 7.) на стр. 13), тоже основано только на этой части теоремы.

рассмотрение показывает, что сложение \sum_y и интегрирование $\int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \dots dq_1 \dots dq_k$ применяются в квантовой механике всегда

только к таким выражениям, как $x_y \bar{y}$, или $\varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)}$.

Мы не собираемся здесь предпринимать какое-либо исследование того, как это соответствие должно быть установлено, поскольку это все равно будет нашей главной заботой в следующей главе. Но надо подчеркнуть, что означает существование такого соответствия: Z и Ω весьма различны и установление прямой связи между ними должно приводить к неразрешимым математическим трудностям. С другой стороны F_Z и F_{Ω} изоморфны, т. е. идентичны по своей внутренней структуре (они реализуют одни и те же абстрактные свойства в различных математических построениях) — и поскольку они (но не сами Z и Ω !) суть собственно аналитические субстраты матричной и волновой теорий, то этот изоморфизм значит, что обе теории должны приводить к одним и тем же численным результатам. Поэтому, например, изоморфизм сопоставляет матрицу

$$\bar{H} = H(\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k, \bar{P}_1, \dots, \bar{P}_k)$$

и оператор

$$H = H\left(q_1, \dots, q_k; \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right)$$

друг другу. Поскольку и та и другой получены с помощью одних и тех же алгебраических операций из матриц \bar{Q}_l, \bar{P}_l ($l = 1, \dots, k$) и функциональных операторов

$$q_l, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l}, \dots \quad (l = 1, \dots, k)$$

соответственно, то достаточно показать, что q_l, \dots отвечает матрице \bar{Q}_l, \dots и $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l}, \dots$ матрице \bar{P}_l, \dots . Далее, от матриц \bar{Q}_l, \bar{P}_l ($l = 1, \dots, k$) не требовалось ничего, кроме того, чтобы они удовлетворяли правилам перестановки, упомянутым в I. 2:

$$\begin{aligned} \bar{Q}_m \bar{Q}_n - \bar{Q}_n \bar{Q}_m &= 0, \quad \bar{P}_m \bar{P}_n - \bar{P}_n \bar{P}_m = 0, \\ Q_m P_n - P_n Q_m &= \begin{cases} = 0 & \text{при } m \neq n \\ = \frac{\hbar}{2\pi i} 1 & \text{при } m = n. \end{cases} \end{aligned} \quad (m, n = 1, 2, \dots)$$

Но матрицы, соответствующие (по изоморфизму) $q_l, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l}, \dots$, безусловно будут им удовлетворять, поскольку сами функциональные

операторы $q_1, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots$ обладают этим свойством³⁶), и свойства эти не теряются при изоморфном переносе на F_Z .

Поскольку системы F_Z и F_Ω изоморфны, и поскольку квантовые механики, построенные на них, математически равнозначны, то следует ожидать, что единую теорию, не зависимую от случайностей формальной схемы, выбранной в свое время, и представляющую только действительно существенные черты квантовой механики, можно будет построить, лишь если изучить основные внутренние свойства (общие для F_Z и F_Ω), присущие этим системам функций, и взять именно их за исходную точку построения.

Система F_Z обычно называется «пространством Гильберта». Таким образом, в первую очередь речь пойдет о том, чтобы разыскать те внутренние свойства гильбертова пространства, которые не зависят от специальных свойств его частных воплощений F_Z или F_Ω . Математический образ, описываемый этими свойствами (и который в конкретных частных случаях можно в целях вычислений с равным правом принимать за F_Z или F_Ω , но для общих целей удобнее рассматривать непосредственно), будем называть «абстрактным гильбертовым пространством».

Итак, мы хотим описать абстрактное гильбертово пространство и затем с полной строгостью доказать следующие положения:

1. Что абстрактное гильбертово пространство однозначно

характеризуется свойствами, которые будут указаны, т. е. что оно не допускает более существенно различных реализаций.

2. Что его свойства осуществляются как в F_Z , так и в F_Ω .

(При этом вещи, обсуждавшиеся в I. 4 лишь качественно, будут строго проанализированы.) Когда это будет сделано, мы применим получаемый таким образом математический аппарат к построению квантовой механики.

³⁶⁾ Мы имеем

$$q_m q_n \varphi(q_1, \dots, q_k) = q_n q_m \varphi(q_1, \dots, q_k),$$

$$\frac{\partial}{\partial q_m} \frac{\partial}{\partial q_n} \varphi(q_1, \dots, q_k) = \frac{\partial}{\partial q_n} \frac{\partial}{\partial q_m} \varphi(q_1, \dots, q_k),$$

$$\frac{\partial}{\partial q_m} q_n \varphi(q_1, \dots, q_k) - q_n \frac{\partial}{\partial q_m} \varphi(q_1, \dots, q_k) = \begin{cases} = 0 & \text{при } m \neq n, \\ = \varphi(q_1, \dots, q_k) & \text{при } m = n, \end{cases}$$

из чего прямо следуют нужные операторные соотношения.

ГЛАВА II

ОБЩИЕ СВОЙСТВА АБСТРАКТНОГО ГИЛЬБЕРТОВА ПРОСТРАНСТВА

1. Определение абстрактного пространства Гильберта

Нам надо теперь выполнять программу, предложенную в конце I.4: определить гильбертово пространство, — которое даст нам математическое основание для трактовки квантовой механики, — в терминах исключительно тех понятий, которые впоследствии войдут в саму квантовую механику и которые в силу этого будут иметь равный смысл как в «дискретном» функциональном пространстве F_Z последовательностей x_v ($v = 1, 2, \dots$), так и в «непрерывном» пространстве F_Ω волновых функций $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ (q_1, \dots, q_k пробегают все конфигурационное пространство Ω). Эти понятия, как мы уже однажды указывали, суть следующие:

α) Умножение на скаляр, т. е. перемножение (комплексного) числа a и элемента f гильбертова пространства: af . В F_Z при этом из x_v получается ax_v , а в F_Ω из $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ получается $a\varphi(q_1, \dots, q_k)$.

β) Сложение и вычитание двух элементов f и g абстрактного гильбертова пространства $f \pm g$. В F_Z при этом из x_v и y_v получается $x_v \pm y_v$; в F_Ω из $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ и $\psi(q_1, \dots, q_k)$ получается $\varphi(q_1, \dots, q_k) \pm \psi(q_1, \dots, q_k)$.

γ) «Внутреннее умножение» двух элементов f и g абстрактного гильбертова пространства. В отличие от **α), β)** эта операция приводит к (комплексному) числу, а не к элементу гильбертова пространства (f, g). В F_Z при этом из x_v и y_v получается $\sum_v x_v \bar{y}_v$, а в F_Ω из $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ и $\psi(q_1, \dots, q_k)$

получается $\int \dots \int \underbrace{\varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)}}_{\Omega} dq_1 \dots dq_k$.

(Определения в F_Z и в F_Ω должны быть дополнены необходимыми доказательствами сходимости. Мы приведем их в II.3).

Кроме того, в дальнейшем мы будем последовательно обозначать точки абстрактного гильбертова пространства буквами $f, g, \dots, \varphi, \psi, \dots$, комплексные числа — буквами a, b, \dots, x, y, \dots , а целые положительные числа — буквами $k, l, m, \dots, \mu, \nu, \dots$. Мы будем также в случае необходимости обозначать абстрактное гильбертово пространство символом \mathfrak{H}_∞ (как сокращенное обозначение ∞ -мерного евклидова пространства, аналогичное обычному обозначению \mathfrak{H}_n для « n -мерного евклидова пространства» [$n = 1, 2, \dots$]).

Самое замечательное в операциях $af, f \pm g, (f, g)$ это то, что это как раз основные операции векторного исчисления: те операции, которые делают возможным введение вычисления длин и углов в геометрии Евклида или вычислений, относящихся к силе и работе в механике частиц. Аналогия становится совершенно ясной в случае F_Z , если вместо x_1, x_2, \dots в \mathfrak{H}_∞ мы рассмотрим обычные точки x_1, \dots, x_n из \mathfrak{H}_n (для которых ведь операции α, β, γ) могут быть определены так же точно). В частности, для $n = 3$ мы имеем случай обычного пространства. В некоторых случаях более удобно говорить о комплексе x_1, \dots, x_n не как о точке, но как о векторе, направленном из точки $0, \dots, 0$ в точку x_1, \dots, x_n .

Итак, для того чтобы определить абстрактное гильбертово пространство, мы возьмем за основу фундаментальные векторные операции $af, f \pm g, (f, g)$. Как окажется при обсуждении, к которому мы переходим, мы одновременно с \mathfrak{H}_∞ охватим и все \mathfrak{H}_n . Поэтому, пока мы еще не хотим специально различать между \mathfrak{H}_∞ и \mathfrak{H}_n , мы будем пользоваться нейтральным символом \mathfrak{H} как общим обозначением пространства.

Постулируем прежде всего в \mathfrak{H} характерные векторные свойства³⁷⁾:

A. \mathfrak{H} есть линейное пространство.

Это значит: в \mathfrak{H} определены сложение $f + g$ и умножение на «скаляр» af (f, g — элементы \mathfrak{H} , a — комплексное число; $f \pm g$ и af принадлежат \mathfrak{H}), и \mathfrak{H} имеет нулевой элемент 0 ³⁸⁾.

³⁷⁾ Характеристика \mathfrak{H}_n через $A., B., C.$ ⁽ⁿ⁾ восходит к Уэйлу (см. Raum, Zeit, Materie, Berlin (1921)). Если мы хотим получить \mathfrak{H}_∞ вместо \mathfrak{H}_n , то естественно $C.$ ⁽ⁿ⁾ заменяется на $C.$ ^(\infty). Только в этом случае возникает необходимость в $D., E.$, ср. обсуждение в тексте ниже.

³⁸⁾ Кроме начала координат или нулевого вектора в \mathfrak{H} есть также число 0 , так что один символ употребляется для обозначения двух различных вещей. Однако отношения между ними таковы, что путаницы при этом не возникает.

Таким образом, для этого пространства выполняются известные правила векторной алгебры

$$\begin{aligned} f + g &= g + f && \text{(коммутативность сложения),} \\ (f + g) + h &= f + (g + h) && \text{(ассоциативность сложения),} \\ (a + b)f &= af + bf \\ a(f + g) &= af + ag \quad \left. \right\} && \text{(дистрибутивность умножения),} \\ (ab)f &= a(bf) && \text{(ассоциативность умножения),} \\ 0f = 0, \quad 1f &= 1 && \text{(роль нуля и единицы).} \end{aligned}$$

Правила вычислений, не указанные здесь, непосредственно следуют из этих постулатов. Например, роль нулевого вектора в сложении:

$$f + 0 = 1 \cdot f + 0 \cdot f = (1 + 0) \cdot f = 1 \cdot f = f.$$

Или однозначная возможность вычитания: определим

$$-f = (-1) \cdot f; \quad f - g = f + (-g),$$

тогда

$$\begin{aligned} (f - g) + g &= (f + (-g)) + g = f + ((-g) + g) \quad \left. \right\} = \\ (f + g) - g &= (f + g) + (-g) = f + (g + (-g)) \quad \left. \right\} = \\ &= f + ((-1) \cdot g + 1 \cdot g) = f + ((-1) + 1) \cdot g = \\ &= f + 0 \cdot g = f + 0 = f. \end{aligned}$$

Или дистрибутивные законы умножения при вычитании

$$\begin{aligned} a \cdot (f - g) &= a \cdot f + a \cdot (-g) = af + a \cdot ((-1) \cdot g) = \\ &= af + (a \cdot (-1)) \cdot g = af + ((-1)a) \cdot g = \\ &= af + (-ag) = af - ag, \\ (a - b) \cdot f &= a \cdot f + (-b) \cdot f = af + ((-1)b) \cdot f = \\ &= af + (-bf) = af - bf. \end{aligned}$$

Не стоит, пожалуй, продолжать эти примеры дальше, и так должно быть ясно, что все правила линейного векторного исчисления здесь имеют место.

Мы можем, следовательно, как и для векторов, определить, когда известные элементы f_1, \dots, f_k пространства \mathfrak{F} будут линейно независимы.

Определение 1. Элементы f_1, \dots, f_k линейно независимы, если из $a_1f_1 + \dots + a_kf_k = 0$ (a_1, \dots, a_k — комплексные числа) следует, что $a_1 = a_2 = \dots = a_k = 0$.

Определим далее аналог линейных объектов векторного исчисления (линия, плоскость и т. д., проходящие через начало координат) — линейное многообразие,

Определение 2. Подмножество \mathfrak{M} пространства \mathfrak{X} называется линейным многообразием, если оно вместе с какими-либо k ($k = 1, 2, \dots$) его элементами f_1, \dots, f_k ³⁹⁾ содержит и их линейные комбинации $a_1f_1 + \dots + a_kf_k$. Если \mathfrak{A} есть произвольное подмножество \mathfrak{M} , то множество всех $a_1f_1 + \dots + a_kf_k$ ($k = 1, 2, \dots$; a_1, \dots, a_k — произвольные комплексные числа; f_1, \dots, f_k — произвольные элементы \mathfrak{M}) есть линейное многообразие, которое очевидно содержит \mathfrak{A} . Ясно, что оно является также подмножеством любого другого линейного многообразия, содержащего \mathfrak{A} . Оно называется «линейным многообразием, натянутым на \mathfrak{A} » и обозначается символом $\{\mathfrak{A}\}$.

Прежде чем дальше развивать эти представления, сформулируем следующий основной принцип векторного исчисления — существование внутреннего произведения.

B. В \mathfrak{M} определено эрмитово внутреннее произведение.

Это означает: определено (f, g) (f и g — элементы \mathfrak{M} (f, g — комплексное число) со следующими свойствами:

$$(f' + f'', g) = (f', g) + (f'', g) \quad (\text{дистрибутивность относительно первого множителя}),$$

$$(a \cdot f, g) = a \cdot (f, g) \quad (\text{ассоциативность относительно первого множителя}),$$

$$(f, g) = \overline{(g, f)} \quad (\text{эрмитова симметрия}),$$

$$(f, f) \geq 0 \text{ и } = 0 \text{ лишь при } f = 0^{40)} \quad (\text{дефинитность}).$$

Соответствующие два закона для второго множителя следуют из законов для первого и свойства эрмитовой симметрии (поменяем f и g и возьмем комплексно-сопряженные с обеих сторон):

$$(f, g' + g'') = (f, g') + (f, g''),$$

$$(f, a \cdot g) = \bar{a} \cdot (f, g).$$

Это внутреннее произведение очень важно, поскольку оно позволяет ввести определение расстояния. В евклидовом пространстве длина вектора определяется как $\|f\| = \sqrt{(f, f)}^{41)}$, а расстояние

³⁹⁾ Достаточно было бы потребовать следующего: если f принадлежит \mathfrak{M} , то и af также; если f и g принадлежат \mathfrak{M} , то $f + g$ также. Тогда, если f_1, \dots, f_k принадлежат \mathfrak{M} , то $a_1f_1, a_2f_2, \dots, a_kf_k$ также, и тогда последовательно то же верно для $a_1f_1 + a_2f_2, \dots, a_1f_1 + a_2f_2 + \dots + a_kf_k$.

⁴⁰⁾ (f, f) — вещественное число вследствие эрмитовой симметрии: действительно, для $f = g$ имеем $(f, f) = \overline{(f, f)}$.

⁴¹⁾ Если f имеет компоненты x_1, \dots, x_n , то по замечанию, сделанному в γ , II.1 (если мы ограничимся конечным числом компонент) $\sqrt{(f, f)} = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2}$, т. е. $\|f\|$ есть обычная евклидова длина.

между двумя точками определяется как $\|f - g\|$. Придерживаясь этой аналогии, введем

Определение 3. «Длина» элемента f из \mathfrak{H} есть $\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}$, расстояние между f, g есть $\|f - g\|$ ⁴²⁾.

Что это понятие действительно обладает всеми свойствами расстояния, мы сейчас увидим. Докажем для этого следующую

Теорему 1. Всегда $|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\|$.

Доказательство. Напишем сначала

$$\|f\|^2 + \|g\|^2 - 2 \operatorname{Re}(f, g) =$$

$$= \langle f, f \rangle + \langle g, g \rangle - \langle f, g \rangle - \langle g, f \rangle = \langle f - g, f - g \rangle \geq 0,$$

$$\operatorname{Re}(f, g) \leq \frac{1}{2} (\|f\|^2 + \|g\|^2)$$

(если $z = u + iv$ — комплексное число — u и v вещественны, то $\operatorname{Re} z$ и $\operatorname{Im} z$ являются соответственно вещественной и мнимой частями z , т. е. $\operatorname{Re} z = u$, $\operatorname{Im} z = v$). Если мы заменим f и g на af и $\frac{1}{a}g$ (a вещественно и больше нуля), то левая часть, как легко видеть, не изменится. В правой же мы получим $\frac{1}{2} \left(a^2 \|f\|^2 + \frac{1}{a^2} \|g\|^2 \right)$. Поскольку это выражение $\geq \operatorname{Re}(f, g)$, то неравенство, в частности, сохраняется и для его минимального значения $\|f\| \cdot \|g\|$ (это значение достигается для $f, g \neq 0$ при $a = \sqrt{\frac{\|g\|}{\|f\|}}$ и для $f = 0$ или $g = 0$ при $a \rightarrow +\infty$ или при $a \rightarrow +0$ соответственно). Следовательно,

$$\operatorname{Re}(f, g) \leq \|f\| \cdot \|g\|.$$

Если мы заменим здесь f и g на $e^{i\alpha}f$ и g (α вещественно), то правая часть уравнения не изменится (вследствие того, что $\langle af, af \rangle = \bar{a}a \langle f, f \rangle = |a|^2 \langle f, f \rangle$, имеем $\|af\| = |a| \cdot \|f\|$ и, следовательно, при $|a| = 1$ $\|af\| = \|f\|$), а левая часть перейдет в

$$\operatorname{Re}(e^{i\alpha}(f, g)) = \cos \alpha \operatorname{Re}(f, g) - \sin \alpha \operatorname{Im}(f, g).$$

Последнее выражение очевидным образом имеет максимум

$$\sqrt{(\operatorname{Re}(f, g))^2 + (\operatorname{Im}(f, g))^2} = |(f, g)|,$$

откуда и следует предложение

$$|(f, g)| \leq \|f\| \cdot \|g\|.$$

⁴²⁾ Поскольку $\langle f, f \rangle$ вещественно и ≥ 0 , то $\|f\|$ веществен, и мы выбираем квадратный корень ≥ 0 . То же выполняется и для $\|f - g\|$.

Следствие. Чтобы имело место равенство, f, g должны совпадать с точностью до постоянного (комплексного) множителя.

Доказательство. Чтобы имело место равенство в соотношении

$\operatorname{Re}(f, g) \leqq \frac{1}{2}(\|f\|^2 + \|g\|^2)$, необходимо даже, чтобы $(f - g, f - g) = 0$, т. е. должно быть $f = g$. При переходе от этого соотношения к $|(f, g)| \leqq \|f\| \cdot \|g\|$, f и g — заменяются на $e^{ia}af$ и $\frac{1}{a}g$ (a вещественны, $a > 0$), если только ни f ни g не равны нулю. Чтобы в нем сохранялось равенство, нужно, следовательно, чтобы было $e^{ia}af = \frac{1}{a}g$, т. е. $g = a^2e^{ia}f = cf$ ($c \neq 0$). Обратно, для f или g , равного нулю, или для $g = cf$ ($c \neq 0$) явным образом имеет место равенство.

Теорема 2. Всегда $\|f\| \geqq 0$ и равенство достигается лишь для $f = 0$. Выполняется $\|a \cdot f\| = |a| \cdot \|f\|$. Всегда будет также $\|f + g\| \leqq \|f\| + \|g\|$, причем равенство достигается лишь для f и g , совпадающих с точностью до постоянного вещественного множителя $\geqq 0$.

Доказательство. В правильности двух первых утверждений мы уже убедились выше. Докажем неравенство третьего предложения следующим образом:

$$\begin{aligned} (f + g, f + g) &= (f, f) + (g, g) + (f, g) + (g, f) = \\ &= \|f\|^2 + \|g\|^2 + 2 \operatorname{Re}(f, g) \leqq \|f\|^2 + \|g\|^2 + 2 \|f\| \cdot \|g\| = \\ &\quad = (\|f\| + \|g\|)^2. \end{aligned}$$

Чтобы достигалось равенство, $\operatorname{Re}(f, g)$ должна быть равна $\|f\| \cdot \|g\|$, для чего необходимо f или $g = 0$, или $g = a^2f = cf$ (c вещественно, > 0) в силу выводов, сделанных при доказательстве предыдущего следствия. Обратно, очевидно, что в этом случае равенство выполнено.

Из *теоремы 2.* немедленно следует, что расстояние $\|f - g\|$ обладает следующими свойствами: Расстояние между f и g есть нуль для $f = g$ и только в этом случае. Расстояние между f и g то же, что и между g и f . Расстояние между f и h меньше или равно сумме расстояний между f и g и между g и h . Равенство достигается только, если $g = af + (1 - a)h$ (a вещественно, $0 \leqq a \leqq 1$)⁴³⁾.

⁴³⁾ По *теореме 2.* (которую надо применить здесь к $f - g$ и $g - h$) должно быть $f - g = 0$, т. е. $f = g$ или $g - h = 0$, т. е. $g = h$, или же $g - h = c(f - g)$ (c вещественно, > 0), т. е. $g = \frac{c}{c+1}f + \frac{1}{c+1}h$, иными словами, $g = af + (1 - a)h$ с a , равным соответственно 1, 0 или $\frac{c}{1+c}$. Геометрически это означает, что точка g лежит на отрезке f, h .

Расстояние между af и ag есть умноженное на $|a|$ расстояние между f и g . Но это как раз те самые свойства расстояния, которые дают возможность свести в геометрии (и топологии) понятия непрерывности, ограниченности, предельной точки и так далее к фундаментальному понятию расстояния. Мы воспользуемся этим для следующих определений:

Функция $F(f)$ в \mathfrak{N} (т. е. функция, определенная для f из \mathfrak{N} и имеющая в качестве своих значений или всегда точки из \mathfrak{N} , или всегда комплексные числа) непрерывна в точке f_0 (из \mathfrak{N}), если для каждого $\epsilon > 0$ существует $\delta > 0$ такое, что из $\|f - f_0\| < \delta$ с необходимостью следует, что $\|F(f) - F(f_0)\| < \epsilon$ или $|F(f) - F(f_0)| < \epsilon$ (в зависимости от того, являются ли значения F точками из \mathfrak{N} или комплексными числами). Будем называть эту функцию ограниченной в \mathfrak{N} или в заданном подмножестве \mathfrak{N} , если там всегда $\|F(f)\| \leq C$ или $|F(f)| \leq C$ (C — постоянная, соответствующим образом выбранная, но фиксированная). Аналогичные определения имеют место для нескольких переменных. Последовательность f_1, f_2, \dots сходится к f или имеет предел f , если числа $\|f_1 - f\|, \|f_2 - f\|, \dots$ сходятся к нулю. Точка называется предельной точкой множества \mathfrak{A} (которое есть подмножество \mathfrak{N} !), если она является пределом последовательности из \mathfrak{A} ⁴⁴). В частности, будем называть \mathfrak{A} замкнутым, если оно содержит все свои предельные точки, и оно называется всюду плотным, если его предельные точки включают все \mathfrak{N} .

Мы должны еще доказать, что $af, f + g, (f, g)$ непрерывны по всем своим переменным. Поскольку

$$\|af - af'\| = |a| \cdot \|f - f'\|,$$

$$\|(f + g) - (f' + g')\| = \|(f - f') + (g - g')\| \leq \|f - f'\| + \|g - g'\|,$$

то первые два утверждения очевидны. Далее, из

$$\|f - f'\| < \epsilon, \quad \|g - g'\| < \epsilon$$

при подстановке $f' - f = \varphi, g' - g = \psi$ следует, что

$$\begin{aligned} |(f, g) - (f', g')| &= |(f, g) - (f + \varphi, g + \psi)| = \\ &= |(\varphi, g) + (f, \psi) + (\varphi, \psi)| \leq \\ &\leq |(\varphi, g)| + |(f, \psi)| + |(\varphi, \psi)| \leq \\ &\leq \|\varphi\| \cdot \|g\| + \|f\| \cdot \|\psi\| + \|\varphi\| \cdot \|\psi\| \leq \\ &\leq \epsilon (\|f\| + \|g\| + \epsilon). \end{aligned}$$

При $\epsilon \rightarrow 0$ это выражение стремится к нулю и может быть сделано меньше любого $\delta > 0$.

⁴⁴) Используют также следующее определение предельной точки: для любого $\epsilon > 0$ найдется такое f' из \mathfrak{N} , что $\|f - f'\| < \epsilon$. Эквивалентность обоих определений можно показать дословно так же, как это делается в обычном анализе.

Свойства **A.** и **B.** позволяют нам, как мы видели, сказать об \mathfrak{N} довольно много, однако они все же недостаточны, чтобы отличить \mathfrak{N}_n друг от друга или от \mathfrak{N}_∞ — ведь о числе измерений пространства до сих пор не было сказано ни слова. Это понятие известным образом связано с максимальным числом линейно независимых векторов. Если такое максимальное число $n = 1, 2, \dots$ существует, то для этого n мы можем утверждать, что

C⁽ⁿ⁾. Существует точно n линейно-независимых векторов.

Это значит, что можно указать n таких векторов, но $n+1$ не существует.

Если же не имеется максимального числа, то тогда мы утверждаем, что

C^(∞). Существует произвольно много линейно-независимых векторов.

Это значит, что для каждого $k = 1, 2, \dots$ можно указать k таких векторов.

Итак, **C.** не является собственно новым постулатом. Если имеют место **A.**, **B.**, то либо одно из **C⁽ⁿ⁾.**, либо **C^(∞).** также обязательно имеют место. Судя по тому, какое из них мы выберем, мы получим различные пространства \mathfrak{N} . Мы увидим, что из **C⁽ⁿ⁾.** следует, что \mathfrak{N} обладает всеми свойствами n -мерного (комплексного) евклидова пространства. Напротив, постулата **C^(∞).** не хватит, чтобы обеспечить тождество \mathfrak{N} с гильбертовым пространством \mathfrak{N}_∞ , нам потребуются для этого еще два постулата **D.** и **E.**. Точнее, дело обстоит следующим образом: мы покажем, что \mathfrak{N} с **A.**, **B.** и **C⁽ⁿ⁾.** обладает всеми свойствами \mathfrak{N}_n и, в частности, свойствами **D.** и **E.**, которые будут сейчас сформулированы (и которые, таким образом, следуют из **A.**, **B.** и **C⁽ⁿ⁾.**). Далее мы покажем, что \mathfrak{N} с **A.**, **B.**, **C^(∞).**, **D.**, **E.** обладает всеми свойствами \mathfrak{N}_∞ , однако в этом случае постулаты **D.** и **E.** существенны (т. е. они не следуют из **A.**, **B.**, **C^(∞).**). Мы перейдем теперь к формулировке **D.** и **E.**, а доказательство того, что все \mathfrak{N}_n , \mathfrak{N}_∞ обладают такими свойствами, будет несколько отложено (см. II. 3).

D. Пространство \mathfrak{N} полно⁴⁵⁾.

Это значит, что если последовательность f_1, f_2, \dots в \mathfrak{N} удовлетворяет критерию сходимости Коши (для каждого $\varepsilon > 0$ существует такое $N = N(\varepsilon)$, что $\|f_m - f_n\| < \varepsilon$ для всех $m, n \geq N$), то

⁴⁵⁾ Мы для кратности пользуемся этими топологическими терминами. (Ср. Hausdorff, Mengenlehre, Berlin 1927. Русский перевод; Хаусдорф. Теория множеств, ОНТИ, 1937). Они будут пояснены при дальнейшем изложении.

она сходится, т. е. обладает пределом f (см. определение этого понятия, данное выше).

E. Пространство \mathfrak{H} сепарабельно⁴⁵⁾.

Это значит, что имеется последовательность f_1, f_2, \dots в \mathfrak{H} , которая всюду плотна в \mathfrak{H} .

В II. 2 мы, как сказано, построим «геометрию» \mathfrak{H} , исходя из этих основных положений, и покажем ее тождественность с геометрией \mathfrak{H}_n или \mathfrak{H}_∞ соответственно.

2. Геометрия гильбертова пространства

Мы начнем с двух определений. Первое из них содержит ровно столько от тригонометрии, сколько нужно для наших целей: понятие о прямом угле — ортогональность.

Определение 4. Два элемента f и g из \mathfrak{H} ортогональны, если $(f, g) = 0$. Два линейных многообразия \mathfrak{M} и \mathfrak{N} ортогональны, если каждый элемент из \mathfrak{M} ортогонален каждому элементу из \mathfrak{N} . Множество \mathfrak{O} называется ортонормированной системой, если для всех f, g из \mathfrak{O}

$$(f, g) = \begin{cases} 1 & \text{для } f = g, \\ 0 & \text{для } f \neq g \end{cases}$$

(т. е. каждые два различных элемента ортогональны и каждый элемент по длине равен единице⁴⁶⁾). В частности, \mathfrak{O} будет называться полной, если она не может быть подмножеством какой-либо другой ортонормированной системы, содержащей дополнительные элементы⁴⁷⁾.

Заметим еще, что утверждение о полноте ортогональной системы \mathfrak{O} означает, очевидно, что не существует f с $\|f\| = 1$, который был бы ортогонален ко всей \mathfrak{O} (ср. прим. ⁴⁶⁾). Но будь f просто отличен от нуля и ортогонален ко всей системе \mathfrak{O} , то $f' = \frac{f}{\|f\|} \cdot f$ (ведь $\|f\| > 0$) удовлетворяет всем требованиям: $\|f'\| = \frac{1}{\|f\|} \|f\| = 1$ и f' ортогонален к \mathfrak{O} . Следовательно, полнота \mathfrak{O} требует, чтобы любой f , ортогональный ко всей системе \mathfrak{O} , исчезал.

Второе определение таково, что оно существенно только для \mathfrak{H}_∞ , поскольку в \mathfrak{H}_n каждое линейное многообразие — такого типа, как то, которое им описывается (ср. конец II. 3). Поэтому мы не можем дать интуитивно-геометрическую картину его смысла.

⁴⁶⁾ Действительно, $\|f\| = \sqrt{(f, f)} = 1$.

⁴⁷⁾ Как видно, полные ортогональные системы соответствуют декартовым системам координат (т. е. совокупностям единичных векторов, направленных вдоль их осей) в \mathfrak{H}_n .

Определение 5. Линейное многообразие, которое одновременно замкнуто, назовем замкнутым линейным многообразием. Если \mathcal{A} есть некоторое множество из \mathcal{M} и мы дополним $\{\mathcal{A}\}$ (линейное многообразие, натянутое на \mathcal{A}) всеми его предельными точками, мы получим замкнутое линейное многообразие, содержащее \mathcal{A} . При этом оно будет подмножеством каждого другого замкнутого линейного многообразия, тоже содержащего \mathcal{A} ⁴⁸⁾. Мы назовем его замкнутым линейным многообразием, натянутым на \mathcal{A} , и обозначим $[\mathcal{A}]$.

Перейдем теперь к более детальному анализу \mathcal{M} и, в частности, к полным ортогональным системам. К тем теоремам, для которых в дополнение к **A.**, **B.** потребуются $C^{(n)}$, или $C^{(\infty)}$, **D.** и **E.**, мы будем добавлять соответственно индекс (n) или (∞) . Теоремы общие для обоих случаев оставим по-прежнему без индексов.

Теорема 3⁽ⁿ⁾. Каждая ортонормированная система имеет $\leq n$ элементов и будет полной тогда и только тогда, когда она имеет n элементов.

Замечание. Из первого утверждения следует, что существует максимальное значение для числа элементов ортогональных систем; те ортогональные системы, для которых достигается это максимальное значение, оказываются, по определению, полными. Итак, в случае $C^{(n)}$ существуют полные ортогональные системы и каждая такая система имеет n элементов.

Доказательство. Каждая ортогональная система (если она конечна) линейно-независима. Если ее элементы суть $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m$, то из

$$a_1\varphi_1 + \dots + a_m\varphi_m = 0$$

следует, что $a_\mu = 0$ ($\mu = 1, 2, \dots, m$); в этом можно убедиться, образуя внутреннее произведение с φ_μ . Следовательно, в силу $C^{(n)}$ система не может иметь $n+1$ элемент. Произвольная ортогональная система, таким образом, не может иметь подсистем с $n+1$ элементами. Следовательно, она конечна и содержит $\leq n$ элементов.

Система из n элементов не допускает расширения и, следовательно, полна. Однако система с $m < n$ элементами $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ не полна. Действительно, среди линейных комбинаций $a_1\varphi_1 + \dots + a_m\varphi_m$ не может быть $n > m$ линейно-независимых. Следовательно, в силу $C^{(n)}$ должен существовать элемент f , отличный от всех $a_1\varphi_1 + \dots + a_m\varphi_m$, т. е. такой, для которого

$$\psi = f - a_1\varphi_1 - \dots - a_m\varphi_m$$

⁴⁸⁾ Как линейное многообразие, оно должно содержать $\{\mathcal{A}\}$ и, поскольку оно замкнуто, то и предельные точки $[\mathcal{A}]$.

всегда отличен от нуля. Далее, $(\psi, \varphi_\mu) = 0$ означает, что $a_\mu = (f, \varphi_\mu)$ ($\mu = 1, 2, \dots, m$). Следовательно, если это условие может одновременно выполняться для всех $\mu = 1, 2, \dots, m$, то оно определяет таким образом ψ , который показывает, что система $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ не полна.

Теорема 3^(∞). Каждая ортонормированная система конечна или есть счетно-бесконечная последовательность; если она полна, то она заведомо бесконечна.

Замечание. Значит, мы можем записывать все ортогональные системы в виде (возможно обрывающихся, т. е. конечных) последовательностей $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, что мы действительно и сделаем. Подчеркнем, что теперь число элементов системы только необходимо для ее полноты, но в отличие от случая $C^{(n)}$, этого условия еще недостаточно⁴⁹⁾.

Доказательство. Пусть \mathfrak{D} — ортонормированная система, f и g — два различных ее элемента. Тогда

$$(f - g, f - g) = (f, f) + (g, g) - (f, g) - (g, f) = 2,$$

$$\|f - g\| = \sqrt{2}.$$

Пусть теперь f_1, f_2, \dots — существующая согласно *Е*. последовательность, всюду плотная в \mathfrak{J} . Для каждого f из \mathfrak{D} существует некоторое f_m из последовательности, для которого $\|f - f_m\| < \frac{1}{2}\sqrt{2}$. f_m и f_n , соответствующие f и g , должны быть различны, поскольку из $f_m = f_n$ следовало бы, что

$$\|f - g\| = \|(f - f_m) - (g - g_m)\| \leq$$

$$\leq \|f - f_m\| + \|g - g_m\| < \frac{1}{2}\sqrt{2} + \frac{1}{2}\sqrt{2} = \sqrt{2}.$$

Значит, каждому f из \mathfrak{D} соответствует f_m из последовательности f_1, f_2, \dots с различными f_m для различных f . Следовательно, \mathfrak{D} или конечна, или является последовательностью.

Как и при доказательстве *теоремы 3⁽ⁿ⁾*, показывается, что если в \mathfrak{J} есть $>m$ линейно-независимых элементов, то система $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ не может быть полной. Однако поскольку в силу $C^{(\infty)}$, при любом m в \mathfrak{J} имеется больше m линейно-независимых векторов, то полная система должна быть бесконечной.

Следующие теоремы в той мере, в какой они говорят о сходимости, относятся только к $C^{(\infty)}$, однако желательно их сформулировать в общей форме, имея в виду другие утверждения, которые в них содержатся.

⁴⁹⁾ Пусть система $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ полна. Тогда система $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ не полна, хотя она и бесконечна!

Теорема 4. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — ортонормированная система. Тогда все ряды $\sum_v (f, \varphi_v) \overline{(g, \varphi_v)}$, если только они вообще имеют бесконечно много членов, абсолютно сходятся. В частности, для $f = g$ всегда $\sum_v |(f, \varphi_v)|^2 \leq \|f\|^2$.

Доказательство. Пусть $a_v = (f, \varphi_v)$, $v = 1, 2, \dots$. Тогда $f - \sum_{v=1}^N a_v \varphi_v = \psi$ ортогональна ко всем φ_v , $v = 1, 2, \dots, N$ (ср. доказательство теоремы 3⁽ⁿ⁾). Поскольку $f = \sum_{v=1}^N a_v \varphi_v + \psi$, то

$$(f, f) = \sum_{v, \mu=1}^N a_\mu \overline{a_v} (\varphi_\mu, \varphi_v) + \sum_{v=1}^N \overline{a_v} (\psi, \varphi_v) + \sum_{v=1}^N a_v (\varphi_v, \psi) + (\psi, \psi) = \\ = \sum_{v=1}^N |a_v|^2 + (\psi, \psi) \leq \sum_{v=1}^N |a_v|^2,$$

т. е. $\sum_{v=1}^N |a_v|^2 \leq \|f\|^2$. Если система $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ конечна, то прямо следует, что

$$\sum_v |a_v|^2 = \|f\|^2,$$

если же она бесконечна, то при $N \rightarrow \infty$ мы убеждаемся в абсолютной сходимости $\sum_v |a_v|^2$ и в том, что $\sum_v |a_v|^2 \leq \|f\|^2$. Тем самым второе утверждение доказано.

Вследствие того, что $|(f, \varphi_v)(\overline{(g, \varphi_v)})| \leq \frac{1}{2} \{|(f, \varphi_v)|^2 + |(g, \varphi_v)|^2\}$, более общее утверждение о сходимости — первое предложение теоремы — следует из уже установленного факта сходимости.

Теорема 5. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — бесконечная ортонормированная система. Тогда ряд $\sum_{v=1}^{\infty} x_v \varphi_v$ сходится тогда и только тогда, когда сходится ряд $\sum_{v=1}^{\infty} |x_v|^2$ (члены последнего ряда суть вещественные неотрицательные числа и, следовательно, ряд или сходится, или собственно расходится к $+\infty$).

Доказательство. Поскольку высказанное предложение нетривиально лишь для $C^{(\infty)}$, то мы можем пользоваться **D** — критерием сходимости Коши. Согласно ему сумма $\sum_{v=1}^{\infty} x_v \varphi_v$ сходится, иными сло-

вами, последовательность частных сумм $\sum_{v=1}^N x_v \varphi_v$ сходится при $N \rightarrow \infty$ тогда, когда для любого $\epsilon > 0$ существует некоторое $N = N(\epsilon)$ такое, что для $L, M \geq N$ будет $\left\| \sum_{v=1}^L x_v \varphi_v - \sum_{v=1}^M x_v \varphi_v \right\| < \epsilon$. Мы предположим, что $L > M \geq N$, тогда

$$\left\| \sum_{v=1}^L x_v \varphi_v - \sum_{v=1}^M x_v \varphi_v \right\| = \left\| \sum_{v=M+1}^L x_v \varphi_v \right\| < \epsilon,$$

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{v=M+1}^L x_v \varphi_v \right\|^2 &= \left(\sum_{v=M+1}^L x_v \varphi_v, \sum_{v=M+1}^L x_v \varphi_v \right) = \\ &= \sum_{\mu, v=M+1}^L x_\mu \bar{x}_v (\varphi_\mu, \varphi_v) = \sum_{v=M+1}^L |x_v|^2 = \sum_{v=1}^L |x_v|^2 - \sum_{v=1}^M |x_v|^2. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$0 \leq \sum_{v=1}^L |x_v|^2 - \sum_{v=1}^M |x_v|^2 < \epsilon^2.$$

Однако это есть в точности условие сходимости Коши для последовательности $\sum_{v=1}^N |x_v|^2$, $N \rightarrow \infty$, т. е. для ряда $\sum_{v=1}^\infty |x_v|^2$.

Следствие. При $f = \sum_v x_v \varphi_v$, $(f, \varphi_v) = x_v$ (независимо от

того, является ли ортонормированная система конечной или бесконечной, однако в последнем случае, конечно, предполагается сходимость).

Доказательство. При $N \geq v$ имеем

$$\left(\sum_{\mu=1}^N x_\mu \varphi_\mu, \varphi_v \right) = \sum_{\mu=1}^N x_\mu (\varphi_\mu, \varphi_v) = x_v.$$

В случае конечной системы $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, мы можем положить N равным наибольшему индексу. Для бесконечной системы $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ можно считать $N \rightarrow \infty$, вследствие непрерывности внутреннего произведения. В обоих случаях мы получаем $(f, \varphi_\mu) = x_\mu$.

Теорема 6. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ортонормированная система, а f произвольно. Тогда $f' = \sum_v x_v \varphi_v$, $x_v = (f, \varphi_v)$ ($v = 1, 2, \dots$)

всегда сходится, если ряд бесконечен. Выражение $f - f'$ ортогонально к $\varphi_1, \varphi_2, \dots$

Доказательство. Сходимость следует из *теорем 4., 5.*; согласно *следствию теоремы 5.* имеем $(f', \varphi_v) = x_v = (f, \varphi_v)$, $(f - f', \varphi_v) = 0$.

После этой подготовки мы можем дать общий, т. е. пригодный даже для $\mathbf{C}^{(\infty)}$, критерий полноты ортонормированной системы.

Теорема 7. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — ортонормированная система.

Тогда для полноты системы необходимо и достаточно каждое из следующих условий:

α) Растворяющее $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ замкнутое линейное многообразие $[\varphi_1, \varphi_2, \dots]$ равно \mathfrak{N} .

β) Всегда $f = \sum_v x_v \varphi_v$, где $x_v = (f, \varphi_v)$ ($v = 1, 2, \dots$), сумма сходится по *теореме 6*).

γ) Всегда $(f; g) = \sum_v (f, \varphi_v)(\overline{g}, \overline{\varphi_v})$ (сумма сходится абсолютно по *теореме 4*).

Доказательство. Если $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ полна, то $f = \sum_v x_v \varphi_v$ равно нулю ($x_v = (f, \varphi_v)$, $v = 1, 2, \dots$), поскольку f ортогонально к $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ в силу *теоремы 6*. И тогда **β)** удовлетворено. Если **β)** выполняется, то каждый f есть предел своих частных сумм $\sum_{v=1}^N x_v \varphi_v$, $N \rightarrow \infty$

(если $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ в самом деле бесконечна) и, следовательно, принадлежит к $[\varphi_1, \varphi_2, \dots]$. Отсюда $[\varphi_1, \varphi_2, \dots] = \mathfrak{N}$, т. е. **α)** удовлетворено. Если **α)** выполняется, мы можем рассуждать следующим образом: Если f ортогонален ко всем $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, то он также ортогонален ко всем их линейным комбинациям, и, в силу непрерывности, также ко всем предельным точкам оных, т. е. ко всему $[\varphi_1, \varphi_2, \dots]$. Следовательно, он ортогонален ко всему \mathfrak{N} , а значит, и к себе самому: $(f, f) = 0$, $f = 0$. И, следовательно, $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ полна.

Итак, мы имеем такую логическую схему:

полнота $\rightarrow \beta \rightarrow \alpha \rightarrow$ полнота.

Тем самым показано, что **α)** или **β)** действительно необходимые и достаточные условия полноты.

Из **γ)** следует, что если f ортогонален ко всем $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и если мы положим $f = g$, то получим $(f, f) = \sum_v 0 \cdot 0 = 0$, $f = 0$, тем самым $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ полна. С другой стороны, из **β)** (которое ведь теперь эквивалентно полноте) следует

$$\begin{aligned} (f, g) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{v=1}^N (f, \varphi_v) \cdot \varphi_v, \quad \sum_{v=1}^N (g, \varphi_v) \cdot \varphi_v \right) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{v, u=1}^N (f, \varphi_v)(\overline{g}, \overline{\varphi_u})(\varphi_u, \varphi_v) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{v=1}^N (f, \varphi_v)(\overline{g}, \overline{\varphi_v}) = \sum_{v=1}^{\infty} (f, \varphi_v)(\overline{g}, \overline{\varphi_v}) \end{aligned}$$

(если система $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ конечна, то в предельном процессе нет необходимости), т. е. γ). Итак, γ тоже является необходимым и достаточным условием.

Теорема 8. Каждой последовательности f_1, f_2, \dots соответствует некая ортонормированная система $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, на которую натягивается то же самое линейное многообразие, что и на исходную последовательность (обе последовательности могут быть конечны).

Доказательство. Сначала заменим f_1, f_2, \dots подпоследовательностью g_1, g_2, \dots , которая растягивает то же линейное многообразие и состоит из линейно-независимых элементов. Это можно сделать так: Пусть g_1 — первый из элементов f_n , отличный от нуля; g_2 — первый из f_n , отличный от всех $a_1 g_1$; g_3 — первый из f_n , отличный от всех $a_1 g_1 + a_2 g_2$; ... (Если для какого-либо p не существует ни одного f_n , отличного от всех $a_1 g_1 + \dots + a_p g_p$, мы обрываем систему на g_p .) Такие g_1, g_2, \dots , обеспечат, очевидно, желаемый результат.

Образуем теперь

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= g_1, & \varphi_1 &= \frac{1}{\|\gamma_1\|} \cdot \gamma_1, \\ \gamma_2 &= g_2 - (g_2, \varphi_1) \cdot \varphi_1, & \varphi_2 &= \frac{1}{\|\gamma_2\|} \cdot \gamma_2, \\ \gamma_3 &= g_3 - (g_3, \varphi_1) \cdot \varphi_1 - (g_3, \varphi_2) \cdot \varphi_2, & \varphi_3 &= \frac{1}{\|\gamma_3\|} \cdot \gamma_3, \\ &\dots &&\dots \end{aligned}$$

(Это — известный «процесс ортогонализации» E. Schmidt'a.) Построение каждого из φ_p действительно возможно, т. е. все знаменатели $\|\gamma_p\|$ отличны от нуля, ибо, иначе, будь $\|\gamma_p\| = 0$, g_p было бы линейной комбинацией $\varphi_1, \dots, \varphi_{p-1}$, т. е. линейной комбинацией g_1, \dots, g_{p-1} , что противоречит допущенному. Далее ясно, что g_p — линейная комбинация $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, а φ_p — линейная комбинация g_1, \dots, g_p , следовательно g_1, g_2, \dots и $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ определяют одно и то же линейное многообразие.

Наконец, по построению $\|\varphi_p\| = 1$ и для $q < p$ $(\varphi_p, \varphi_q) = 0$, следовательно и $(\varphi_p, \varphi_q) = 0$. Поскольку мы можем поменять p и q местами, то последнее справедливо всегда для $p \neq q$. Следовательно, $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ есть ортонормированная система.

Теорема 9. Для всякого замкнутого линейного многообразия \mathfrak{M} найдется ортонормированная система, как раз растягивающая \mathfrak{M} , как замкнутое линейное многообразие.

Доказательство. В случае $C^{(n)}$ эта теорема самоочевидна, ибо если \mathfrak{M} удовлетворяет А., В. и $C^{(n)}$, каждое линейное многообра-

зие \mathfrak{M} в \mathfrak{N} удовлетворяет **A.**, **B.** и **C^(m)**, с некоторым $m \leq n$, так что к \mathfrak{M} применимо *замечание к теореме 3⁽ⁿ⁾*: существует ортонормальная система $\varphi_1, \dots, \varphi_m$, полная в \mathfrak{M} , что, вследствие *теоремы 7. а)*, и есть в точности утверждение, которое надо доказать. (Как можно видеть, предпосылка о замкнутом характере \mathfrak{M} сама по себе не необходима, поскольку она фактически доказывается. Ср. со сказанным перед *определением 5.*)

В случае **C^(∞)**, напомним, что, согласно **E.**, \mathfrak{N} сепарабельно. Мы хотим показать, что то же будет для \mathfrak{M} — что вообще любое подмножество \mathfrak{N} сепарабельно. С этой целью образуем последовательность f_1, f_2, \dots , всюду плотную в \mathfrak{N} (ср. **E.** в II. 1), и для каждого f_n и $m = 1, 2, \dots$ построим шар \mathfrak{K}_{nm} , содержащий все f с $\|f - f_n\| < \frac{1}{m}$. Для каждого \mathfrak{K}_{nm} , содержащего точки из \mathfrak{M} , выберем одну такую точку g_{nm} . Итак, для некоторых n и m такие точки g_{nm} могут быть не определены, но определенные точки g_{nm} образуют последовательность в \mathfrak{M} ⁵⁰⁾. Пусть f — любая точка из \mathfrak{M} и $\epsilon > 0$. Тогда существует некоторое m такое, что $\frac{1}{m} < \frac{\epsilon}{2}$, и некоторый f_n такой, что $\|f_n - f\| < \frac{1}{m}$. Поскольку \mathfrak{K}_{nm} теперь содержит точку из \mathfrak{M} (именно f), то g_{nm} определена и $\|f_n - g_{nm}\| < \frac{1}{m}$, значит, $\|f - g_{nm}\| < \frac{2}{m} < \epsilon$. Следовательно, f есть предельная точка определенных выше g_{nm} и, значит, эта последовательность приводит нас к желанному результату.

Обозначим через f_1, f_2, \dots последовательность из \mathfrak{M} , всюду плотную в \mathfrak{M} . Замкнутое линейное многообразие, определяемое ею $[f_1, f_2, \dots]$, содержит все свои предельные точки и, следовательно, все \mathfrak{M} ; однако поскольку \mathfrak{M} есть замкнутое линейное многообразие, а f_1, f_2, \dots принадлежат ему, то, следовательно, $[f_1, f_2, \dots]$ есть часть его, следовательно, оно равно \mathfrak{M} . Выберем теперь по *теореме 8.* ортонормированную систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Тогда $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots\} = [f_1, f_2, \dots]$, и если мы присоединим к обеим сторонам предельные точки, то получим $[\varphi_1, \varphi_2, \dots] = [f_1, f_2, \dots] = \mathfrak{M}$. В этом и состояло наше утверждение.

Надо теперь только положить в *теореме 9.* $\mathfrak{M} = \mathfrak{N}$, и мы получим по *теореме 7. а)* полную ортонормированную систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Итак: существуют полные ортонормированные системы. На основании такой системы мы можем теперь показать, что простран-

⁵⁰⁾ Вспомним, что двойная последовательность g_{nm} ($n, m = 1, 2, \dots$) может быть записана и как простая последовательность $g_{11}, g_{12}, g_{21}, g_{13}, g_{22}, g_{31}, \dots$

ство \mathfrak{F} есть \mathfrak{F}_n или \mathfrak{F}_∞ (судя по тому, имеет ли место $C^{(n)}$, или $C^{(\infty)}$), т. е. полностью определить его свойства.

Нам осталось только показать, что \mathfrak{F} допускает одно-однозначное отображение на множество всех $\{x_1, \dots, x_n\}$ или всех $\{x_1, x_2, \dots\}$ $\left(\sum_{v=1}^{\infty} |x_v|^2 \text{ конечна} \right)$.

1. Из $f \leftrightarrow \{x_1, x_2, \dots\}$ следует $af \leftrightarrow \{ax_1, ax_2, \dots\}$.

2. Из $\begin{cases} f \leftrightarrow \{x_1, x_2, \dots\} \\ g \leftrightarrow \{y_1, y_2, \dots\} \end{cases}$ следует $f + g \leftrightarrow \{x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots\}$.

3. Из $\begin{cases} f \leftrightarrow \{x_1, x_2, \dots\} \\ g \leftrightarrow \{y_1, y_2, \dots\} \end{cases}$ следует $(f, g) = \sum_{v=1}^{n \text{ или } \infty} x_v \bar{y}_v$.

(в бесконечном случае в 3. надо еще показать наличие абсолютной сходимости). Правило этого сопоставления $f \leftrightarrow \{x_1, x_2, \dots\}$ мы сейчас приведем.

Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — полная ортонормированная система; в случае $C^{(n)}$, она обрывается на φ_n , в случае $C^{(\infty)}$, она бесконечна (*теоремы* $\mathcal{Z}^{(n)}$. и $\mathcal{Z}^{(\infty)}$.). Положим

$$f = \sum_{v=1}^{n \text{ или } \infty} x_v \varphi_v.$$

В силу *теоремы 5*, этот ряд сходится и в бесконечном случае $\left(\text{поскольку } \sum_{v=1}^{\infty} |x_v|^2 \text{ конечна} \right)$, т. е. пространства \mathfrak{F}_n или соответственно \mathfrak{F}_∞ им полностью исчерпываются. Но в силу *теоремы 7. β*) и поскольку $\sum_{v=1}^{n \text{ или } \infty} |(f, \varphi_v)|^2$ конечна (*теорема 4*), элементы \mathfrak{F} также будут исчерпаны [следует подставить $x_v = (f, \varphi_v)$]. Очевидно, что только один f соответствует каждому $\{x_1, x_2, \dots\}$, в то время как обратное следует из *следствия теоремы 5*.

Утверждения 1. и 2. выполнены очевидным образом, а 3. следует из *теоремы 7. γ*.

3. Отступление: Об условиях A . — E .⁵¹⁾

Мы еще должны доказать утверждение 2. из I. 4: что F_Z, F_Ω действительно выполняют условия A . — E . При этом достаточно рассмотреть F_Ω , так как мы уже показали в II. 2, что \mathfrak{F} с A . — E . по всем своим свойствам идентично с \mathfrak{F}_∞ , т. е. с F_Z , так что A . — E . должны выполняться и для F_Z . Кроме того, мы докажем

⁵¹⁾ Этот раздел не является необходимым для понимания дальнейших частей текста.

упомянутую в II. 2 независимость условий D , E от A . — $C^{(\infty)}$, и тот факт, что они следуют из A . — $C^{(n)}$, т. е. что они имеют место в \mathfrak{M}_n . Эти три чисто математических вопроса составляют содержание этого раздела.

Начнем с доказательства выполнения свойств A . — E в F_2 . Для этого нам придется опереться на лебегово понятие интеграла, относительно обоснования которого мы лишь сошлемся на специальную литературу по этому вопросу⁵²⁾. (Интеграл Лебега важен нам только в данном случае, и знакомство с ним не является необходимым для чтения следующих глав.)

В I. 4 мы ввели Ω как k -мерное пространство элементов q_1, \dots, q_k и F_2 как множество всех функций $f(q_1, \dots, q_k)$ с конечным $\int_{\Omega} \dots \int |f(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$; при этом все q_1, \dots, q_k могут меняться от $-\infty$ до $+\infty$. Впрочем, все наши рассуждения останутся справедливыми, и даже вывод будет по большей части дословно тот же, и если бы мы ограничили интервалы изменения q_1, \dots, q_k (так чтобы Ω было, например, полупространством, внутренностью куба, внутренностью сферы или внешностью этих фигур и т. д.), и даже если бы мы выбрали в качестве Ω искривленную поверхность (как, например, поверхность сферы и т. п.). Но для того, чтобы не потеряться в ненужных усложнениях (их сможет без затруднений рассмотреть читатель по образцу нашего типичного доказательства), мы ограничимся указанным простейшим случаем. Итак, пройдем последовательно A . — E одно за другим.

Относительно A . Мы должны показать, что если f и g принадлежат F , то af , $f \pm g$ также принадлежат ему. Иными словами, если конечны

$$\int_{\Omega} |f|^2, \quad \int_{\Omega} |g|^2$$

(мы ввели сокращенное обозначение для $\int_{\Omega} \dots \int |f(q_1, \dots, q_k)|^2 \times \dots \times dq_1 \dots dq_k$ и $\int_{\Omega} \dots \int |g(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$, поскольку это не может привести к путанице), то $\int_{\Omega} |af|^2 = |a|^2 \int_{\Omega} |f|^2$, $\int_{\Omega} |f \pm g|^2$

⁵²⁾ Например, *Carathéodory, Vorlesungen über reelle Funktionen*, Leipzig, 1927, в особенности стр. 237—274; Камке, *Das Lebesguesche Integral*, Leipzig, 1925.

[Из русских руководств по интегралу Лебега можно рекомендовать читателю, например, книгу Натаансона, Теория функций вещественной переменной, Гостехиздат, 1950 г., или соответствующую главу в V томе Курса высшей математики В. И. Смирнова, Гостехиздат, 1947 г. (Прим. ред.)]

также конечны. Первое утверждение тривиально. Вследствие того, что $|f \pm g|^2 = |f|^2 + |g|^2 \pm 2 \operatorname{Re}(fg)$ ⁵³⁾, справедливость второго будет установлена, как только будет показано, что интеграл $\int_{\Omega} |f \cdot \bar{g}| = \int_{\Omega} |f| \cdot |g|$ конечен. Однако, поскольку $|f| \cdot |g| \leq \frac{1}{2}(|f|^2 + |g|^2)$, то последнее следует непосредственно из исходной гипотезы.

Относительно B. Мы определим (f, g) как $\int_{\Omega} f \bar{g}$. Этот интеграл,

как мы только что убедились, сходится абсолютно. Все свойства, постулированные в **B.**, очевидны, кроме последнего: что $(f, f) = 0$ влечет за собой $f \equiv 0$. Теперь $(f, f) = 0$ означает, что

$\int_{\Omega} |f|^2 = 0$. Следовательно, множество точек, на котором $|f|^2 > 0$,

т. е. $f(q_1, \dots, q_k) \neq 0$, должно иметь лебегову меру нуль. Если мы теперь будем считать две функции f и g , для которых $f \neq g$ [т. е. $f(q_1, \dots, q_k) \neq g(q_1, \dots, q_k)$] имеет место только на множестве q_1, \dots, q_k лебеговой меры нуль, функциями несущественно различными⁵⁴⁾, то мы можем сделать тогда вывод, что $f \equiv 0$.

Относительно C. Пусть O_1, \dots, O_m — m областей в Ω , никакие две из которых не имеют ни одной общей точки, и пусть мера Лебега каждой из них больше нуля, но конечна. Пусть $f_l(q_1, \dots, q_k)$ есть 1 в O_l и нуль повсюду, кроме O_l . Поскольку $\int_{\Omega} |f_l|^2$ равен

мере O_l , то f_l принадлежит F_{Ω} ($l = 1, \dots, n$). Эти f_1, \dots, f_n линейно независимы. Действительно, $a_1 f_1 + \dots + a_n f_n \equiv 0$ означает что функция в левой части не исчезает лишь на множестве меры нуль. Следовательно, она имеет корни в каждой O_l , но поскольку она постоянна и равна a_l в O_l , то $a_l = 0$, $l = 1, \dots, n$. Поскольку это построение проходит для всех n , то должно иметь место $C^{(\infty)}$.

Относительно D. Пусть последовательность f_1, \dots, f_n удовлетворяет критерию сходимости Коши, т. е. для каждого $\epsilon > 0$ существует некоторое $N = N(\epsilon)$, такое, что $\int_{\Omega} |f_m - f_n|^2 < \epsilon$ при $m, n \geq N$. Выберем $n_1 = N\left(\frac{1}{8}\right)$; $n_2 \geq n_1$, $N\left(\frac{1}{8^2}\right)$; $n_3 \geq n_1$, n_2 ,

⁵³⁾ Вообще

$$\begin{aligned} |x+y|^2 &= (x+y)(\bar{x}+\bar{y}) = x\bar{x} + y\bar{y} + (x\bar{y} + \bar{x}y) = \\ &= |x|^2 + |y|^2 + 2 \operatorname{Re}(xy). \end{aligned}$$

⁵⁴⁾ Это обычное в теории интеграла Лебега определение.

$N\left(\frac{1}{8^3}\right); \dots$ Тогда $n_1 \leq n_2 \leq \dots; n_v, n_{v+1} \geq N\left(\frac{1}{8^v}\right)$; следовательно, $\int_{\Omega} |f_{n_{v+1}} - f_{n_v}|^2 < \left(\frac{1}{8^v}\right)$. Рассмотрим теперь множество $P^{(v)}$ всех точек, для которых $|f_{n_{v+1}} - f_{n_v}| > \frac{1}{2^v}$. Если его лебегова мера равна $\mu^{(v)}$, то

$$\int_{\Omega} |f_{n_{v+1}} - f_{n_v}|^2 \geq \mu^{(v)} \left(\frac{1}{2^v}\right)^2 = \frac{\mu^{(v)}}{4^v}, \quad \frac{\mu^{(v)}}{4^v} < \frac{1}{8^v}, \quad \mu^{(v)} < \frac{1}{2^v}.$$

Рассмотрим также множество $Q^{(v)}$, возникающее при объединении $P^{(v)}, P^{(v+1)}, P^{(v+2)}, \dots$. Его мера Лебега

$$\leq \mu^{(v)} + \mu^{(v+1)} + \mu^{(v+2)} + \dots < \frac{1}{2^v} + \frac{1}{2^{v+1}} + \frac{1}{2^{v+2}} + \dots = \frac{1}{2^{v-1}}.$$

Вне $Q^{(v)}$ выполняется

$$|f_{n_{v+1}} - f_{n_v}| < \frac{1}{2^v}; \quad |f_{n_{v+2}} - f_{n_{v+1}}| < \frac{1}{2^{v+1}};$$

$$|f_{n_{v+3}} - f_{n_{v+2}}| < \frac{1}{2^{v+2}}, \dots$$

Следовательно, вообще для $v \leq v' \leq v''$

$$|f_{n_{v''}} - f_{n_{v'}}| \leq |f_{n_{v'+1}} - f_{n_{v'}}| + |f_{n_{v'+2}} - f_{n_{v'+1}}| + \dots$$

$$\dots + |f_{n_{v''}} - f_{n_{v''-1}}| < \frac{1}{2^{v'}} + \frac{1}{2^{v'+1}} + \dots + \frac{1}{2^{v''-1}} < \frac{1}{2^{v'-1}}.$$

При $v' \rightarrow \infty$ эта величина стремится к нулю, независимо от v'' , т. е. последовательность f_{n_1}, f_{n_2}, \dots удовлетворяет условию сходимости Коши, если q_1, \dots, q_k не лежит в $Q^{(v)}$. Поскольку (при фиксированных q_1, \dots, q_k) речь идет о числах, эта последовательность также будет сходиться. Значит, мы можем утверждать обратное: Если последовательность f_{n_1}, f_{n_2}, \dots не сходится при каких-либо значениях q_1, \dots, q_k , то они лежат в $Q^{(v)}$. Назовем Q множество всех значений q_1, \dots, q_k , для которых нет сходимости. Тогда Q есть подмножество $Q^{(v)}$ и его мера не больше, чем мера $Q^{(v)}$, т. е. $< \frac{1}{2^{v-1}}$. Это справедливо для любых v , так как Q определено независимо от v . Следовательно, Q имеет меру Лебега 0. Поэтому ничего не случится, если, например, положить все f_n в Q равными нулю (ср. прим. 54) на стр. 52). Но тогда f_{n_1}, f_{n_2}, \dots будет сходиться и в Q , т. е. везде.

Таким образом, мы описали подпоследовательность f_{n_1}, f_{n_2}, \dots последовательности f_1, f_2, \dots , сходящуюся в каждой точке q_1, \dots, q_k (нет необходимости, чтобы это было верно для всей f_1, f_2, \dots). Пусть предел f_{n_1}, f_{n_2}, \dots есть $f = f(q_1, \dots, q_k)$. Мы должны, стало быть, показать, что: 1. f принадлежит F_Ω , т. е. $\int_\Omega |f|^2$ конечен. 2. f есть предел f_{n_1}, f_{n_2}, \dots не только в смысле сходимости при каждом q_1, \dots, q_k , но также и в смысле «сходимости по длине» в пространстве Гильберта, т. е. $\|f - f_{n_y}\| \rightarrow 0$ или $\int_\Omega |f - f_{n_y}|^2 \rightarrow 0$. 3. В последнем смысле f — это даже предел всей последовательности f_1, f_2, \dots , т. е. $\|f - f_n\| \rightarrow 0$, или $\int_\Omega |f - f_n|^2 \rightarrow 0$.

Выберем $\varepsilon > 0$ и y_0 такое, что $n_{y_0} \geq N(\varepsilon)$ (например, $\frac{1}{8^{y_0}} \leq \varepsilon$),

и $y \geq y_0$, $n \geq N(\varepsilon)$. Тогда $\int_\Omega |f_{n_y} - f_n|^2 < \varepsilon$. Если мы устремим теперь $y \rightarrow \infty$, то подинтегральное выражение будет стремиться к $|f - f_n|^2$, следовательно (в соответствии с теоремой сходимости интеграла Лебега, ср. прим. 52) на стр. 51), $\int_\Omega |f - f_n|^2 \leq \varepsilon$. Соответственно, во-первых, интеграл $\int_\Omega |f - f_n|^2$ будет конечен, т. е. $f - f_n$ будет принадлежать F_Ω ; а так как f_n принадлежит F_Ω , то и f будет принадлежать F_Ω также; таким образом 1. доказано. Во-вторых, из полученного неравенства следует, что $\int_\Omega |f - f_n|^2 \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$ и, значит, 2. и 3. доказаны тоже.

Относительно Е.. Мы должны посмотреть последовательность функций f_1, f_2, \dots всюду вплотную в F_Ω .

Пусть $\Omega_1, \Omega_2, \dots$ — последовательность областей в Ω , покрывающих всю Ω , каждая из которых имеет конечную меру. (Пусть, например, Ω_N есть шар радиуса N с центром в начале координат.) Пусть $f = f(q_1, \dots, q_k)$ — некоторый элемент F_Ω . Определим $f_N = f_N(q_1, \dots, q_k)$ для каждого $N = 1, 2, \dots$:

$$f_N(q_1, \dots, q_k) = \begin{cases} f(q_1, \dots, q_k), & \begin{cases} \text{если } q_1, \dots, q_k \text{ лежит в } \Omega_N \\ \text{и } |f(q_1, \dots, q_k)| \leq N; \end{cases} \\ 0 & \text{во всех других случаях.} \end{cases}$$

При $N \rightarrow \infty$, $f_N(q_1, \dots, q_k) \rightarrow f(q_1, \dots, q_k)$ (начиная с некоторого N достигается даже равенство), следовательно, $|f - f_N|^2 \rightarrow 0$. Далее, $f - f_N$ равняется 0 или f , и поэтому $|f - f_N|^2 \leq |f|^2$. Следовательно, интегралы $\int_{\Omega} |f - f_N|^2$ мажорируются (конечным!) интегралом $\int_{\Omega} |f|^2$ не зависящим от n . Поскольку подынтегральные выражения стремятся к нулю, то же верно относительно интегралов (ср. цитированную выше теорему сходимости): $\int_{\Omega} |f - f_N|^2 \rightarrow 0$, $\|f - f_N\| \rightarrow 0$.

Назовем классом G класс всех функций $g = g(q_1, \dots, q_k)$, для которых множество всех точек, где $g \neq 0$, имеет конечную меру и которые удовлетворяют во всем пространстве неравенству $|g| \leq C$ с произвольным, но фиксированным C . Все определенные выше f_N принадлежат G . Следовательно, G всюду плотен в F_{Ω} .

Пусть g принадлежит G и $\epsilon > 0$. Пусть мера множества, где $g \neq 0$, есть M , а верхняя граница $|g|$ есть C . Выберем цепочку рациональных чисел $-C < p_1 < p_2 < \dots < p_t < C$ таким образом, чтобы было $p_1 < -C + \epsilon$, $p_2 < p_1 + \epsilon$, ..., $p_t < p_{t-1} + \epsilon$, $C < p_t + \epsilon$, что легко может быть сделано. Заменим теперь каждое значение $\operatorname{Re} g(q_1, \dots, q_k)$ на ближайшее p_s ($s = 1, 2, \dots, t$), оставляя лишь нуль по-прежнему нулем. Тогда мы получим некую новую функцию $h_1(q_1, \dots, q_k)$, которая повсюду отличается от $\operatorname{Re} g$ меньше чем на ϵ . Точно так построим $h_2(q_1, \dots, q_k)$ для $\operatorname{Im} g$. Тогда для $h = h_1 + ih_2$ имеем

$$\int_{\Omega} |g - h|^2 = \int_{\Omega} |\operatorname{Re} g - h_1|^2 + \int_{\Omega} |\operatorname{Im} g - h_2|^2 \leq M\epsilon^2 + M\epsilon^2 = 2M\epsilon^2,$$

$$\|g - h\| \leq \sqrt{2M}\epsilon.$$

Если дано $\delta > 0$, то положим $\epsilon < \frac{\delta}{\sqrt{2M}}$, и тогда $\|g - h\| < \delta$.

Назовем классом H класс всех функций $h = h(q_1, \dots, q_k)$, которые принимают только конечное число различных значений, — именно лишь значения вида $\rho + i\sigma$, где ρ и σ — рациональные числа, — и каждое такое значение, кроме нуля, лишь на множестве конечной меры. Построенные выше h принадлежат классу H и, следовательно, H всюду плотен в G , а следовательно также и в F_{Ω} .

Пусть Π — множество с конечной мерой Лебега. Определим функцию $f_{\Pi} = f_{\Pi}(q_1, \dots, q_k)$:

$$f_{\Pi}(q_1, \dots, q_k) = \begin{cases} 1 & \text{в } \Pi, \\ 0 & \text{всюду, кроме } \Pi. \end{cases}$$

Класс H , очевидно, состоит из всех

$$\sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} \quad (t = 1, 2, \dots; \rho_s, \sigma_s \text{ рациональны}).$$

Найдем теперь последовательность Π -множеств $\Pi^{(1)}, \Pi^{(2)}, \dots$ со следующим свойством: Для каждого Π -множества и для каждого $\epsilon > 0$ существует $\Pi^{(n)}$ такое, что мера множества всех точек, принадлежащих Π , но не $\Pi^{(n)}$, или принадлежащих $\Pi^{(n)}$, но не Π (такое множество называют разностью множеств Π и $\Pi^{(n)}$), меньше ϵ . Если мы имеем такую последовательность, то совокупность элементов вида

$$\sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n_s)}}$$

($t = 1, 2, \dots, \rho_s$ и σ_s рациональны, $n_s = 1, 2, \dots$) всюду плотна в H : Действительно, если мы выберем для каждого Π_s свое $\Pi^{(n_s)}$ соответственно предыдущему рассуждению, то

$$\begin{aligned} \int_Q \left| \sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} - \sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n_s)}} \right|^2 &\leqslant \\ &\leqslant \sum_{s=1}^t \int_Q |(\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} - (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n_s)}}|^2 = \\ &= \sum_{s=1}^t (\rho_s^2 + \sigma_s^2) \int_Q |f_{\Pi_s} - f_{\Pi^{(n_s)}}|^2 = \\ &= \sum_{s=1}^t (\rho_s^2 + \sigma_s^2) \cdot (\text{мера разности } \Pi_s \text{ и } \Pi^{(n_s)}) < \sum_{s=1}^t (\rho_s^2 + \sigma_s^2) \cdot \epsilon. \end{aligned}$$

Если задано некоторое $\delta > 0$, то уже

$$\epsilon = \frac{\delta^2}{\sum_{s=1}^t (\rho_s^2 + \sigma_s^2)}$$

дает нам

$$\left\| \sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi_s} - \sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n_s)}} \right\| < \delta.$$

Но элементы $\sum_{s=1}^t (\rho_s + i\sigma_s) f_{\Pi^{(n_s)}}$ образуют последовательность, если мы их соответствующим образом упорядочим. Это можно сделать

следующим образом. Обозначая общий знаменатель всех $p_1, \sigma_1, \dots, p_t, \sigma_t$ через τ , а новые числители через $p'_1, \sigma'_1, \dots, p'_t, \sigma'_t$, получим

$$\frac{1}{\tau} \sum_{s=1}^t (p'_s + i\sigma'_s) f_{\Pi}(n_s),$$

где $t, \tau = 1, 2, \dots; p'_s, \sigma'_s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, n_s = 1, 2, \dots$ для $s = 1, 2, \dots, t$. Задача упорядочения этих функций в последовательность сводится к упорядочению их целочисленных номеров $t, \tau, p'_1, \sigma'_1, \dots, p'_t, \sigma'_t, n_1, \dots, n_t$. Среди этих комплексов чисел сгруппируем вместе те, для которых положительное целое

$$I = t + \tau + |p'_1| + \dots + |p'_t| + |\sigma'_t| + n_1 + \dots + n_t$$

имеет одно значение. Затем расставим эти группы в порядке возрастания значения индекса группы I . Каждая из этих групп (с фиксированным I) состоит, очевидно, из конечного числа рассматриваемых комплексов. Если мы теперь расставим элементы в каждой из этих конечных совокупностей каким-либо образом, то мы в самом деле получим простую последовательность всех указанных комплексов.

Чтобы иметь возможность описать введенную последовательность множеств $\Pi^{(1)}, \Pi^{(2)}, \dots$, воспользуемся тем, что для каждого множества Π с конечной мерой Лебега M и для каждого $\delta > 0$ существует открытое точечное множество Π' , покрывающее Π , но мера которого превосходит M на величину $< \delta$ (см. литературу, указанную в прим. ⁵²⁾ на стр. 51, а также ⁴⁵⁾ на стр. 41, где определяется понятие «открытого точечного множества»). Но для каждого открытого Π' и $\delta > 0$, очевидно, существует множество Π'' , состоящее из конечного числа кубов, содержащихся в Π' , и мера которого отличается от меры Π' на величину $< \delta$. Ясно, что все длины ребер этих кубов и все координаты их центров могут быть выбраны рациональными. Теперь легко видеть, что разностное множество Π и Π'' , определенное выше, имеет меру $< \delta + \delta = 2\delta$ и, следовательно, для $\delta < \frac{\epsilon}{2}$ меру $< \epsilon$. Поэтому мы достигнем цели, если сумеем упорядочить в последовательность совокупности описанных выше кубов.

Эти совокупности кубов характеризуются числом кубов $n = 1, 2, \dots$, длиной ребер куба $x^{(v)}$ и координатами центральных точек $\xi_1^{(v)}, \dots, \xi_k^{(v)}$ ($v = 1, 2, \dots, n$). Числа $x^{(v)}, \xi_1^{(v)}, \dots, \xi_k^{(v)}$ рациональны. Пусть их общий знаменатель (для всех $v = 1, 2, \dots, n$) есть $\eta = 1, 2, \dots$, а их числители суть

$$x'^{(v)} = 1, 2, \dots; \xi_1'^{(v)}, \dots, \xi_k'^{(v)} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Следовательно, совокупности кубов характеризуются комплексами чисел

$$n, \eta, x^{(1)}, \xi_1^{(1)}, \dots, \xi_k^{(1)}, \dots, x_1^{(n)}, \xi_1^{(n)}, \dots, \xi_k^{(n)}.$$

Если мы расставим их в порядке возрастания сумм

$$n + \eta + x^{(1)} + |\xi_1^{(1)}| + \dots + |\xi_k^{(1)}| + \dots + x^{(n)} + \\ + |\xi_1^{(n)}| + \dots + |\xi_k^{(n)}|,$$

то мы получим простую последовательность, в точности так, как в предыдущем случае линейных комбинаций функций.

Прежде чем продолжать, ответим на следующий вопрос: Дано \mathfrak{M} , удовлетворяющее A .— E . (с $C^{(\infty)}$); в каких подмножествах \mathfrak{M} из \mathfrak{M} A .— E . снова удовлетворяются (с теми же определениями af , $f \pm g$ и (f, g))?

Чтобы выполнялось A ., \mathfrak{M} должно быть линейным многообразием. B . справедливо само по себе. Отложим на время C .: во всяком случае или $C^{(n)}$, или $C^{(\infty)}$. имеют место. D . означает: если последовательность в \mathfrak{M} удовлетворяет критерию сходимости Коши, то она имеет предел в \mathfrak{M} . Поскольку эта последовательность во всяком случае имеет свой предел в \mathfrak{M} , то D . означает просто, что этот предел должен принадлежать \mathfrak{M} . Это значит, что \mathfrak{M} должно быть замкнутым. Условие E ., как мы убедились при доказательстве *теоремы 9.*, выполняется всегда. Следовательно, мы можем суммировать результат: \mathfrak{M} должно быть замкнутым линейным многообразием. Обратимся к ортонормированной системе, растягивающей \mathfrak{M} (*теорема 9.*), $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Если она бесконечна, то, очевидно, имеет место $C^{(\infty)}$, и \mathfrak{M} изоморфно \mathfrak{M}_∞ , т. е. самому \mathfrak{M} ; если она заканчивается некоторым φ_n , то имеет место (например, как следствие *теоремы 3⁽ⁿ⁾*) $C^{(n)}$, т. е. \mathfrak{M} изоморфно \mathfrak{M}_n .

Но поскольку D . и E . имеют место в \mathfrak{M} во всяком случае, значит они справедливы в каждом \mathfrak{M}_n . Значит, они также следуют из A .— $C^{(n)}$.

Как видно, мы избежали прямой проверки выполнения свойств A .— E . (с $C^{(n)}$. или $C^{(\infty)}$) в \mathfrak{M}_n или \mathfrak{M}_∞ за счет искусственных логических доводов. Однако и непосредственное установление этих свойств не представляет существенных затруднений. Предоставим это доказательство читателю.

Остается еще показать, что D . и E . независимы от A .— $C^{(\infty)}$. Как мы только что видели, любое линейное многообразие в \mathfrak{M}_∞ удовлетворяет A ., B ., E . и $C^{(n)}$. или $C^{(\infty)}$; но если оно не замкнуто, то D . не выполняется. В этом случае в нем должно иметь место $C^{(\infty)}$, поскольку из $C^{(n)}$. прямо следует D .. Нетрудно теперь привести при-

мер такого незамкнутого линейного множества. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ есть ортонормированная система, тогда элементы $\sum_{v=1}^N x_v \varphi_v$ ($N = 1, 2, \dots$; x_1, \dots, x_N произвольны) образуют линейное многообразие, однако незамкнутое, потому что $\sum_{v=1}^{\infty} \frac{1}{v} \varphi_v \left(\sum_{v=1}^{\infty} \left(\frac{1}{v}\right)^2 \text{ конечна!} \right)$ является предельной точкой, но не элементом множества

$$\left(\sum_{v=1}^N \frac{1}{v} \varphi_v \rightarrow \sum_{v=1}^{\infty} \frac{1}{v} \varphi_v, \text{ при } N \rightarrow \infty \right).$$

Следовательно, **D**. не зависит от **A**. — **C**^(∞). и **E**.

Рассмотрим далее все комплексные функции $x(\alpha)$ с непрерывным параметром α : $-\infty < \alpha < +\infty$. Кроме того, предположим, что $x(\alpha) \neq 0$ возможно записать в виде последовательности такой, что сумма $\sum_{\alpha} |x(\alpha)|^2$, распространенная по членам этой последовательности, будет конечной⁵⁵⁾. Все функции $x(\alpha)$ образуют пространство $\mathfrak{X}_{\text{cont}}$. Поскольку для любых двух функций $x(\alpha), y(\alpha)$ этого пространства $x(\alpha)$ или $y(\alpha) \neq 0$ только для двух α -последовательностей и поскольку мы можем объединить эти две последовательности в одну, то $x(\alpha) = y(\alpha) = 0$ везде, кроме некоторой α -последовательности $\alpha_1, \alpha_2, \dots$. Следовательно, мы должны обсудить только значения $x_n = x(\alpha_n), y_n = y(\alpha_n)$ для всех $n = 1, 2, \dots$. Поэтому, пока мы рассматриваем только две точки $\mathfrak{X}_{\text{cont}}$, все будет происходить так же, как и в \mathfrak{X}_{∞} . Но значит **A**. и **B**., выполняются в $\mathfrak{X}_{\text{cont}}$ в точности так же, как и в \mathfrak{X}_{∞} ⁵⁶⁾. То же будет справедливо и для k ($k = 1, 2, \dots$) точек $\mathfrak{X}_{\text{cont}}$, поэтому **C**^(∞). также имеет место в $\mathfrak{X}_{\text{cont}}$. Более того, все остается верным даже для последовательности точек $\mathfrak{X}_{\text{cont}}$. Рассмотрим $x_1(\alpha), x_2(\alpha), \dots$, причем α , для которых $x_n(\alpha) \neq 0$, образуют последовательность для каждого $n = 1, 2, \dots$: $\alpha_1^{(n)}, \alpha_2^{(n)}, \dots$. Эти последовательности образуют все вместе двойную последовательность $\alpha_m^{(n)}$ ($n, m = 1, 2, \dots$), которая может быть записана как простая последовательность $\alpha_1^{(1)}, \alpha_2^{(1)}, \alpha_1^{(2)}, \alpha_3^{(1)}, \alpha_2^{(2)}, \alpha_1^{(3)}, \dots$. Следовательно, и **D**. выполняется в $\mathfrak{X}_{\text{cont}}$ так же, как и в \mathfrak{X}_{∞} . Иначе обстоит дело с **E**.. В этом случае играют роль все точки (ведь все они должны быть предельными точками соответствующих последовательностей), и поэтому мы не можем делать заключение о $\mathfrak{X}_{\text{cont}}$ на

⁵⁵⁾ Хотя α и меняется непрерывно, это будет сумма, а не интеграл, поскольку ведь в сумме фигурирует только некоторая последовательность этих α !

⁵⁶⁾ Естественным образом мы определяем $(x(\alpha), y(\alpha))$ как $\sum_a x(\alpha) \overline{y(\alpha)}$.

основании \mathfrak{N}_∞ . И это условие действительно не выполняется, потому что не будет справедливым одно из его следствий: существует ортонормальная система, которая не может быть записана как последовательность (вопреки *теореме З^(∞)*).⁵⁷⁾

Пусть

$$x_\beta(\alpha) = \begin{cases} 1 & \text{для } \alpha = \beta \\ 0 & \text{для } \alpha \neq \beta \end{cases};$$

для каждого β $x_\beta(\alpha)$ будет элементом $\mathfrak{N}_{\text{cont}}$, и $x_\beta(\alpha)$ образуют ортонормированную систему. Но в виде последовательности их можно было бы записать, только если бы это было возможно для всех $+\infty > \beta > -\infty$, между тем хорошо известно, что это невозможно⁵⁷⁾. Следовательно, **E.** также независимо от **A.** — **C.^(∞)**, **D.**.

(В заключение следует отметить фундаментальную разницу между пространством функций $f(x)$ с конечным интегралом $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$ и пространством функций $x(\alpha)$ с конечной суммой $\sum_{\alpha} |x(\alpha)|^2$. Мы могли бы, конечно, с равным правом называть первое пространством всех $x(\alpha)$ с конечным $\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha |x(\alpha)|^2$! Вся разница — это только замена

$\int \dots d\alpha$ на $\sum_{\alpha} \dots$, и, несмотря на это, первое пространство есть

F_2 , оно удовлетворяет, следовательно, условиям **A.** — **E.**, и изоморфно пространству \mathfrak{N}_∞ , в то время как второе — $\mathfrak{N}_{\text{cont}}$ нарушает условие **E.** и отличается от \mathfrak{N}_∞ существенным образом. И тем не менее оба пространства тождественны и отличаются только определением длины!)

4. Замкнутые линейные многообразия

Важность § II. 2 для нас определяется не только доказательством изоморфизма, но также и тем, что там были доказаны теоремы об ортонормированных системах. Мы хотим теперь продвинуться дальше в рассмотрении геометрических свойств пространства Гильберта и детально изучить замкнутые линейные многообразия, которые играют в \mathfrak{N}_∞ роль, аналогичную роли прямых линий, плоскостей и т. д. (иными словами, \mathfrak{N}_m , $m \leqq n$) в \mathfrak{N}_n .

Напомним прежде обозначения, введенные в *определениях 2.* и *5.*: если \mathfrak{A} есть какое-либо множество в \mathfrak{N} , то $\{\mathfrak{A}\}$ или $[\mathfrak{A}]$ суть

⁵⁷⁾ Эта теорема теории множеств о «неперечислимости континуума». Смотри, например, книгу Хаусдорфа, указанную в прим. ⁴⁶⁾, стр. 41).

линейное многообразие или замкнутое линейное многообразие соответственно растягиваемое \mathcal{A} , иными словами, наименьший представитель каждого из двух типов многообразий, содержащий \mathcal{A} . Расширим теперь эти обозначения в том смысле, что если $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \dots$ — какие-либо подмножества \mathfrak{M} , а f, g, \dots — элементы из \mathfrak{M} , то мы будем понимать под $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}, \dots, f, g, \dots\}$ или $[\mathcal{A}, \mathcal{B}, \dots, f, g, \dots]$ линейное многообразие или замкнутое линейное многообразие соответственно, натянутое на множество, получающееся соединением $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \dots$ и f, g, \dots

Если, в частности, $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots$ суть замкнутые линейные многообразия (в конечном или бесконечном числе), то мы будем обозначать замкнутое линейное многообразие $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots]$ символом $\mathfrak{M} + \mathfrak{N} + \dots$ Линейное многообразие $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots\}$ состоит, очевидно, из всех сумм $f + g + \dots$ (f — пробегает \mathfrak{M} , g пробегает \mathfrak{N}, \dots), в то время как замкнутое многообразие $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots] = \mathfrak{M} + \mathfrak{N} + \dots$ получается из незамкнутого присоединением всех его предельных точек. Если мы имеем лишь конечное число множеств $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}, \dots$ и каждый элемент одного из них ортогонален всем элементам других, то, как мы увидим, эти два образования равны одно другому. В общем случае они совпадают не обязательно.

Если \mathfrak{M} есть подмножество \mathfrak{N} , то рассмотрим еще совокупность всех элементов \mathfrak{N} , ортогональных ко всем элементам \mathfrak{M} . Они тоже составляют замкнутое линейное многообразие, которое может быть названо $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$. *Теорема 14.* объясняет причину такого обозначения в виде вычитания. Особый интерес представляет собою множество $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$ всех f , ортогональных ко всему \mathfrak{M} . Оно называется замкнутым линейным многообразием, дополнительным к \mathfrak{M} .

Наконец, упомянем три особенно простых замкнутых линейных многообразия: во-первых, само \mathfrak{N} ; во-вторых, множество $\{0\} = [0]$, состоящее лишь из нулевого элемента, и, наконец, множество всех af (f — заданный элемент из \mathfrak{M} , а a — переменная), которое, очевидно, представляет собой замкнутое линейное многообразие и, следовательно, одновременно равно $\{f\} = [f]$.

Введем теперь понятие «проектирования», совершенно аналогичное этому понятию в евклидовой геометрии.

Теорема 10. Пусть \mathfrak{M} есть замкнутое линейное многообразие. Тогда каждый f может быть разделен одним и только одним способом на две компоненты $f = g + h$, g из \mathfrak{M} и h из $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$.

Замечание. Назовем g проекцией f на \mathfrak{M} , h (которое ортогонально ко всему \mathfrak{M}) нормальной к \mathfrak{M} составляющей f .

Для g введем обозначение $g = P_{\mathfrak{M}}f$.

Доказательство. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — ортонормированная система, существующая в силу *теоремы 9.*, растягивающая замкнутое линейное

многообразие \mathfrak{M} . Запишем g в виде ряда $g = \sum_n (f, \varphi_n) \varphi_n$, который, по *теореме 6.*, сходится (если он вообще бесконечен); его сумма g очевидно принадлежит к \mathfrak{M} . Далее, по *теореме 6.*, $h = f - g$ ортогональна ко всем $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, но поскольку векторы, ортогональные к h , образуют замкнутое линейное многообразие, то вместе с $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ все \mathfrak{M} тоже ортогонально h , т. е. h принадлежит к $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$.

Если бы существовало еще одно такое разложение $f = g' + h'$, g' из \mathfrak{M} , h' из $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$, то было бы $g + h = g' + h'$, $g - g' = h - h' = j$. Вектор j должен был бы одновременно принадлежать к \mathfrak{M} и к $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$ и был бы, следовательно, ортогонален сам себе. Следовательно, $(j, j) = 0$, $j = 0$ и, значит, $g = g'$, $h = h'$.

Операция $P_{\mathfrak{M}} f$ есть, следовательно, такая, которая сопоставляет каждому f из \mathfrak{N} его проекцию в \mathfrak{M} , $P_{\mathfrak{M}} f$. В следующем разделе мы определим понятия оператора. Оператор R есть функция, определенная на подмножестве из \mathfrak{N} со значениями из \mathfrak{M} , т. е. соответствие, которое сопоставляет определенному f из \mathfrak{N} определенный Rf из \mathfrak{M} (Не обязательно каждому f . Для некоторых f из \mathfrak{N} операция может быть не определена, т. е. «бессмысленна»!). $P_{\mathfrak{M}}$ есть, таким образом, оператор, определенный повсюду в \mathfrak{N} и называемый оператором проектирования в \mathfrak{M} .

Теорема 11. Оператор $P_{\mathfrak{M}}$ обладает следующими свойствами:

$$P_{\mathfrak{M}}(a_1 f_1 + \dots + a_n f_n) = a_1 P_{\mathfrak{M}} f_1 + \dots + a_n P_{\mathfrak{M}} f_n,$$

$$(P_{\mathfrak{M}} f, g) = (f, P_{\mathfrak{M}} g),$$

$$P_{\mathfrak{M}}(P_{\mathfrak{M}} f) = P_{\mathfrak{M}} f.$$

\mathfrak{M} — это множество всех значений $P_{\mathfrak{M}}$, т. е. множество всех $P_{\mathfrak{M}} f$; но оно может быть так же охарактеризовано, как множество всех решений уравнения $P_{\mathfrak{M}} f = f$, в то время как $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$ — это множество всех решений уравнения $P_{\mathfrak{M}} f = 0$.

Замечание. В следующих разделах мы увидим, что первое свойство определяет так называемые линейные операторы, а второе — так называемые эрмитовы операторы. Третье выражает то, что двукратное применение оператора $P_{\mathfrak{M}}$ приводит к тому же, что и однократное. Обычная символическая запись этого есть $P_{\mathfrak{M}} P_{\mathfrak{M}} = P_{\mathfrak{M}}$ или $P_{\mathfrak{M}}^2 = P_{\mathfrak{M}}$.

Доказательство. Из того, что

$$f_1 = g_1 + h_1, \dots, f_n = g_n + h_n$$

$(g_1, \dots, g_n$ из \mathfrak{M} , h_1, \dots, h_n из $\mathfrak{N} - \mathfrak{M})$

следует, что

$$a_1 f_1 + \dots + a_n f_n = (a_1 g_1 + \dots + a_n g_n) + (a_1 h_1 + \dots + a_n h_n)$$

$(a_1 g_1 + \dots + a_n g_n$ из \mathfrak{M} , $a_1 h_1 + \dots + a_n h_n$ из $\mathfrak{N} - \mathfrak{M})$,

Таким образом,

$$\begin{aligned} P_{\mathfrak{M}}(a_1f_1 + \dots + a_nf_n) &= a_1g_1 + \dots + a_ng_n = \\ &= a_1P_{\mathfrak{M}}f_1 + \dots + a_nP_{\mathfrak{M}}f_n, \end{aligned}$$

и первое утверждение доказано.

Для доказательства второго утверждения положим

$$f = g' + h', \quad g = g'' + h'' \quad (g', g'' \text{ из } \mathfrak{M}, \quad h', h'' \text{ из } \mathfrak{N} - \mathfrak{M}).$$

Поскольку тогда g', g'' ортогональны к h', h'' , то, следовательно,

$$(g', g) = (g', g'' + h'') = (g', g'') = (g' + h', g'') = (f, g''),$$

т. е. $(P_{\mathfrak{M}}f, g) = (f, P_{\mathfrak{M}}g)$ и второе утверждение доказано.

Наконец, $P_{\mathfrak{M}}f$ принадлежит к \mathfrak{M} , и, следовательно, $P_{\mathfrak{M}}f = P_{\mathfrak{M}}f + 0$ есть разложение $P_{\mathfrak{M}}f$ на компоненты, существующее в силу *теоремы 10.*, т. е. $P_{\mathfrak{M}}(P_{\mathfrak{M}}f) = P_{\mathfrak{M}}f$. Это третье утверждение теоремы.

Формула $P_{\mathfrak{M}}f = f$ или 0 означает, что в разложении $f = g + h$, g — из \mathfrak{M} , h — из $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$ (*теорема 10.*) или $f = g$, $h = 0$, или $g = 0$, $f = h$; т. е. что f принадлежит \mathfrak{M} или $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$. Это пятое и шестое утверждения теоремы. Все $P_{\mathfrak{M}}f$ принадлежат к \mathfrak{M} по определению, и каждое f' из \mathfrak{M} равно какому-либо $P_{\mathfrak{M}}f$: например, по только что сказанному, оно равно $P_{\mathfrak{M}}f'$. Это четвертое утверждение теоремы.

Заметим еще, что из второго и третьего утверждений следует, что

$$(P_{\mathfrak{M}}f, P_{\mathfrak{M}}g) = (f, P_{\mathfrak{M}}P_{\mathfrak{M}}g) = (f, P_{\mathfrak{M}}g) = (P_{\mathfrak{M}}f, g).$$

Мы хотим определить теперь проекционные операторы независимо от \mathfrak{M} .

Теорема 12. Оператор E , определенный повсюду (ср. обсуждение, предшествующее *теореме 11.*), есть проекционный оператор, т. е. $E = P_{\mathfrak{M}}$ для некоторого замкнутого линейного многообразия \mathfrak{M} , если и только если он обладает следующими свойствами:

$$(Ef, g) = (f, Eg), \quad E^2 = E.$$

(См. замечание к *теореме 11.*) В этом случае \mathfrak{M} однозначно определяется по E (согласно *теореме 11.*).

Доказательство. Необходимость указанных условий, так же как и то, что \mathfrak{M} определяется оператором E , следует из *теоремы 11..* Мы должны, следовательно, лишь показать, что, если E обладает такими свойствами, то существует замкнутое линейное многообразие \mathfrak{M} с $E = P_{\mathfrak{M}}$.

Пусть \mathfrak{M} есть замкнутое линейное многообразие, натянутое на все Ef . Тогда $g - Eg$ ортогонален ко всем Ef :

$$(Ef, g - Eg) = (Ef, g) - (Ef, Eg) = (Ef, g) - (E^2f, g) = 0.$$

Множество элементов из \mathfrak{N} , ортогональных к $g - Eg$, образует замкнутое линейное многообразие; следовательно, вместе с Ef оно включает в себя \mathfrak{M} , и, значит, $g - Eg$ принадлежит к $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$. Разложение g по отношению к \mathfrak{M} в смысле *теоремы 10*, есть, следовательно, $g = Eg + (g - Eg)$, и, значит, $P_{\mathfrak{M}}g = Eg$ для произвольного g . Таким образом, вся теорема доказана.

Если $\mathfrak{M} = \mathfrak{N}$ или $= \{0\}$, то $\mathfrak{N} - \mathfrak{M} = \{0\}$ или \mathfrak{N} соответственно, значит, разложение по *теореме 11*, есть $f = f + 0$ или $= 0 + f$, отсюда $P_{\mathfrak{M}}f = f$ или равно 0 соответственно. Мы назовем единичным, 1, оператор, определенный (повсюду!) как $Rf = f$, и нулевым, 0, оператор, определенный как $Rf = 0$, т. е. $P_{\mathfrak{N}} = 1$, $P_{\{0\}} = 0$. Далее очевидно, что разложение $f = g + h$ (g из \mathfrak{M} , h из $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$) по отношению к \mathfrak{M} может также употребляться по отношению к $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$ в форме $f = h + g$ (h из $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$, g из \mathfrak{M}). (Ибо, если g принадлежит \mathfrak{M} , то он ортогонален каждому элементу $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$ и, следовательно, принадлежит к $\mathfrak{N} - (\mathfrak{N} - \mathfrak{M})$.) Итак, $P_{\mathfrak{M}}f = g$, $P_{\mathfrak{N}-\mathfrak{M}}f = h = f - g$, т. е. $P_{\mathfrak{N}-\mathfrak{M}}f = f - P_{\mathfrak{M}}f$. Это обстоятельство $P_{\mathfrak{N}-\mathfrak{M}}f = 1f - P_{\mathfrak{M}}f$ мы выразим символически в виде $P_{\mathfrak{N}-\mathfrak{M}} = 1 - P_{\mathfrak{M}}$. (О сложении, вычитании и умножении операторов см. *теорему 14*.) Нужно заметить еще следующее: Мы уже обнаружили без труда, что \mathfrak{M} есть подмножество от $\mathfrak{N} - (\mathfrak{N} - \mathfrak{M})$. Непосредственно показывать, что оба множества совпадают, было бы кропотливо. Однако это немедленно следует из того, что

$$P_{\mathfrak{N} - (\mathfrak{N} - \mathfrak{M})} = 1 - P_{\mathfrak{N} - \mathfrak{M}} = 1 - (1 - P_{\mathfrak{M}}) = P_{\mathfrak{M}}.$$

Более того, из предыдущего замечания следует, что если E — проекционный оператор, то и $1 - E$ тоже, и, поскольку $1 - (1 - E) = E$, то и обратное заключение верно.

Теорема 13. Всегда $\|Ef\|^2 = (Ef, f)$, $\|Ef\| \leq \|f\|$, $\|Ef\| = 0$ или $= \|f\|$ характеризует f из $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$ и из \mathfrak{M} соответственно.

Замечание. В частности, отсюда следует, что

$$\|Ef - Eg\| = \|E(f - g)\| \leq \|f - g\|,$$

т. е., что оператор E непрерывен (ср. дискуссию после *теоремы 2*, в II. 1).

Доказательство. Мы имеем (ср. дискуссию после *теоремы 11*)

$$\|Ef\|^2 = (Ef, Ef) = (Ef, f).$$

Поскольку $1 - E$ также проекционный оператор, то

$$\begin{aligned} \|Ef\|^2 + \|f - Ef\|^2 &= \|Ef\|^2 + \|(1 - E)f\|^2 = \\ &= (Ef, f) + ((1 - E)f, f) = (f, f) = \|f\|^2. \end{aligned}$$

Поскольку оба слагаемых (слева) ≥ 0 , они также оба $\leq \|f\|^2$ и,

в частности, $\|Ef\|^2 \leq \|f\|^2$, $\|Ef\| \leq \|f\|$. То, что $\|Ef\| = 0$, $Ef = 0$, выражает тот факт, что f принадлежит к $\mathfrak{M} - \mathfrak{M}$, нам известно из *теоремы 11*. Вследствие вышеприведенного $\|Ef\| = \|f\|$ означает, что $\|f - Ef\| = 0$, $Ef = f$; итак, по *теореме 11*, f принадлежит к \mathfrak{M} .

Если R и S — два оператора, то мы понимаем под $R \pm S$, aR (a — комплексное число), RS операторы, определяемые соотношениями $(R \pm S)f = Rf \pm Sf$, $(aR)f = a \cdot Rf$, $(RS)f = R(Sf)$, и пользуемся также следующим естественным обозначением:

$$R^0 = 1, \quad R^1 = R, \quad R^2 = RR, \quad R^3 = RRR, \dots$$

Правила исчисления, справедливые в этом случае, довольно просты и естественны. Для $R \pm S$, aR легко показать справедливость всех элементарных законов счета, справедливых для чисел, но это не так для RS . Легко показать, что выполняется дистрибутивный закон $(R \pm S)T = RT \pm ST$ и $R(S \pm T) = RS \pm RT$ (для последнего необходима, конечно, линейность R ; см. *замечание к теореме 11*. и обсуждение в следующем параграфе). Ассоциативный закон также имеет место: $(RS)T = R(ST) = RST$, но коммутативный закон $RS = SR$, вообще говоря, не справедлив ($((RS)f = R(Sf))$ и $(SR)f = S(Rf)$ не обязаны быть равными друг другу!). Если этот закон выполняется для двух частных R и S , говорят, что они коммутируют. Так, например, 0 и 1 коммутируют со всеми R , определенными повсюду:

$$R0 = 0R = 0; \quad R1 = 1R = R.$$

Также коммутируют R^m и R^n , поскольку $R^mR^n = R^{m+n}$ и, следовательно, не зависит от порядка m , n .

Теорема 14. Пусть E и F — проекционные операторы замкнутых линейных многообразий \mathfrak{M} и \mathfrak{N} . Тогда EF будет также проекционным оператором тогда и только тогда, когда E и F коммутируют, т. е. если $EF = FE$. Притом EF относится к замкнутому линейному множеству \mathfrak{P} , которое состоит из элементов, общих множествам \mathfrak{M} и \mathfrak{N} . Оператор $E + F$ будет проекционным тогда и только тогда, когда $EF = 0$ (или, что то же, $FE = 0$). Это означает, что все \mathfrak{M} ортогонально ко всему \mathfrak{N} , $E + F$ тогда относится к $\mathfrak{M} + \mathfrak{N} = [\mathfrak{M}, \mathfrak{N}]$, которое в данном случае $= \{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$. Оператор $E - F$ является проекционным тогда и только тогда, когда $EF = F$ (или, что то же, $FE = F$). Это означает, что \mathfrak{N} есть подмножество \mathfrak{M} , и $E - F$ относится к $\mathfrak{M} - \mathfrak{N}$.

Доказательство. Надо проверить, выполняются ли для EF два условия *теоремы 12*:

$$(EFf, g) = (f, EFg) \quad \text{и} \quad (EF)^2 = EF.$$

Поскольку $(EFf, g) = (Ff, Eg) = (f, FEg)$, то первое условие означает, что

$$(f, EFg) = (f, FEg), \quad (f, (FE - EF)g) = 0.$$

Поскольку это выполнено для любых f , то $(EF - FE)g = 0$, и поскольку последнее выполняется для любых g , то $EF - FE = 0$; $EF = FE$. Итак, коммутативность необходима и достаточна уже для выполнения первого условия, однако и выполнение второго следует из нее:

$$(EF)^2 = EFEF = EEFF = E^2F^2 = EF.$$

Так как $E + F$ удовлетворяет первому условию $((E + F)f, g) = (f, (E + F)g)$ всегда (поскольку ему удовлетворяют E, F), нам остается доказать только второе. Так как

$$(E + F)^2 = E^2 + F^2 + EF + FE = (E + F) + (EF + FE),$$

то остается показать, что $EF + FE = 0$. Далее при $EF = 0$, EF есть проекционный оператор и, так как по доказанному тогда $EF = FE$, то $EF + FE = 0$. Обратно, из $EF + FE = 0$ следует, что

$$E(EF + FE) = E^2F + EFE = EF + EFE = 0,$$

$$E(EF + FE)E = E^2FE + EFE^2 = EFE + EFE = 2 \cdot EFE = 0,$$

следовательно, $EFE = 0$, и, следовательно, $FE = 0$. Таким образом, условие $EF = 0$ необходимо и достаточно или, так как E и F играют одну и ту же роль, $FE = 0$ — также необходимое и достаточное условие. $E - F$ есть проекционный оператор тогда и только тогда, когда $1 - (E - F) = (1 - E) + F$ является тоже проекционным оператором, и поскольку $1 - E$ и F являются таковыми, то в силу доказанного $(1 - E)F = 0$, или $F - EF = 0$, $EF = F$ есть условие того, что $1 - (E - F)$, а значит $E - F$ есть проекционный оператор (равным образом $F(1 - E) = 0$, $F - FE = 0$, $FE = F$).

Нам еще осталось доказать утверждения относительно \mathfrak{M} , \mathfrak{N} ($E = P_{\mathfrak{M}}$, $F = P_{\mathfrak{N}}$). Положим сперва $EF = FE$. Тогда каждый $EFf = FEf$ принадлежит и к \mathfrak{M} и к \mathfrak{N} , а следовательно к \mathfrak{P} , и для каждого g из \mathfrak{P} $Eg = Fg = g$, следовательно $EFg = Eg = g$, т. е. каждый элемент \mathfrak{P} представим в виде EFf . Соответственно \mathfrak{P} есть множество значений EF и, значит, по *теореме 11*, $EF = P_{\mathfrak{P}}$. Затем положим $EF = 0$ (значит, $FE = 0$ также). Каждый $(E + F)f = Ef + Ff$ принадлежит к $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ и каждый g из $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ равен $h + j$, с h из \mathfrak{M} и j из \mathfrak{N} , следовательно, $Eh = h$, $Fh = FEh = 0$, $Fj = j$, $Ej = EFj = 0$. Но, значит,

$$(E + F)(h + j) = Eh + Fh + Ej + Fj = h + j, \quad (E + F)g = g.$$

Следовательно, g представим в виде $(E + F)g$. Тем самым $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ есть множество значений $E + F$, но поскольку $E + F$ есть проек-

ционный оператор, то $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ есть соответствующее замкнутое линейное многообразие (*теорема 11.*). Поскольку $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ замкнуто, то $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\} = [\mathfrak{M}, \mathfrak{N}] = \mathfrak{M} + \mathfrak{N}$. Теперь положим $EF = F$ (значит, и $FE = F$ тоже). Тогда $E = P_{\mathfrak{M}}$, $1 - F = P_{\mathfrak{N} - \mathfrak{M}}$, следовательно, $E - F = E - EF = E(1 - F)$ равно $P_{\mathfrak{N}}$, где \mathfrak{N} — общая часть \mathfrak{M} и $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$, т. е. $\mathfrak{M} - \mathfrak{N}$.

Наконец, $EF = 0$ означает, что всегда $(EFFf, g) = 0$, т. е. что $(Ef, Fg) = 0$, иными словами, это значит, что все \mathfrak{M} ортогонально ко всему \mathfrak{N} . А $EF = F$ означает, что $F(1 - E) = 0$, т. е., что все \mathfrak{N} ортогонально ко всему $\mathfrak{N} - \mathfrak{M}$ или это значит, что \mathfrak{N} есть подмножество $\mathfrak{N} - (\mathfrak{N} - \mathfrak{M}) = \mathfrak{M}$.

Если \mathfrak{N} есть подмножество \mathfrak{M} , то мы будем для $F = P_{\mathfrak{N}}$ и $E = P_{\mathfrak{M}}$ говорить, что F есть часть от E и символически записывать это в виде $E \geqq F$ или $F \leqq E$. (Такая запись, следовательно, означает, что $EF = F$, или, что то же, $FE = F$, и как следствие, что E, F коммутируют. Рассмотрением $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}$ или же прямой выкладкой можно убедиться, что всегда справедливо: $0 \leqq E \leqq 1$; из $E \leqq F$ и $F \leqq E$ следует $E = F$; из $E \leqq F, F \leqq G$ следует $E \leqq G$. Наш знак \leqq обладает, таким образом, свойствами «упорядочения по величине». Следует заметить дальше, что три утверждения: $E \leqq F, 1 - E \geqq 1 - F$ или E ортогонален к $1 - F$, эквивалентны друг другу. Кроме того, ортогональность E', F' следует из ортогональности E, F , если $E' \leqq E$ и $F' \leqq F$.) Если \mathfrak{M} и \mathfrak{N} ортогональны, мы говорим, что E и F также ортогональны. (То есть это значит, что $EF = 0$ или также $FE = 0$.) Напротив, если E, F коммутируют, мы будем говорить, что соответственные $\mathfrak{M}, \mathfrak{N}$ также коммутируют.

Теорема 15. Утверждение $E \leqq F$ эквивалентно тому, что всегда справедливо $\|Ef\| \leqq \|Ff\|$.

Доказательство. Из $E \leqq F$ следует, что $F = EF$, следовательно, $\|Ef\| = \|EFf\| \leqq \|Ff\|$ (ср. *теорему 13.*) . Обратно, это соотношение имеет следующее следствие: если $Ff = 0$, то $\|Ef\| \leqq \|Ff\| = 0$, $Ef = 0$ и из-за $F(1 - F)f = (F - F^2)f = 0$ получаем тождественно $E(1 - F)f = 0$, т. е. $E(1 - F) = E - EF = 0$, $E = EF$, следовательно $E \leqq F$.

Теорема 16. Пусть E_1, \dots, E_k суть проекционные операторы. Тогда $E_1 + \dots + E_k$ будет проекционным оператором тогда и только тогда, когда все E_m, E_l ($m, l = 1, \dots, k$, $m \neq l$) взаимно ортогональны. Другое необходимое и достаточное условие — это

$$\|E_1f\|^2 + \dots + \|E_kf\|^2 \leqq \|f\|^2$$

(для всех f). Более того, $E_1 + \dots + E_k$ ($E_1 = P_{\mathfrak{M}_1}, \dots, E_k = P_{\mathfrak{M}_k}$) есть в этом случае оператор проектирования

в $\mathfrak{M}_1 + \dots + \mathfrak{M}_k = [\mathfrak{M}_1, \dots, \mathfrak{M}_k]$, которое в данном случае равно $\{\mathfrak{M}_1, \dots, \mathfrak{M}_k\}$.

Доказательство. Последнее утверждение доказывается повторным применением теоремы 14.. Отсюда же следует достаточность первого критерия. Если выполнен второй критерий, то то же справедливо относительно первого: Для $m \neq l$, $E_m f = f$ будет

$$\begin{aligned} \|f\|^2 + \|E_l f\|^2 &= \|E_m f\|^2 + \|E_l f\|^2 \leq \|E_1 f\|^2 + \dots \\ &\quad \dots + \|E_k f\|^2 \leq \|f\|^2, \\ \|E_l f\|^2 &= 0, \quad E_l f = 0. \end{aligned}$$

Поскольку, однако, $E_m(E_m f) = E_m f$ выполняется тождественно, то $E_l(E_m f) = 0$, т. е. $E_l E_m = 0$. Наконец, второе условие необходимо: Если $E_1 + \dots + E_k$ — проекционный оператор, то (теорема 13.):

$$\begin{aligned} \|E_1 f\|^2 + \dots + \|E_k f\|^2 &= (E_1 f, f) + \dots + (E_k f, f) = \\ &= ((E_1 + \dots + E_k) f, f) = \|(E_1 + \dots + E_k) f\|^2 \leq \|f\|^2. \end{aligned}$$

Имеем таким образом следующую логическую схему:

$E_1 + \dots + E_k$ есть проекционный оператор \rightarrow второй критерий \rightarrow первый критерий $\rightarrow E_1 + \dots + E_k$ есть проекционный оператор

т. е. все три утверждения эквивалентны.

В заключение мы докажем еще теорему о сходимости проекционных операторов:

Теорема 17. Пусть E_1, E_2, \dots есть возрастающая или убывающая последовательность проекционных операторов: $E_1 \leq \leq E_2 \leq \dots$ или $E_1 \geq E_2 \geq \dots$ Такая последовательность сходится к проекционному оператору E в том смысле, что для всех f $E_n f \rightarrow Ef$; и при этом все $E_n \leq E$, или $E_n \geq E$ соответственно.

Доказательство. Достаточно исследовать второй случай, поскольку первый может быть сведен к нему заменой E_1, E_2, \dots, E на $1 - E_1, 1 - E_2, \dots, 1 - E$. Пусть поэтому $E_1 \leq E_2 \leq \dots$

В силу теоремы 15. $\|E_1 f\|^2 \leq \|E_2 f\|^2 \leq \dots \leq 0$. Следовательно, существует $\lim_{n \rightarrow \infty} \|E_n f\|^2$. Это значит, что для каждого $\epsilon > 0$

существует $N = N(\epsilon)$ такое, что для $m, l \geq N$ будет $\|E_m f\|^2 - \|E_l f\|^2 < \epsilon$. Далее, для $m \geq l$, $E_m \geq E_l$, $E_m - E_l$ есть проекционный оператор, и, значит,

$$\begin{aligned} \|E_m f\|^2 - \|E_l f\|^2 &= (E_m f, f) - (E_l f, f) = ((E_m - E_l) f, f) = \\ &= \|(E_m - E_l) f\|^2 = \|E_m f - E_l f\|^2. \end{aligned}$$

откуда следует, что $\|E_m f - E_l f\| < \sqrt{\epsilon}$. Последовательность $E_1 f, E_2 f, \dots$ удовлетворяет, таким образом, критерию сходимости Коши и имеет поэтому предел f^* (*D.* из II. 1!). Следовательно, $Ef = f^*$ определяет оператор, всюду имеющий смысл.

Из $(E_n f, g) = (f, E_n g)$ получается после перехода к пределу, что $(Ef, g) = (f, Eg)$, из $(E_n f, E_n g) = (E_n f, g)$ следует, что $(Ef, Eg) = (Ef, g)$, значит, $(E^2 f, g) = (Ef, g)$ и $E^2 = E$. Таким образом, E есть проекционный оператор. Для $l \geq m$, $\|E_m f\| \leq \|E_l f\|$, и при $l \rightarrow \infty$ мы получим $\|E_m f\| \leq \|Ef\|$, следовательно, $E_m \leq E$ (*теорема 15.*).

Если E_1, E_2, \dots суть попарно взаимно ортогональные проекционные операторы, то $E_1, E_1 + E_2, E_1 + E_2 + E_3, \dots$ суть также проекционные операторы, и они образуют возрастающую последовательность. Поэтому они должны сходиться по *теореме 17.* к проекционному оператору, который больше каждого из них и который мы можем обозначить через $E_1 + E_2 + \dots$. Пусть $E_1 = P_{\mathfrak{M}_1}, E_2 = P_{\mathfrak{M}_2}, \dots, E_1 + E_2 + \dots = P_{\mathfrak{M}}$. Поскольку все $E_m \leq E$, то \mathfrak{M}_m есть подмножество \mathfrak{M} и, следовательно, \mathfrak{M} включает также $[\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \dots] = \mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2 + \dots = \mathfrak{M}$. С другой стороны, все \mathfrak{M}_n суть подмножества \mathfrak{M}' , значит, $E_m \leq P_{\mathfrak{M}'} = E'$. Поэтому по непрерывности (ср. аргументацию в приведенном выше доказательстве) $E \leq E'$, т. е. \mathfrak{M} есть подмножество \mathfrak{M}' . Таким образом, $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}'$, $E = E'$, т. е. $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2 + \dots$ или, переписанное другим способом,

$$P_{\mathfrak{M}_1 + \mathfrak{M}_2 + \dots} = P_{\mathfrak{M}_1} + P_{\mathfrak{M}_2} + \dots$$

На этом мы закончим изучение проекционных операторов.

5. Операторы в гильбертовом пространстве

Теперь мы в достаточной мере познакомились с геометрическими отношениями в бесконечномерном (гильбертовом) пространстве \mathfrak{H}_{∞} , чтобы можно было обратиться к линейным операторам в нем, т. е. к линейным отображениям \mathfrak{H}_{∞} на самого себя. С этой целью придется ввести некоторые понятия, которые по существу уже были предвосхищены в некоторой мере в последних разделах.

В предыдущих разделах мы уже имели дело с операторами; мы определим их (в соответствии со сказанным там перед *теоремой 11.*) следующим образом:

Определение 6. Оператор R есть функция, определенная на подмножестве \mathfrak{N} , со значениями из \mathfrak{N} , т. е. соответствие, которое сопоставляет некоторым элементам f из \mathfrak{N} элементы Rf из \mathfrak{N} .

(Мы допустили здесь и \mathfrak{N}_n в дополнение к \mathfrak{N}_{∞} . Следует обратить внимание на то, что если \mathfrak{N}_{∞} есть $F_{\mathfrak{B}}$, то оператор R определен

для элементов F_{Ω} , т. е. обычных функций в конфигурационном пространстве, причем его значениями будут такие же функции. Итак, операторы оказываются так называемыми «функциями от функций» или «функционалами». Сравни примеры в I. 2, 4). Класс f , для которых определено Rf — область определения R — не обязан включать в себя все \mathfrak{M} , если же он включает все \mathfrak{M} , то R называется определенным повсюду. Кроме того, нет никакой необходимости, чтобы множество всех Rf — область изменения R (отображение области определения, осуществляющее R) — содержалась в области определения R , т. е. если Rf определена, то из этого еще не следует с необходимостью, что $R(Rf) = R^2f$ имеет смысл⁵⁸⁾.

В предыдущем разделе мы уже установили, что надо понимать под $R \pm S$, aR , RS или R^m (R , S — операторы, a — комплексное число, $m = 0, 1, 2, \dots$):

$$(R \pm S)f = Rf \pm Sf, \quad (aR)f = a \cdot Rf, \quad (RS)f = R(Sf),$$

$$R^0 = 1, \quad R^1 = R, \quad R^2 = RR, \quad R^3 = RRR, \dots$$

Для установления областей определения этих операторов следует заметить, что левые стороны (т. е. операторы $R \pm S$, aR , RS) определены только, если определены также и правые части. Таким образом, например, $R \pm S$ определено лишь в общей части областей определения R и S , и т. д. Если Rf принимает каждое из своих значений лишь однажды, то R обладает обратным оператором R^{-1} : $R^{-1}f$ имеет смысл, если $Rg = f$ имеет решение g , и g есть его значение ($R^{-1}f = R^{-1}Rg = g$). В предыдущем разделе уже шла речь о законах счета для операторов $R \pm S$, aR , RS , здесь мы добавим еще несколько слов относительно соответствующих областей. Операторы, определенные там в качестве равных, имеют также совпадающие области определения, однако такие операторные уравнения, как $0 \cdot R = 0$, несправедливы для областей определения. Выраже-

⁵⁸⁾ Так, например, если \mathfrak{M}_{∞} есть F_{Ω} , где Ω — пространство всех вещественных x , $-\infty < x < \infty$, то d/dx есть функция от функции, т. е. оператор, определенный, однако, в нашем смысле только для тех $f(x)$, которые, во-первых, дифференцируемы и, во-вторых, обладают конечным

$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d}{dx} f(x) \right|^2 dx$ (ср. II. 8, где этот вопрос обсуждается подробнее). Естественно, что тогда в общем случае $\frac{d^2}{dx^2} f(x)$ не обязана существовать и

$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d^2}{dx^2} f(x) \right|^2 dx$ не обязан быть конечным. Например, такого рода поведение будет у функции $f(x) = |x|^{\frac{3}{2}} e^{-x^2}$.

ние $0 \cdot f$ имеет смысл всегда, а $(0 \cdot R)f$, по определению, имеет смысл только когда определено Rf (если, однако, оба они определены, то оба $= 0$). С другой стороны, когда выполнено $1 \cdot R = R \cdot 1 = R$ и $R^m \cdot R^l = R^{m+l}$, то это же верно для соответствующих областей определения.

Если R, S имеют обратные операторы, то RS также обладает обратным оператором, который, как легко видеть, имеет вид $(RS)^{-1} = S^{-1}R^{-1}$. Далее, для $a \neq 0$, $(aR)^{-1} = \frac{1}{a}R^{-1}$. Если существует R^{-1} , то мы можем образовать и другие отрицательные степени R :

$$R^{-2} = R^{-1}R^{-1}; \quad R^{-3} = R^{-1}R^{-1}R^{-1}, \dots$$

После этих общих замечаний мы перейдем к более детальному исследованию тех специальных классов операторов, которые представляют для нас особый интерес.

Определение 7. Оператор A называется линейным, если область его определения есть линейное многообразие, т. е. если она содержит все $a_1f_1 + \dots + a_kf_k$ вместе с f_1, \dots, f_k , и если

$$A(a_1f_1 + \dots + a_kf_k) = a_1Af_1 + \dots + a_kAf_k.$$

В дальнейшем мы будем рассматривать только линейные операторы и именно лишь такие, область определения которых всюду плотна.

Последнее замечание позволяет найти — во многих случаях эффективную — замену требования об определенности оператора повсюду, от которого в квантовой механике нам приходится отказаться. Это обстоятельство достаточно важно для нас, чтобы рассмотреть его более подробно. Для примера рассмотрим конфигурационное пространство в волновой механике Шредингера, которое для простоты возьмем одномерным: $-\infty < q < +\infty$. Волновыми функциями будут $\varphi(q)$

с конечным $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q)|^2 dq$, они образуют пространство Гильберта

(ср. II. 3). Рассмотрим операторы q, \dots и $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, \dots$. Они, очевидно, линейны, но их области определения ни в коей мере не охватывают все гильбертово пространство. Для q, \dots это не так, потому что

$$\int_{-\infty}^{\infty} |q\varphi(q)|^2 dq = \int_{-\infty}^{\infty} q^2 |\varphi(q)|^2 dq$$

может легко оказаться бесконечным, даже при конечном $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q)|^2 dq$, так что $q\varphi(q)$ не будет принадлежать более гильбертову пространству. Это не так и для $\frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq}$, поскольку существуют недифференцируемые функции, так же как и такие, для которых $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q)|^2 dq$ конечен, а

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dq} \varphi(q) \right|^2 dq = \frac{h^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{d}{dq} \varphi(q) \right|^2 dq$$

не конечен (например, $|q|^{\frac{1}{2}} e^{-q^2}$ или $e^{-q^2} \sin(e^{q^2})$). Однако их области определения всюду плотны: Оба оператора, разумеется, применимы к каждой $\varphi(q)$, которая $\neq 0$ лишь в конечном интервале $-C \leq q \leq C$ и всюду непрерывно дифференцируема; а такое множество функций повсюду плотно⁵⁹⁾. Определим далее:

Определение 8. Два оператора A и A^* назовем сопряженными, если они имеют одну и ту же область определения, причем в этой области

$$(Af, g) = (f, A^*g), \quad (A^*f, g) = (f, Ag).$$

(Заменяя взаимно f, g и производя комплексное сопряжение с обеих сторон равенства, убеждаемся, что каждое из этих соотношений следует из другого. Далее ясно, что связь A с A^* симметрична, т. е. что A^* и A также сопряженные, так что $A^{**} = A$.)

⁵⁹⁾ В соответствии с изложением II.3 (при обсуждении условия *E.*) нам достаточно уметь аппроксимировать с любой точностью все линейные комбинации следующих функций: $f(x) = 1$ на множестве, состоящем из конечного числа интервалов, и равно 0 всюду вне их. Это удается, если мы будем уметь аппроксимировать каждую из этих функций в отдельности; в свою очередь достаточно научиться делать это для функций с общим 1-интервалом (остальные функции будут суммами таких). Пусть, например, интервалом будет $a < x < b$. Функция

$$f(x) = 0 \quad \text{для } x < a - \varepsilon \quad \text{или } x > b + \varepsilon,$$

$$f(x) = \cos^2 \frac{\pi}{2} \frac{a-x}{\varepsilon} \quad \text{для } a - \varepsilon \leq x \leq a,$$

$$f(x) = \cos^2 \frac{\pi}{2} \frac{x-b}{\varepsilon} \quad \text{для } b \leq x \leq b + \varepsilon,$$

$$f(x) = 1 \quad \text{для } a < x < b$$

в самом деле удовлетворяет нашим требованиям регулярности и вместе с тем приближает заданную функцию произвольно точно при достаточно малых ε .

Заметим дальше, что для A может быть найден лишь один сопряженный оператор A^* , т. е. если A есть сопряженный к A_1^* и к A_2^* , то $A_1^* = A_2^*$. В самом деле, для всех g , для которых определено Ag ,

$$(A_1^* f, g) = (f, Ag) = (A_2^* f, g),$$

и поскольку эти g всюду плотны, $A_1^* f = A_2^* f$. И так как это выполняется всегда, то $A_1^* = A_2^*$. Следовательно, A^* определено по A однозначно, так же как и A по A^* .

Мы немедленно можем убедиться в том, что 0, 1 и вообще все проекционные операторы E самосопряжены (ср. теорему 12.), т. е. для них 0^* , 1^* , E^* существуют и равны соответственно 0 , 1 , E . Далее, $(aA)^* = \bar{a}A^*$ и, если только $A \pm B$ может быть вообще определено (т. е. если их области определения всюду плотны), то $(A \pm B)^* = A^* \pm B^*$. Наконец, при ограничениях на область определения, которые могут быть легко установлены, $(AB)^* = (B^* A^*)$ (ведь $(ABf, g)^* = (Bf, A^* g) = (f, B^* A^* g)$), равно как и $(A^{-1})^* = A^{*-1}$, так как

$$(A^{-1} f, g) = (A^{-1} f, A^* A^{*-1} g) = (AA^{-1} f, A^{*-1} g) = (f, A^{*-1} g).$$

В частности, для случая волновой механики Шредингера (которую мы рассматривали и раньше, но здесь будет иметься в виду k -мерное конфигурационное пространство), когда гильбертово пространство состоит из $\varphi(q_1, \dots, q_k)$ с конечными

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k,$$

мы имеем для операторов q_l, \dots и $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l}, \dots$

$$(q_l)^* = (q_l), \quad \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l} \right)^* = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l}.$$

Первое очевидно, поскольку

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} q_l \cdot \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{q_l \cdot \psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k. \end{aligned}$$

Второе утверждает

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l} \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_l} \psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k,$$

т. е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\partial}{\partial q_l} \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} + \right. \\ \left. + \varphi(q_1, \dots, q_k) \cdot \overline{\frac{\partial}{\partial q_l} \psi(q_1, \dots, q_k)} \right\} dq_1 \dots dq_k = 0,$$

т. е.

$$\lim_{\substack{A \rightarrow +\infty \\ B \rightarrow +\infty}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} [\varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)}]_{q_l = -B}^{q_l = +A} \times \\ \times dq_1 \dots dq_{l-1} dq_{l+1} \dots dq_k = 0.$$

Предел должен существовать, поскольку сходимость всех интегралов

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \dots dq_1 \dots dq_k$$

несомненна (так как φ , ψ , $\frac{\partial}{\partial q_l} \varphi$, $\frac{\partial}{\partial q_l} \psi$ принадлежат пространству Гильберта), так что важно только именно его равенство нулю. Но если бы он не был равен нулю, то (несомненно существующий) предел при $q_l \rightarrow +\infty$ (или при $q_l \rightarrow -\infty$) выражения

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_{l-1} dq_{l+1} \dots dq_k$$

был бы не равен нулю, что несомненно сопоставимо с абсолютной сходимостью интеграла

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\psi(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_{l-1} dq_l dq_{l+1} \dots dq_k$$

(φ , ψ принадлежат пространству Гильберта!).

Если A есть интегральный оператор

$$A\varphi(q_1, \dots, q_k) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} K(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k) \varphi(q'_1, \dots, q'_k) dq'_1 \dots dq'_k,$$

то непосредственно получаем следующее утверждение: A^* есть также интегральный оператор, однако ядро его не $K(q_1, \dots, q_k; q'_1, \dots, q'_k)$, но

$$\overline{K(q'_1, \dots, q'_k; q_1, \dots, q_k)}.$$

Рассмотрим теперь положение вещей в матричной теории, где пространство Гильберта состоит из последовательностей x_1, x_2, \dots с конечной $\sum_{\mu=1}^{\infty} |x_{\mu}|^2$. Линейный оператор A переводит $\{x_1, x_2, \dots\}$ в $\{y_1, y_2, \dots\}$

$$A\{x_1, x_2, \dots\} = \{y_1, y_2, \dots\},$$

где вследствие линейности A , y_1, y_2, \dots должны зависеть от x_1, x_2, \dots линейно

$$y_{\mu} = \sum_{v=1}^{\infty} a_{\mu v} x_v^{(60)}.$$

⁶⁰⁾ Это рассуждение не точно, поскольку оно оперирует понятием линейности в случае бесконечных сумм и прочего. Но оно может быть улучшено таким образом: Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ будет полной ортонормированной системой, а A и A^* — сопряженными операторами. Пусть $f = \sum_{v=1}^{\infty} x_v \varphi_v$, $Af = \sum_{v=1}^{\infty} y_v \varphi_v$.

Тогда

$$y_{\mu} = (Af, \varphi_{\mu}) = (f, A^* \varphi_{\mu}) = \sum_{v=1}^{\infty} (f, \varphi_v) (\overline{A^* \varphi_{\mu}}, \varphi_v) =$$

[в силу теоремы 7., γ)]

$$= \sum_{v=1}^{\infty} x_v (\overline{\varphi_{\mu}}, \overline{A \varphi_v}) = \sum_{v=1}^{\infty} (A \varphi_v, \varphi_{\mu}) x_v.$$

Если мы теперь положим $a_{\mu v} = (A \varphi_v, \varphi_{\mu})$, то получим формулу из текста $y_{\mu} = \sum_{v=1}^{\infty} a_{\mu v} x_v$, где уже обеспечивается абсолютная сходимость.

В гильбертовом пространстве последовательностей x_1, x_2, \dots последовательности $\varphi_1 = 1, 0, 0, \dots; \varphi_2 = 0, 1, 0, \dots; \dots$ образуют полную ортонормированную систему (в чем можно легко убедиться). Тогда для $f = (x_1, x_2, \dots)$ имеем $f = \sum_{v=1}^{\infty} x_v \varphi_v$, а для $Af = (y_1, y_2, \dots)$ имеем $Af = \sum_{v=1}^{\infty} y_v \varphi_v$, чем достигается полное согласие с текстом.

Если мы образуем $a_{\mu v}^*$ для A^* , то увидим, что

$$a_{\mu v}^* = (A^* \varphi_v, \varphi_{\mu}) = (\varphi_v, A \varphi_{\mu}) = \overline{(A \varphi_{\mu}, \varphi_v)} = \overline{a_{\mu v}}.$$

Следовательно, оператор A характеризуется заданием матрицы $a_{\mu\nu}$. Легко видеть, что матрица $\bar{a}_{\nu\mu}$ (комплексно-сопряженная транспонированная!) соответствует оператору A^* (см. прим. ⁶⁰)).

Аналогия с положением в матричной теории, которую мы сейчас обнаружили, подсказывает нам способ ввести понятие эрмитова оператора, которым мы сейчас и воспользуемся. Одновременно мы введем два других понятия, которые окажутся существенными для наших дальнейших целей.

Определение 9. Оператор A назовем эрмитовым, если $A^* = A$.

Назовем его также дефинитным, если всегда $(Af, f) \geq 0$ ⁶¹.

Оператор U назовем унитарным, если $UU^* = U^*U = 1$ ⁶².

Для унитарных операторов мы, таким образом, имеем $U^* = U^{-1}$. По определению,

$$(Uf, Ug) = (U^*Uf, g) = (f, g),$$

значит, в частности, (при $f = g$), $\|Uf\| = \|f\|$. Напротив унитарная природа оператора следует из последних свойств, если U определен повсюду и принимает все значения (ср. прим. ⁶²). Мы доказываем это следующим образом: во-первых, если верно, что

$$\|Uf\| = \|f\|,$$

то, значит,

$$(Uf, Uf) = (f, f); \quad (U^*Uf, f) = (f, f).$$

Если мы заменим здесь f на $\frac{f+g}{2}$ и другой раз на $\frac{f-g}{2}$ и вычтем их друг из друга, то, как легко подсчитать,

$$\operatorname{Re}(Uf, Ug) = \operatorname{Re}(f, g).$$

Если мы подставим if вместо f , то получим Im вместо Re . Итак, вообще справедливо, что

$$(Uf, Ug) = (f, g), \quad \text{т. е.} \quad (U^*Uf, g) = (f, g).$$

При данном f это верно для всех g , значит, $U^*Uf = f$, и поскольку это выполняется для всех f , то $U^*U = 1$. Мы должны еще показать, что $UU^* = 1$ также. Для каждого f существует g такое, что $Ug = f$, значит, $UU^*f = UU^* \cdot Ug = U \cdot U^*Ug = Ug = f$, следовательно, $UU^* = 1$.

Поскольку вследствие линейности

$$\|Uf - Ug\| = \|U(f - g)\| = \|f - g\|,$$

⁶¹) (Af, f) вещественно в любом случае, так как равно

$$(A^*f, f) = (f, Af) = (\overline{Af}, f).$$

⁶²) Следовательно, U , U^* должны быть определены повсюду. Далее они обратны друг другу и, следовательно, принимают каждое значение один и только один раз.

то каждый унитарный оператор непрерывен, что отнюдь не обязательно для эрмитовых операторов. Например, операторы $q \dots$ и $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \dots$, столь важные для квантовой механики, — не непрерывны⁶³⁾.

Из наших формальных правил исчисления для A^* немедленно следует, что если U, V унитарны, то будут унитарны и U^{-1}, UV , следовательно, и все степени U . Если A, B эрмитовы, то $A \pm B$ также эрмитовы. Напротив, aA — эрмитов лишь при вещественных a (исключая $A = 0$), а AB эрмитов, лишь если A и B коммутируют, т. е. если $AB = BA$. Далее мы знаем, что все проекционные операторы (и в частности $0, 1$) эрмитовы и что эрмитовы операторы q_1, \dots и $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots$ теории Шредингера. Вместе с A эрмитовы и все его степени (так же, как и A^{-1} , если он существует), равно как и все полиномы с вещественными коэффициентами. Замечательно, что при эрмитовом A и произвольном X оказывается эрмитовым и оператор XAX^* :

$$(XAX^*)^* = X^*A^*X^* = XAX^*.$$

Следовательно, например, эрмитовы все XX^* ($A = 1$) и X^*X (X — заменяется на X^*). При унитарном U , UAU^{-1} эрмитов, поскольку $U^{-1} = U^*$.

Непрерывность для операторов, так же как и для численных функций обычного анализа, является свойством первостепенной важности. Мы поэтому хотим сформулировать несколько характерных условий существования этого свойства для случая линейных операторов.

Теорема 18. Линейный оператор R непрерывен всюду, если он непрерывен в точке $f = 0$. Необходимым и достаточным условием для этого опять является существование постоянной C такой, что всегда $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$. В свою очередь, это условие эквивалентно тому, что всегда справедливо

$$|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|.$$

Для эрмитовых R этого достаточно потребовать только для $f = g : |(Rf, f)| \leq C \cdot \|f\|^2$ или, поскольку (Rf, f) вещественно (прим. ⁶¹⁾ на стр. 76),

$$-C \cdot \|f\|^2 \leq (Rf, f) \leq C \cdot \|f\|^2.$$

63) При данном $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q)|^2 dq$ как $\int q^2 |\varphi(q)|^2 dq$, так и $\int \left| \frac{d}{dq} \varphi(q) \right|^2 dq$

можно сделать произвольно большими. Возьмем, например, $\varphi(q) = ae^{-bq^2}$. Все три интеграла конечны ($b > 0!$), но пропорциональны соответственно $a^2 b^{-1/2}, a^2 b^{-3/2}, a^2 b^{1/2}$, так что любым двум из них могут быть предписаны произвольные значения.

Замечание. Концепция непрерывности операторов восходит к Hilbert'у⁶⁴⁾. Он характеризовал это свойство как «ограниченность» и определял его предпоследним из данных выше критериев. Если в последнем критерии всегда выполняется только одно из неравенств, то R называется полуограниченным: сверху или снизу. Например, всякий дефинитный оператор полуограничен снизу ($C = 0$).

Доказательство. Непрерывность в $f = 0$ означает, что для каждого $\epsilon > 0$ существует такое $\delta > 0$, что из $\|f\| < \delta$ следует $\|Rf\| < \epsilon$. Тогда из $\|f - f_0\| < \delta$ следует, что

$$\|R(f - f_0)\| = \|Rf - Rf_0\| < \epsilon,$$

т. е., что R непрерывно также в $f = f_0$ и, следовательно, всюду.

Если выполняется $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$ (конечно $C > 0$), то мы можем доказать непрерывность, положив $\delta = \frac{\epsilon}{C}$. Напротив, если имеется непрерывность, мы можем определить δ для $\epsilon = 1$ и положить $C = \frac{2}{\delta}$. Ибо

$$\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$$

выполняется для $f = 0$ без дальнейшего. Для $f \neq 0$, т. е. $\|f\| > 0$

пусть $g = \frac{1}{\|f\|} f$. В этом случае $\|g\| = \frac{1}{2} \delta$ и, следовательно,

$$\|Rg\| = \frac{1}{\|f\|} \|Rf\| < 1, \quad \|Rf\| < \frac{\|f\|}{\frac{1}{2} \delta} = C \cdot \|f\|.$$

Из $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$ следует, что $|(Rf, g)| \leq \|Rf\| \cdot \|g\| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$. Напротив, из $|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$ мы получим $\|Rf\|^2 \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$, если положим $g = Rf$, и, следовательно, $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$. Еще остается показать, что для эрмитовых R из $|(Rf, f)| \leq C \cdot \|f\|$ следует $|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$. Подставляя $\frac{f+g}{2}$ и $\frac{f-g}{2}$ вместо f , получаем:

$$\begin{aligned} |\operatorname{Re}(Rf, g)| &= \left| \left(R \frac{f+g}{2}, \frac{f+g}{2} \right) - \left(R \frac{f-g}{2}, \frac{f-g}{2} \right) \right| \leq \\ &\leq C \left(\left\| \frac{f+g}{2} \right\|^2 + \left\| \frac{f-g}{2} \right\|^2 \right) = C \frac{\|f\|^2 + \|g\|^2}{2} \text{ } ^{65)}. \end{aligned}$$

⁶⁴⁾ Göttingen Nachrichten, 1906.

⁶⁵⁾ В приведении к этому виду важна эрмитовость оператора R :

$$\begin{aligned} \left(R \frac{f+g}{2}, \frac{f+g}{2} \right) - \left(R \frac{f-g}{2}, \frac{f-g}{2} \right) &= \\ &= \frac{(Rf, g) + (Rg, f)}{2} = \frac{(Rf, g) + (\overline{f}, \overline{Rg})}{2} = \operatorname{Re}(Rf, g) \end{aligned}$$

(в третьем шаге).

Подставляем теперь af , $\frac{1}{a}g$ вместо f , g , как при доказательстве теоремы 1.. Минимизируя правую сторону, получим $|\operatorname{Re}(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|$. Затем, заменяя f на $e^{ia}f$ (a — вещественно), получим в качестве максимума левой части

$$|(Rf, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|.$$

Конечно, это справедливо только, если Rg определено, но поскольку эти g всюду плотны, а Rg вовсе не входит в окончательный результат, то в силу непрерывности это выполняется всегда.

Докажем еще одну теорему о дефинитных операторах:

Теорема 19. Если R эрмитов и дефинитный оператор, то всегда

$$|(Rf, g)| \leq \sqrt{V(Rf, f)(Rg, g)}$$

и, значит, из $(Rf, f) = 0$ тогда следует, что $Rf = 0$.

Доказательство. Приведенное неравенство следует из справедливости $(Rf, f) \geq 0$ (дефинитность) совершенно так, как в теореме 1. доказывалось неравенство Шварца $|(f, g)| \leq \sqrt{V(f, f)(g, g)}$ (т. е. $\leq \|f\| \cdot \|g\|$), исходя из $(f, f) \geq 0$. Если теперь $(Rf, f) = 0$, то из этого неравенства следует также, что $(Rf, g) = 0$; если Rg имеет смысл. Следовательно, оно выполнено для всюду плотного множества g и, значит, в силу аргументов непрерывности, для всех g . Значит, $Rf = 0$.

Наконец, мы коснемся важного понятия коммутативности двух операторов R , S , т. е. отношения $RS = SR$.

Из $RS = SR$ следует, что

$$S \dots SSR = S \dots SRS = S \dots RSS = \dots = RS \dots SS,$$

т. е. R и S^n коммутируют ($n = 1, 2, \dots$). Поскольку $R \cdot 1 = 1 \cdot R = R$ и $S^0 = 1$, то это верно и для $n = 0$. Если существует S^{-1} , то $S^{-1} \cdot SR \cdot S^{-1} = S^{-1} \cdot RS \cdot S^{-1}$ и, поскольку

$$S^{-1} \cdot SR \cdot S^{-1} = S^{-1}S \cdot R \cdot S^{-1} = RS^{-1},$$

$$S^{-1} \cdot RS \cdot S^{-1} = S^{-1}R \cdot SS^{-1} = S^{-1}R,$$

то и $S^{-1}R = RS^{-1}$. Так что $n = -1$ и, значит, и $n = -2, -3, \dots$ также допустимы, т. е. R коммутирует со всеми степенями S . Повторные рассуждения показывают, что все степени R коммутируют со всеми степенями S . Если R коммутирует с S и с T , то он, очевидно, коммутирует со всеми aS , а также с $S \pm T$, ST . Вместе с результатами, полученными выше, это означает, что если R , S коммутируют, то коммутируют также любые полиномы из R с любыми полиномами из S . В частности, при $R = S$ все полиномы по R коммутируют между собой.

6. Проблема собственных значений

Итак, мы продвинулись достаточно далеко, чтобы рассмотреть в абстрактном пространстве Гильберта ту самую задачу, которая составляла в ее частных реализациях F_z или F_{Ω} центральный вопрос квантовой механики — решение уравнений E_1 . и E_2 . из I. 3. Мы назовем ее проблемой собственных значений и должны будем сформулировать ее заново и более единообразным способом.

В I. 3 и в E_1 . и в E_2 . требовалось найти все решения $\varphi \neq 0$ уравнения

$E.$

$$H\varphi = \lambda\varphi,$$

где H — эрмитов оператор, отвечающий функции Гамильтона (ср. обсуждение в I. 3), φ — элемент гильбертова пространства, а λ — вещественное число (H — дано, λ и φ — ищутся). При этом, однако, выдвигаются определенные требования относительно числа нужных решений. Их должно быть столько, чтобы

1. в матричной теории из этих решений

$$\varphi_1 = \{s_{11}, s_{12}, \dots\}, \quad \varphi_2 = \{s_{21}, s_{22}, \dots\}, \dots$$

(напомним, что мы в F_Z !) могла бы быть образована матрица $S = \{s_{\mu\nu}\}$, которая имеет обратную S^{-1} (ср. I. 3);

2. в волновой теории в ряд по решениям

$$\varphi_1 = \varphi_1(q_1, \dots, q_f), \quad \varphi_2 = \varphi_2(q_1, \dots, q_f), \dots$$

можно было бы разложить любую функцию $\varphi(q_1, \dots, q_f)$ (не обязанную быть решением уравнения)

$$\varphi(q_1, \dots, q_f) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(q_1, \dots, q_f)$$

($\varphi_1, \varphi_2, \dots$ могут принадлежать различным значениям λ). (Последнее обстоятельство не упоминалось, правда, в I. 3, но оно необходимо для дальнейшего развития волновой теории и, в частности, для «теории возмущений» Шредингера⁶⁶⁾.)

Но 1. ведет к тому же, что и 2., потому что матрица S переводит $\{1, 0, 0, \dots\}, \{0, 1, 0, \dots\}, \dots$ соответственно в

$$\{s_{11}, s_{12}, s_{13}, \dots\}, \quad \{s_{21}, s_{22}, s_{23}, \dots\}, \dots,$$

и, следовательно, все гильбертово пространство \mathfrak{H}_{∞} в замкнутое линейное многообразие, натянутое на $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, и, значит, для того,

⁶⁶⁾ См. третью статью из упомянутого в прим.⁹⁾ на стр. 13 сборника (Ann. Phys. [4] Bd. 80 (1926)).

чтобы существовала S^{-1} , последнее обязано тоже быть равным \mathbf{H}_{∞} . А 2. утверждает то же самое прямо: оно тоже требует, чтобы каждое φ могло быть аппроксимировано с любой степенью точности линейной комбинацией $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ⁶⁷⁾.

Выясним, сколь сильно это условие, и попутно докажем еще раз свойства уравнения E , пользуясь тем формальным аппаратом, который теперь имеем в своем распоряжении.

Во-первых, — поскольку мы требуем $\varphi \neq 0$ и поскольку $a\varphi$ есть решение, коль скоро φ является таковым, — достаточно рассмотреть только решения с $\|\varphi\| = 1$. Во-вторых, нет нужды требовать, чтобы λ было вещественным, потому что это следует из $\mathbf{H}\varphi = \lambda\varphi$:

$$(\mathbf{H}\varphi, \varphi) = (\lambda\varphi, \varphi) = \lambda(\varphi, \varphi) = \lambda$$

(ср. II. 5, прим. ⁶¹⁾ на стр. 76). В-третьих, решения φ_1, φ_2 , принадлежащие различным λ_1, λ_2 , взаимно ортогональны:

$$(\mathbf{H}\varphi_1, \varphi_2) = \lambda_1(\varphi_1, \varphi_2); \quad (\mathbf{H}\varphi_1, \varphi_2) = (\varphi_1, \mathbf{H}\varphi_2) = \lambda_2(\varphi_1, \varphi_2).$$

Значит, $(\varphi_1, \varphi_2) = 0$, так как $\lambda_1(\varphi_1, \varphi_2) = \lambda_2(\varphi_1, \varphi_2)$, а $\lambda_1 \neq \lambda_2$.

Пусть теперь $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ — это отличные друг от друга λ , для которых E разрешимо. (Если мы выберем для каждого λ с разрешимым $\mathbf{H}\varphi = \lambda\varphi$ по одному решению φ_λ длины 1, то эти φ образуют, в силу сделанных прежде замечаний, ортонормированную систему. Следовательно, по *теореме 3^(\infty)*, из II. 2 этот набор образует конечную или бесконечную последовательность. Но, значит, мы можем записывать и λ как (быть может, обрывающуюся) последовательность.) Для всякого $\lambda = \lambda_p$ все решения уравнения $\mathbf{H}\varphi = \lambda\varphi$ образуют линейное многообразие и притом замкнутое⁶⁸⁾. Следовательно, согласно *теореме 9*, существует ортонормированное множество $\varphi_{p,1}, \dots, \varphi_{p,u_p}$ таких решений, которые как раз растягивают это замкнутое линейное многообразие. Ясно, что число u_p — это максимальное число линейно-независимых решений с $\lambda = \lambda_p$. Это число известно под названием

⁶⁷⁾ Мы сознательно не входим здесь в более точные вопросы сходимости; в оригинальных формах матричной и волновой теорий эти вопросы тоже не устанавливались с аккуратностью; позже мы установим это (ср., например, II. 9).

⁶⁸⁾ Последнее обстоятельство очевидно без дальнейших пояснений только для непрерывных, повсюду определенных \mathbf{H} , т. е. если из $f_n \rightarrow f$ следует, что $\mathbf{H}f_n \rightarrow \mathbf{H}f$. Между тем достаточно будет, как легко убедиться, и менее ограничивающего свойства из $f_n \rightarrow f$, $Hf_n \rightarrow f^*$ следует, что $\mathbf{H}f = f^*$ (это так называемая «замкнутость» \mathbf{H} ; ср. работу автора в Math. Ann. Bd. 102 (1929)). Это последнее всегда выполняется для квантовомеханических операторов, даже для не непрерывных. Точнее, незамкнутый эрмитов оператор может быть сделан замкнутым (и эрмитовым) с помощью однозначного расширения его области определения (что не имеет места, например, для свойства непрерывности, ср. II. 9, стр. 112).

кратности собственного значения λ_p . ($v = 1, 2, \dots, \infty$; $v = \infty$ может встречаться. Например, $\lambda = 1$ для $H = 1$.) В соответствии с предыдущим рассуждением $\varphi_{p,1}, \dots, \varphi_{p,v}$, с двумя разными p также взаимно ортогональны. Следовательно, полный набор всех

$$\varphi_{p,v} \quad (p = 1, 2, \dots; v = 1, \dots, v_p)$$

также образует ортонормированную систему. Зная источник этой системы, мы замечаем, что на нее натянуто то же самое замкнутое линейное многообразие, что и на все решения φ проблемы E .

Пронумеруем $\varphi_{p,v}$ в любом порядке, обозначая их через ψ_1, ψ_2, \dots , соответствующие им λ — через $\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots$ Итак, сформулированное прежде утверждение, что все решения E , должны растягивать \mathfrak{N}_∞ как замкнутое линейное многообразие, гласит теперь, что это должны делать уже только ψ_1, ψ_2, \dots (подмножество решений!) — и, следовательно, по *теореме 7.α*, что эта ортонормированная система полна.

Таким образом, решение проблемы собственных значений в смысле квантовой механики требовало бы найти как раз столько решений

$$\varphi = \psi_1, \psi_2, \dots \quad \text{и} \quad \lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots$$

проблемы E , чтобы из них можно было образовать полную нормированную ортогональную систему. Это, однако, в общем случае никоим образом невозможно. Так, например, в волновой теории мы видим, что часть решений E . (т. е. E_2 . из I. 3), — а ведь нам нужны все, чтобы можно было разложить по решениям каждую волновую функцию (ср. замечание выше), — не обладает конечным интегралом от квадрата абсолютной величины⁶⁹⁾, т. е. не принадлежит гильбертову пространству. В последнем же (а ведь в E_2 . мы учтываем лишь его) не оказывается поэтому полной нормированной ортогональной системы решений.

С другой стороны, гильбертова теория проблемы собственных значений показывает, что это явление отнюдь не представляет исключения в поведении операторов (даже для непрерывных⁷⁰⁾). Значит, нам придется разобраться в том, что это означает физически; ср. III. 3). Если это явление имеет место, т. е. если ортонормированная система, составленная из решений E ., не полна, то говорят, что у H есть «непрерывный спектр» («Streckenspektrum»), $(\lambda_1, \lambda_2, \dots)$ образуют «дискретный» спектр («Punktspektrum») H .

Наша следующая задача состоит в том, чтобы найти, поскольку E . не годится, формулировку проблемы собственных значений эрмитова оператора и применить ее к квантовой механике. Прежде всего мы должны, следуя пути, указанному Гильбертом (ср. прим. ⁷⁰⁾), объяснить постановку проблемы собственных значений.

⁶⁹⁾ Ср., например, как рассматривает Шредингер задачу об атоме водорода; работа, цитированная в прим. ¹⁶⁾, стр. 18.

⁷⁰⁾ Ср. работу, цитированную в прим. ⁶⁴⁾, стр. 78.

7. Продолжение

Уравнение

$$H\varphi = \lambda\varphi$$

и требование, чтобы из его решений можно было построить полную ортонормированную систему, перенесены по аналогии из конечномерного \mathfrak{M}_n .

В \mathfrak{M}_n , H — это матрица $\{h_{\mu\nu}\}$, $\mu, \nu = 1, \dots, n$; $h_{\mu\nu} = \bar{h}_{\nu\mu}$, и тот факт, что решения $\varphi = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ уравнения $H\varphi = \lambda\varphi$, т. е.

$$\sum_{\nu=1}^n h_{\mu\nu} x_{\nu} = \lambda x_{\mu},$$

содержат полную ортонормированную систему, хорошо известен в алгебре⁷¹⁾.

Это свойство \mathfrak{M}_n , как мы видели, не может быть перенесено в \mathfrak{M}_{∞} непосредственным переходом $n \rightarrow \infty$. Таким образом, проблема собственных значений в \mathfrak{M}_{∞} должна быть сформулирована иным способом. Сейчас мы увидим, что проблема собственных значений в \mathfrak{M}_n может быть преобразована к такому виду, что в этой новой формулировке (которая в \mathfrak{M}_n эквивалентна старой) переход к $n \rightarrow \infty$ становится возможен. Иными словами, обе формулировки выражают во всех \mathfrak{M}_n ($n = 1, 2, \dots$) одно и то же (а именно — что эрмитову матрицу можно привести к главным осям), но одна может быть распространена на \mathfrak{M}_{∞} , в то время как другая, напротив, нет.

Пусть $\{x_{11}, \dots, x_{1n}\}, \dots, \{x_{n1}, \dots, x_{nn}\}$ будет полной ортонормированной системой из решений уравнения для собственных значений и $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ будут соответствующие λ . Итак, векторы $\{x_{11}, \dots, x_{1n}\}, \dots, \{x_{n1}, \dots, x_{nn}\}$ образуют декартову систему координат в \mathfrak{M}_n . Тогда формулы преобразования координат ξ_1, \dots, ξ_n в этой координатной системе к некоторым другим ξ_1, \dots, ξ_n имеют вид

$$\{\xi_1, \dots, \xi_n\} = \xi_1 \{x_{11}, \dots, x_{1n}\} + \dots + \xi_n \{x_{n1}, \dots, x_{nn}\},$$

т. е.

$$\xi_1 = \sum_{\mu=1}^n x_{\mu 1} \xi_{\mu}, \dots, \xi_n = \sum_{\mu=1}^n x_{\mu n} \xi_{\mu},$$

а для обратного преобразования

$$\xi_1 = \sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{1\mu} \xi_{\mu}, \dots, \xi_n = \sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{n\mu} \xi_{\mu}.$$

⁷¹⁾ Ср. книгу Куранта и Гильберта, цитированную в прим.³⁰⁾, стр. 25.

Мы можем записать условия $\sum_{v=1}^n h_{\mu v} x_{\rho v} = \lambda_\rho x_{\rho \mu}$ с помощью переменных ξ_1, \dots, ξ_n и нового ряда переменных η_1, \dots, η_n (с соответствующими им по предыдущей формуле ψ_1, \dots, ψ_n) в виде

$$\sum_{\rho, \mu=1}^n \left(\sum_{v=1}^n h_{\mu v} x_{\rho v} \right) \xi_\rho \bar{\eta}_\mu = \sum_{\rho, \mu=1}^n \lambda_\rho x_{\rho \mu} \xi_\rho \bar{\eta}_\mu,$$

т. е.

$$(D.) \quad \sum_{\mu, v=1}^n h_{\mu v} \xi_v \bar{\eta}_\mu = \sum_{\rho=1}^n \lambda_\rho \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho \mu} \xi_\mu \right) \overline{\left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho \mu} \eta_\mu \right)}.$$

Тогда декартов характер координатной системы выражается формулой

$$(O.) \quad \sum_{\mu=1}^n \xi_\mu \bar{\eta}_\mu = \sum_{\rho=1}^n \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho \mu} \xi_\mu \right) \overline{\left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho \mu} \eta_\mu \right)}.$$

Итак, отыскание матрицы $\{x_{\mu v}\}$ со свойствами **D.** и **O.** — вот что эквивалентно в \mathfrak{M}_n решению проблемы собственных значений; в такой форме переход к \mathfrak{M}_∞ нам не удался. Эта неудача отнюдь не неожиданна по следующей причине. Именно, условия **D.** и **O.** не определяют неизвестные λ_ρ и $x_{\mu v}$ полностью. В самом деле, как показывает теория этого «приведения к главным осям» (см. прим. 71), стр. 83), величины λ_ρ определяются единственным образом с точностью до порядка, но положение с $x_{\mu v}$ гораздо хуже. Очевидно, что каждую строку $x_{\rho 1}, \dots, x_{\rho n}$ можно домножить на множитель ϑ_ρ абсолютной величины 1, если же некоторые λ_ρ совпадают, то возможно даже произвольное унитарное преобразование соответствующих строк $x_{\rho 1}, \dots, x_{\rho n}$! Безнадежно пытаться совершить трудный переход к пределу $n \rightarrow \infty$ с такими однозначно не закрепленными величинами: в самом деле, как может сходиться процесс, если по дороге λ_ρ и $x_{\mu v}$ могут по произволу испытывать большие колебания, которые оказываются возможными вследствие неполноты в их определении!

Но это указывает нам путь для правильного подхода к задаче: мы должны прежде всего попытаться заменить условия **D.** и **O.** и неизвестные λ_ρ и $x_{\mu v}$ такими, которые обладают недостающими свойствами однозначности — после этого, как мы покажем, переход к пределу будет представлять уже меньшие трудности.

Если l есть некоторое значение, которое принимает одно или несколько из λ_ρ , то выражение

$$\sum_{\lambda_\rho=l} \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho \mu} \xi_\mu \right) \overline{\left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\rho \mu} \eta_\mu \right)}$$

инвариантно по отношению к указанным выше (с **D.** и **O.** совместным) изменениям λ_p , $x_{\mu\nu}$. Если l отлична от всех λ_p , то сумма равна нулю и, значит, тем более инвариантна. Тогда эрмитова форма (ξ и η обозначают ξ_1, \dots, ξ_n и η_1, \dots, η_n соответственно)

$$E(l; \xi, \eta) = \sum_{\lambda_p \leqq l} \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\mu p} \xi_\mu \right) \left(\overline{\sum_{\mu=1}^n x_{\mu p} \eta_\mu} \right)$$

также инвариантна (при произвольном l !). Если мы знаем $E(l; \xi, \eta)$ (т. е. ее коэффициенты), то, отправляясь от нее, мы можем без труда вернуться назад к λ_p и $x_{\mu\nu}$. Следовательно, если мы сформулируем задачу о собственных значениях (т. е. **D.** и **O.**) так, чтобы в ней фигурировала только $E(l; \xi, \eta)$ вместо λ_p , $x_{\mu\nu}$, то мы достигнем желаемой однозначной формулировки.

Итак, пусть $E(l)$ будет матрицей эрмитовой формы $E(l; \xi, \eta)$ ⁷²⁾. Что будут значить условия **D.** и **O.** в применении к семейству матриц $E(l)$?

Условие **O.** означает: Если l достаточно велико (именно, больше, нежели все λ_p), то $E(l) = 1$ (единичной матрице). Из природы $E(l)$ следует также, что если l достаточно мало (именно, меньше всех λ_p), то $E(l) = 0$ и если l возрастает от $-\infty$ до $+\infty$, то $E(l)$ везде постоянна, за исключением конечного числа точек (различные среди значений $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, которые мы назовем $l_1 < l_2 < \dots < l_m$, $m \leqq n$), где она изменяется скачками. Далее, скачок лежит слева от этой точки (поскольку $\sum_{\lambda_p \leqq l}$ непрерывна справа как функция от l , тогда как для $\sum_{\lambda_p < l}$ было бы как раз наоборот). Наконец, как мы это покажем, при $l' \leqq l''$

$$E(l') E(l'') = E(l'') E(l') = E(l')$$

(матричное произведение!).

Удобнее доказать это для $E(l'; \xi, \eta)$, $E(l''; \xi, \eta)$ в системе координат ξ_1, \dots, ξ_n и η_1, \dots, η_n . Вводя эти координаты, мы получим из $E(l'; \xi, \eta)$ и $E(l''; \xi, \eta)$

$$\sum_{\lambda_p \leqq l'} \xi_p \bar{\eta}_p \quad \text{и} \quad \sum_{\lambda_p \leqq l''} \xi_p \bar{\eta}_p.$$

⁷²⁾ Т. е. $E(l) = (e_{\mu\nu}(l))$, $E(l; \xi, \eta) = \sum_{\mu, \nu=1}^n e_{\mu\nu}(l) \xi_\mu \bar{\eta}_\nu$, соответственно

$$e_{\mu\nu}(l) = \sum_{\lambda_p \leqq l} x_{\mu p} \bar{x}_{\nu p}.$$

Следовательно, матрицы эти таковы: нули всюду, кроме диагонали, 1 на ρ -м месте диагонали, если $\lambda_\rho \leqq l'$ или соответственно $\leqq l''$, в противном случае также нуль. Для таких матриц высказанное выше утверждение очевидно.

Переформулируем теперь еще и $D..$. Оно означает, очевидно,

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_\nu \bar{\eta}_\mu = \sum_{\tau=1}^m l_\tau \{E(l_\tau; \xi, \eta) - E(l_{\tau-1}; \xi, \eta)\}$$

(l_0 — какое-нибудь число, меньшее l_1). Но поскольку $E(l; \xi, \eta)$ постоянно на каждом из отрезков

$-\infty < l < l_1; \quad l_1 \leqq l < l_2; \dots; \quad l_{m-1} \leqq l < l_m; \quad l_m \leqq l < +\infty$,

то для любого набора чисел

$$\Lambda_0 < \Lambda_1 < \Lambda_2 < \dots < \Lambda_k,$$

если l_1, \dots, l_m входят в число $\Lambda_1, \dots, \Lambda_k$, выполняется

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_\nu \bar{\eta}_\mu = \sum_{\tau=1}^k \Lambda_\tau \{E(\Lambda_\tau; \xi, \eta) - E(\Lambda_{\tau-1}; \xi, \eta)\}.$$

Применяя интеграл в смысле Стильтьеса⁷³⁾, мы можем переписать это как

$$\sum_{\mu, \nu=1}^n h_{\mu\nu} \xi_\nu \bar{\eta}_\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda; \xi, \eta)$$

⁷³⁾ Об интеграле в смысле Стильтьеса см. Rettig, Die Lehre von den Kettenbrüchen, Leipzig, 1913, а также в смысле специального применения к требованиям операторной теории Carleman, Equations intégrales singulières, Upsala, 1923. Читателю, менее заинтересованному в этих вещах, достаточно следующего определения: для разбиения $\Lambda_0, \Lambda_1, \dots, \Lambda_k$ интервала a, b ,

$$a \leqq \Lambda_0 < \Lambda_1 < \dots < \Lambda_k \leqq b$$

образуем сумму

$$\sum_{\tau=1}^k f(\Lambda_\tau) \{g(\Lambda_\tau) - g(\Lambda_{\tau-1})\}.$$

Если она всегда сходится, когда разбиения $\Lambda_0, \Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_k$ делаются все меньше и меньше, то существует интеграл

$$\int_a^b f(x) dg(x),$$

определенный как предел сумм. (Для $g(x) = x$ он переходит в известный интеграл в смысле Римана.) [Относительно русских руководств по интегралу Стильтьеса ср. прим.⁵²⁾ на стр. 51. — Прим. ред.]

$\left(\int_{-\infty}^{+\infty}$ может быть, очевидно, заменен на любой \int_a^b , с $a < l_1$,
 $b > l_m \right)$, или, если мы рассмотрим коэффициенты и напишем для самих матриц уравнение, справедливое для всех коэффициентов, то как

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda),$$

где $H = \{h_{\mu\nu}\}$.

Итак, пока возникла следующая задача: Для данной эрмитовой матрицы $H = \{h_{\mu\nu}\}$ надо разыскать семейство эрмитовых матриц $E(\lambda)$ ($-\infty < \lambda < +\infty$) со следующими свойствами:

S_1 . При достаточно $\begin{cases} \text{малых} \\ \text{больших} \end{cases} \lambda$, $E(\lambda) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. $E(\lambda)$ (как функция от λ) постоянна всюду, за исключением конечного числа точек, где она изменяется скачками. Скачок всегда происходит слева от данной точки.

S_2 . Всегда $E(\lambda') E(\lambda'') = E(\text{Min}(\lambda', \lambda''))$ ⁷⁴⁾.

S_3 . Выполняется (с интегралом в смысле Стильтьеса)

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda).$$

Мы сейчас не будем останавливаться на обратном рассуждении — отправляясь от S_1 . — S_3 . вернуться к решениям D . и O . (хотя это было бы совсем просто), потому что только последняя форма проблемы собственных значений будет нужна нам для квантовой механики. Вместо этого мы сразу перейдем к обобщению S_1 . — S_3 . от конечного на бесконечное число измерений, т. е. к переходу от \mathfrak{M}_n к \mathfrak{M}_{∞} .

В \mathfrak{M}_{∞} мы, очевидно, должны понимать H и $E(\lambda)$ как эрмитовы операторы, — значит, мы должны будем попытаться найти для данного H такое семейство $E(\lambda)$, чтобы они сопоставлялись ему некоторым определяемым по примеру S_1 . — S_3 . образом. Должна быть найдена \mathfrak{M}_{∞} -аналогия S_1 . — S_3 !

S_2 . остается неизменным в этом переходе, поскольку число измерений \mathfrak{M}_n не играет в нем никакой роли. Мы только переформулируем его, воспользовавшись результатами, полученными в связи

⁷⁴⁾ $\text{Min}(a, b, \dots, e)$ есть наименьшее, а $\text{Max}(a, b, \dots, e)$ — наибольшее из конечного набора вещественных чисел a, b, \dots, e .

с операторами проектирования (II. 4). Во-первых, это свойство утверждает, что $E(\lambda)^2 = E(\lambda)$ при $\lambda' = \lambda'' = \lambda$, т. е. $E(\lambda)$ являются операторами проектирования. Но тогда S_2 . означает (мы можем ограничиться случаем $\lambda' \leq \lambda''$, поскольку для $\lambda' \geq \lambda''$ получится совершенно аналогичный результат), что из $\lambda' \leq \lambda''$ следует $E(\lambda') \leq E(\lambda'')$ (ср. теорему 14. и последующий текст в II. 4).

S_3 . требует некоторой осторожности, поскольку выражение $A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda)$ непосредственно лишено смысла, так как интеграл

стильеса определен для чисел, а не для операторов. Но легко заменить H и $E(\lambda)$ числами и это нас опять приведет к нужному операторному соотношению. Потребуем, чтобы для всех f, g из \mathfrak{H}_∞ выполнялось

$$(Hf, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g),$$

если только Hf имеет смысл. Соотношение $H = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda)$ следует понимать символически, только как сокращенную запись предыдущего.

S_1 ., наконец, весьма существенно затрагивается переходом к бесконечному числу измерений. Точки, после которых $E(\lambda)$ становится равным 0 или 1, или в которых $E(\lambda)$ испытывает скачки, соответствуют (в \mathfrak{H}_n) собственным значениям H , а интервалы, где она постоянна — интервалам, свободным от собственных значений. Если теперь устремить $n \rightarrow \infty$, то могут произойти самые разные вещи. Наибольшее и наименьшее значения могут уйти соответственно на $+\infty$ или на $-\infty$, но остальные, поскольку их становится все больше, могут стесниться все плотнее, так что интервалы постоянства могут постепенно стянуться в точки. (Этот последний признак указывает на то, что в гильбертовой теории операторов при некоторых обстоятельствах появляется так называемый непрерывный спектр⁷⁵⁾.) Мы должны, следовательно, изменить S_1 . при переходе от \mathfrak{H}_n к \mathfrak{H}_∞ совершенно существенным образом. Надо допустить возможность того, что изменения $E(\lambda)$ не будут более иметь дискретного, скачкообразного характера.

С такой точки зрения очень естественно будет отказаться от требования, чтобы функция $E(\lambda)$ принимала конечные значения 0 и 1, и

⁷⁵⁾ См. ссылку в прим.⁶⁴⁾, стр. 78, а также книжку Карлемана, упомянутую в прим.⁷³⁾ на стр. 86. Нам придется иметь много дела с этим «непрерывным спектром», ср. II, 8.

требовать только сходимости к 0 или к 1 (при $\lambda \rightarrow -\infty$ или $\lambda \rightarrow +\infty$ соответственно). Равным образом вместо постоянства на отрезках и скачков в точках выступает допустимость непрерывного возрастания. С другой стороны, менее ограничительное требование, что в возможных точках прерывности разрыв должен происходить только слева, мы можем попытаться сохранить. Соответственно мы сформулируем S_1 , следующим образом: при $\lambda \rightarrow -\infty$, $E(\lambda) \rightarrow 0$; при $\lambda \rightarrow +\infty$, $E(\lambda) \rightarrow 1$, а при $\lambda \rightarrow \lambda_0$, $\lambda \geq \lambda_0$, $E(\lambda) \rightarrow E(\lambda_0)$ ⁷⁶.

Кое-что еще следует сказать относительно S_3 . В конечномерном пространстве \mathfrak{K}_n выполнялось $A = \sum_{\tau=1}^m l_\tau F_\tau$, если понимать под F_τ матрицу $E(l_\tau) - E(l_{\tau-1})$. В силу S_1 , имеем:

для $\sigma \geq \tau$

$$F_\tau E(l_\sigma) = E(l_\tau) E(l_\sigma) - E(l_{\tau-1}) E(l_\sigma) = E(l_\tau) - E(l_{\tau-1}) = F_\tau,$$

а для $\sigma \leq \tau - 1$

$$F_\tau E(l_\sigma) = E(l_\tau) E(l_\sigma) - E(l_{\tau-1}) E(l_\sigma) = E(l_\sigma) - E(l_\sigma) = 0.$$

Следовательно, поскольку $F_\sigma = E(l_\sigma) - E(l_{\sigma-1})$,

$$F_\tau F_\sigma = \begin{cases} F_\tau & \text{для } \tau = \sigma, \\ 0 & \text{для } \tau \neq \sigma. \end{cases}$$

Отсюда следует

$$H^2 = \left(\sum_{\tau=1}^m l_\tau F_\tau \right)^2 = \sum_{\tau, \sigma=1}^m l_\tau l_\sigma F_\tau F_\sigma = \sum_{\tau=1}^m l_\tau^2 F_\tau$$

(и таким же образом $H^p = \sum_{\tau=1}^m l_\tau^p F_\tau$). Следовательно, такое же преобразование, что для самого H , приводит к

$$H^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 dE(\lambda).$$

Поэтому в \mathfrak{K}_∞ мы предположим символическое уравнение, построенное аналогичным образом, а значит, в числах

$$(H^2 f, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(E(\lambda) f, g).$$

⁷⁶) Обозначая $A(\lambda) \rightarrow B$, ($A(\lambda)$, B — операторы в \mathfrak{K}_∞ , λ — параметр), мы понимаем под этим, что для всех f из \mathfrak{K}_∞ , $A(\lambda) f \rightarrow Bf$. Таким образом, это сокращенная запись утверждения о сходимости в гильбертовом пространстве.

(Мы подтвердим это последующим построением.) Для $f = g$ из-за

$$(\mathbf{H}^2 f, f) = (\mathbf{H}f, \mathbf{H}f) = \|\mathbf{H}f\|^2, \quad (E(\lambda) f, f) = \|E(\lambda) f\|^2,$$

отсюда следует

$$\|\mathbf{H}f\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda) f\|^2).$$

Эта формула, однако, дает основания ожидать, что $E(\lambda)$ не только определяет значения $\mathbf{H}f$ в тех случаях, когда они существуют, но и позволяет заключить, когда они имеют смысл. В самом деле, интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda) f\|^2)$ содержит неотрицательную функцию ($\lambda^2 \geq 0$) и

монотонно возрастающее выражение $\|E(\lambda) f\|^2$ под знаком дифференциала (ср. S_2 . и *теорему 15.* в II. 4). Следовательно, этот интеграл по своей природе сходящийся, — т. е. нуль или положителен и конечен, — или собственно бесконечен, т. е. равен $+\infty$ ⁷⁷⁾. Последнее заключение справедливо независимо от связи с \mathbf{H} , т. е. без относительно к тому, имеет ли $\mathbf{H}f$ смысл, или нет. Следует поэтому ожидать, что $\mathbf{H}f$ имеет смысл (т. е. существует в \mathfrak{N}_∞) тогда и только тогда, когда предполагаемое значение $\|\mathbf{H}f\|^2$ т. е. имеющее для

всех f смысл выражение $\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda) f\|^2)$ конечно.

Итак, с нашей новой формулировкой S_1 . — S_3 . задача выглядит следующим образом: Для данного эрмитова оператора \mathbf{H} мы ищем семейство проекционных операторов $E(\lambda)$ ($-\infty \leq \lambda \leq \infty$) с такими свойствами:

\bar{S}_1 . При $\lambda \rightarrow -\infty$ или $\lambda \rightarrow +\infty$, $E(\lambda) f \rightarrow 0$ или $\rightarrow f$ соответственно. При $\lambda \rightarrow \lambda_0$, $\lambda \geq \lambda_0$, $E(\lambda) f \rightarrow E(\lambda_0) f$ (для каждого f !).

\bar{S}_2 . Из неравенства $\lambda' \leq \lambda''$ следует, что $E(\lambda') \leq E(\lambda'')$.

\bar{S}_3 . Интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda) f\|^2)$, по природе своей сходящийся (равный нулю или положительному конечному числу) или же собственно расходящийся ($+\infty$) характеризует область определения \mathbf{H} : $\mathbf{H}f$ определено тогда и только тогда, когда этот

⁷⁷⁾ Это следует из определения интеграла Стильтьеса, данного в прим.⁷³⁾ на стр. 86. Доказательство смотри в указанной там литературе.

интеграл конечен (или нуль). В этом случае для всех g

$$(Hf, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g).$$

(Последний интеграл абсолютно сходится, если первый конечен⁷⁸⁾.)

Сам H вовсе не входит в формулировку свойств \bar{S}_1 , \bar{S}_2 . Семейство проекционных операторов со свойствами \bar{S}_1 , \bar{S}_2 , мы будем называть разложением единицы («die Zerlegung der Einheit»). О разложении единицы, связанном соотношением \bar{S}_3 , с оператором H , мы будем говорить, как о принадлежащем H .

Итак, проблема собственных значений в \mathfrak{N}_{∞} ставится следующим образом: Всегда ли существует для данного эрмитова оператора H , принадлежащее H разложение единицы, и если существует, то сколько? (Нужный ответ должен быть: существует всегда точно одно.) В дальнейшем нам еще останется показать, как наше определение проблемы собственных значений соотносится с общими методами, которыми пользуются в квантовой механике (в частности, в волновой теории) для определения собственных значений эрмитовых операторов.

8. Предварительное рассмотрение проблемы собственных значений

Первый вопрос, возникающий в связи с нашей формулировкой проблемы собственных значений, состоит в том, что \bar{S}_1 — \bar{S}_3 звучат совершенно не так, как задача, с которой мы начинали предыдущий раздел, и их взаимоотношение больше не прослеживается. Правда, мы вывели S_1 — S_3 в \mathfrak{N}_n из первоначальной формулировки, но в \mathfrak{N}_{∞} все соотношения существенно видоизменились. Обе формулировки более не эквивалентны (как они были — что специально отмечалось в свое время — в \mathfrak{N}_n). Значит, вся проблема в сущности снова остается открытой, и мы должны показать, в какой мере новая формулировка совпадает со старой, т. е. в каких случаях и каким образом наши $E(\lambda)$ определяют прежние $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ и $\varphi_1, \varphi_2, \dots$

Если разложение единицы $E(\lambda)$ принадлежит эрмитову оператору A , то в каких случаях уравнение

$$A\varphi = \lambda_0\varphi$$

разрешимо? Уравнение $A\varphi = \lambda_0\varphi$ означает то же самое, что

$$(A\varphi, g) - \lambda_0(\varphi, g) = 0$$

⁷⁸⁾ Cp. Math. Ann. Bd. 102 (1929).

для всех g , т. е.

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) - \lambda_0(\varphi, g) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) - \lambda_0 \int_{-\infty}^{\infty} d(E(\lambda)f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda)f, g).$$

Положим сначала $g = E(\lambda_0)f$, тогда

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda)f, E(\lambda_0)f) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda_0)E(\lambda)f, f) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\text{Min}(\lambda, \lambda_0))f, f) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\text{Min}(\lambda, \lambda_0))f\|^2).$$

Мы можем разбить теперь $\int_{-\infty}^{\infty}$ в сумму $\int_{-\infty}^{\lambda_0} + \int_{\lambda_0}^{\infty}$. В $\int_{-\infty}^{\lambda_0}$ мы можем заменить $\text{Min}(\lambda, \lambda_0)$ на λ , а в $\int_{\lambda_0}^{\infty}$ на λ_0 . Значит, в последнем интеграле под знаком дифференциала стоит константа и таким образом он исчезает. Для первого интеграла остается тогда

$$\int_{-\infty}^{\lambda_0} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2) = 0.$$

Далее положим $g = f$, тогда

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(E(\lambda)f, f) = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)\|^2).$$

Вычитая из этого первое уравнение, получим (изменив знак подин-

тегрального выражения)

$$\int_{\lambda_0}^{\infty} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2) = 0.$$

Рассмотрим теперь интегралы

$$\int_{-\infty}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2), \quad \int_{\lambda_0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2)$$

несколько более подробно. Подынтегральное выражение в обоих случаях ≥ 0 и под знаком дифференциала стоит монотонно возрастающая функция от λ . Следовательно, мы имеем для каждого $\varepsilon > 0$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2) &\geq \int_{-\infty}^{\lambda_0 - \varepsilon} (\lambda_0 - \lambda) d(\|E(\lambda)f\|^2) \geq \\ &\geq \int_{-\infty}^{\lambda_0 - \varepsilon} \varepsilon d(\|E(\lambda)f\|^2) = \varepsilon \|E(\lambda_0 - \varepsilon)f\|^2, \\ \int_{\lambda_0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2) &\geq \int_{\lambda_0 + \varepsilon}^{\infty} (\lambda - \lambda_0) d(\|E(\lambda)f\|^2) \geq \\ &\geq \int_{\lambda_0 + \varepsilon}^{\infty} \varepsilon d(\|E(\lambda)f\|^2) = \varepsilon (\|f\|^2 - \|E(\lambda_0 + \varepsilon)f\|^2) = \\ &= \varepsilon \|f - E(\lambda_0 + \varepsilon)f\|^2. \end{aligned}$$

Следовательно, правые стороны ≤ 0 , но поскольку они тождественно ≥ 0 , то они должны исчезать. Итак,

$$E(\lambda_0 - \varepsilon)f = 0, \quad E(\lambda_0 + \varepsilon)f = f.$$

Вследствие непрерывности $E(\lambda)$ справа мы можем устремить $\varepsilon \rightarrow 0$ справа во втором уравнении: $E(\lambda_0)f = f$. При $\lambda \geq \lambda_0$ тогда, в силу второго уравнения ($\varepsilon = \lambda - \lambda_0 \geq 0$), $E(\lambda)f = f$, тогда как для $\lambda < \lambda_0$, в силу первого уравнения ($\varepsilon = \lambda_0 - \lambda > 0$), $E(\lambda)f = 0$. Итак,

$$E(\lambda)f = \begin{cases} f & \text{для } \lambda \geq \lambda_0, \\ 0 & \text{для } \lambda < \lambda_0. \end{cases}$$

Но это необходимое условие также и достаточное, поскольку из него следует, что

$$(Af, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) = \lambda_0(f, g)$$

(следует вспомнить определение интеграла Стильеса, данное

в прим. ⁷³⁾ на стр. 86), а значит, $(Af - \lambda_0 f, g) = 0$ для всех g , т. е. $Af = \lambda_0 f$.

Что означает это условие? Во-первых, оно включает разрыв $E(\lambda)$ в точке $\lambda = \lambda_0$. По теореме 17. в II. 4, $E(\lambda)$ сходится к проекционным операторам $E^{(1)}(\lambda_0)$ или $E^{(2)}(\lambda_0)$ при $\lambda \rightarrow \lambda_0$, $\lambda < \lambda_0$ и при $\lambda \rightarrow \lambda_0$, $\lambda > \lambda_0$ соответственно ⁷⁹⁾. В силу $S_{1.}$, $E^{(2)}(\lambda) = E(\lambda_0)$, но в случае разрыва $E^{(1)}(\lambda_0) \neq E(\lambda_0)$. Далее, поскольку $E(\lambda) \leqq E(\lambda_0)$ при $\lambda < \lambda_0$ ($S_{2.}$), то $E^{(1)}(\lambda_0) \leqq E(\lambda_0)$. Следовательно, $E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0)$ есть проекционный оператор, и скачок характеризуется тем, что он не равен нулю.

Из того, что $E(\lambda)f = 0$ для всех $\lambda > \lambda_0$, следует, что $E^{(1)}(\lambda_0)f = 0$, однако (так как $E(\lambda) \leqq E^{(1)}(\lambda_0)$), из второго также следует первое. $E(\lambda)f = f$ для всех $\lambda \geqq \lambda_0$ следует из $E(\lambda_0)f = f : E(\lambda_0) \leqq E(\lambda)$, $E(\lambda)E(\lambda_0) = E(\lambda_0)$, но, следовательно, $E(\lambda)f = E(\lambda)E(\lambda_0)f = E(\lambda_0)f = f$. Значит, уравнение $Af = \lambda_0 f$ характеризуется условием $E^{(1)}(\lambda_0)f = 0$, $E(\lambda_0)f = f$, или (теорема 14. в II. 4) $\{E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0)\}f = f$. И значит, если мы напишем $E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0) = P_{\mathfrak{M}_{\lambda_0}}$, то из предыдущего следует, что f принадлежит к \mathfrak{M}_{λ_0} .

Тем самым показано, что $Af = \lambda f$ имеет решения $f \neq 0$ только в точках разрыва непрерывности $E(\lambda)$, и что эти решения f образуют замкнутое линейное многообразие \mathfrak{M}_{λ_0} , определенное выше.

Итак, полная нормированная ортогональная система, которую мы искали в II. 6 из решений (с возможно различными λ) существует тогда и только тогда, когда все \mathfrak{M}_{λ_0} ($-\infty < \lambda_0 < \infty$) вместе растягивают замкнутое линейное многообразие \mathfrak{M}_∞ . [Мы обсуждали в II. 6, как должно быть достигнуто построение этой системы. Взаимную ортогональность \mathfrak{M}_{λ_0} можно продемонстрировать теперь другим способом. Из $\lambda_0 < \mu_0$ следует, что

$$P_{\mathfrak{M}_{\lambda_0}} P_{\mathfrak{M}_{\mu_0}} = [E(\lambda_0) - E^{(1)}(\lambda_0)][E(\mu_0) - E^{(1)}(\mu_0)] = 0,$$

так как

$$E(\lambda_0) = E^{(1)}(\lambda_0) \leqq E(\lambda_0) \leqq E^{(1)}(\mu_0), \quad E(\mu_0) - E^{(1)}(\mu_0) \leqq 1 - E^{(1)}(\mu_0).$$

Не устанавливая точных критериев, при которых это выполняется, установим только следующее: если существует некоторый интервал μ_1 ,

⁷⁹⁾ Это было показано только для последовательностей λ . Однако предел всех таких последовательностей λ ($\lambda \rightarrow \lambda_0$ и $\lambda < \lambda_0$ или соответственно $\lambda > \lambda_0$) должен быть один и тот же, поскольку две таких последовательности могут быть скомбинированы в одну — и поскольку эта последовательность должна иметь предел, то обе составляющие ее последовательности обязаны иметь одинаковый предел. Из этого следует, что и в случае непрерывного изменения λ также существует сходимость (к общему пределу всех последовательностей).

μ_2 , в котором $E(\lambda)$ возрастает непрерывным образом [т. е. $\mu_1 < \mu_2$, $E(\lambda)$ непрерывна при $\mu_1 \leq \lambda \leq \mu_2$, $E(\mu_1) \neq E(\mu_2)$], то это безусловно не справедливо. В самом деле, при $\lambda \leq \mu_1$, $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda) \leq E(\lambda) \leq E(\mu_1)$, в то время как при $\mu_1 < \lambda \leq \mu_2$, $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda) = 0$ в силу непрерывности, а при $\mu_2 < \lambda$, $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda) \leq 1 - E^{(1)}(\lambda) \leq 1 - E(\mu_2)$. Следовательно, $E(\lambda) - E^{(1)}(\lambda)$ всегда ортогонально к $E(\mu_2) - E(\mu_1)$. Положим $E(\mu_2) - E(\mu_1) = P_{\mathfrak{N}}$, тогда все \mathfrak{M}_λ ортогональны к \mathfrak{N} . Если из них будет выбираться полная ортогональная система, то \mathfrak{N} будет содержать только нуль, т. е. $E(\mu_2) - E(\mu_1) = 0$, в противоречии с первоначальным предположением.

Разрывы непрерывности $E(\lambda)$ мы назовем дискретным спектром оператора A . Это те λ , для которых $Af = \lambda f$ имеет решения $f \neq 0$. Если мы выберем из каждого $\mathfrak{M}_\lambda \neq 0$ элемент f с $\|f\| = 1$, то вследствие взаимной ортогональности \mathfrak{M}_λ мы получим ортонормированную систему. В силу *теоремы 3* из II. 2, она или конечна, или образует последовательность. Следовательно, и значения λ дискретного спектра образуют, в максимальном варианте, последовательность.

Все те точки, в окрестности которых $E(\lambda)$ не постоянна, образуют спектр A . Мы видели, что если есть интервалы, заполненные спектром A , но не дискретным спектром, т. е. интервалы непрерывности $E(\lambda)$, где она не постоянна, то проблема собственных значений безусловно неразрешима в том смысле, в каком она была сформулирована в начале раздела II. 6. Мы не будем дальше исследовать точные условия неразрешимости: она может также возникать и при несколько других обстоятельствах, когда точки дискретного спектра проникают во все интервалы, где есть точки непрерывного спектра. Отделение дискретного спектра от остальной части спектра — задача значительно более трудоемкая и выходит за пределы этой работы. (Читатель найдет эти исследования в цитированных выше трудах Гильберта.)

С другой стороны, мы хотим показать, как при наличии полной ортонормированной системы $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ решений $A\varphi = \lambda\varphi$ (с $\lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots$ для соответствующих $\varphi = \varphi_1, \varphi_2, \dots$) — как мы будем говорить, в случае чисто дискретного спектра — должна строиться $E(\lambda)$. Мы имеем

$$E(\lambda) = \sum_{\lambda_p \leq \lambda} P_{[\varphi_p]}^{(80)}.$$

(Сумма \sum может иметь 0 членов, тогда $E(\lambda) = 0$; или положительное конечное число членов, тогда смысл ее очевиден; или, наконец, бесконечно много, в таком случае она сходится в силу аргументов в конце II. 4.)

⁸⁰⁾ Это точная переформулировка определения $E(\lambda; \xi, \eta)$, данного в II. 7.

$\bar{S}_2.$ в сущности очевидно, потому что при $\lambda' \leqslant \lambda'',$

$$E(\lambda'') - E(\lambda') = \sum_{\lambda' < \lambda_p \leqslant \lambda''} P_{[\varphi_p]}$$

есть проекционный оператор, поэтому $E(\lambda') \leqslant E(\lambda'')$ (*теорема 14.*).

$\bar{S}_1.$ мы докажем следующим образом: для каждого f

$$\sum_p \|P_{[\varphi_p]} f\|^2 = \sum_p |(f, \varphi_p)|^2 = \text{прим. } ^{81}) = \|f\|^2$$

(*теорема 7.*), т. е. $\sum_p \|P_{[\varphi_p]} f\|^2$ сходится. Следовательно, для каждого $\varepsilon > 0$ мы можем найти конечное число членов p , так что сумма \sum_p , взятая только по этим членам, будет $> \|f\|^2 - \varepsilon$, и, значит, каждая сумма \sum'_p , из которой они исключены, будет $< \varepsilon$. Значит, также

$$\left\| \sum'_p P_{[\varphi_p]} f \right\|^2 = \sum'_p \|P_{[\varphi_p]} f\|^2 < \varepsilon.$$

Отсюда, в частности, следует, что

$$\left\| \sum_{\lambda_p \leqslant \lambda} P_{[\varphi_p]} f \right\|^2 < \varepsilon, \quad \left\| \sum_{\lambda_p > \lambda} P_{[\varphi_p]} f \right\|^2 < \varepsilon, \quad \left\| \sum_{\lambda_0 < \lambda_p \leqslant \lambda} P_{[\varphi_p]} f \right\|^2 < \varepsilon,$$

если λ взято, соответственно, — достаточно малым, достаточно большим или достаточно близким к λ_0 (и $\lambda \geqslant \lambda_0$). Тогда

$$E(\lambda) f = \sum_{\lambda_p \leqslant \lambda} P_{[\varphi_p]} f \rightarrow 0 \quad \text{при } \lambda \rightarrow -\infty,$$

$$f - E(\lambda) f = \sum_{\lambda_p > \lambda} P_{[\varphi_p]} f \rightarrow 0 \quad ^{82}) \quad \text{при } \lambda \rightarrow +\infty,$$

$$E(\lambda) f - E(\lambda_0) f = \sum_{\lambda_0 < \lambda_p \leqslant \lambda} P_{[\varphi_p]} f \rightarrow 0 \quad \text{при } \lambda \rightarrow \lambda_0, \quad \lambda \geqslant \lambda_0,$$

т. е. $\bar{S}_1.$ удовлетворяется.

⁸¹⁾ Как показывает построение, выполненное при доказательстве *теоремы 10.*, $P_{[\varphi]} f = (f, \varphi) \cdot \varphi$ (если $\|\varphi\| = 1$), следовательно, $\|P_{[\varphi]} f\| = |(f, \varphi)| = |(\varphi, f)|.$

⁸²⁾ Имеем (по *теореме 7.*):

$$f = \sum_p (f, \varphi_p) \cdot \varphi_p = \sum_p P_{[\varphi_p]} f.$$

Это следует также из рассуждений в конце II. 4.

Чтобы убедиться в справедливости $S_3.$, положим $f = x_1\varphi_1 + x_2\varphi_2 + \dots$. Тогда $Af = \lambda_1 x_1\varphi_1 + \lambda_2 x_2\varphi_2 + \dots$. Для того чтобы Af было определено, $\sum_{p=1}^{\infty} \lambda_p^2 |x_p|^2$ должна быть конечной. Но

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\left(\sum_{\lambda_p \leq \lambda} |x_p|^2\right) = \text{прим. } 83) = \sum_{p=1}^{\infty} \lambda_p^2 |x_p|^2,$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)f, g) &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\left(\sum_{\lambda_p \leq \lambda} x_p \bar{y}_p\right) = \text{прим. } 83) = \\ &= \sum_{p=1}^{\infty} \lambda_p x_p \bar{y}_p = (Af, g). \end{aligned}$$

Рассмотрим еще два случая чисто непрерывного спектра, т. е. такие, когда вовсе нет дискретных уровней. Пусть \mathfrak{H}_{∞} есть пространство всех функций $f(q_1, \dots, q_l)$ с конечным

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |f(q_1, \dots, q_l)|^2 dq_1 \dots dq_l,$$

A — оператор q_j, \dots , эрмитов характер которого очевиден.

83) По прим. 73), стр. 86,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\left(\sum_{\lambda_p \leq \lambda} |x_p|^2\right) = \lim \sum_{\tau=1}^k \Lambda_{\tau}^2 \sum_{\Lambda_{\tau-1} < \lambda_p \leq \Lambda_{\tau}} |x_p|^2.$$

Если везде $\Lambda_{\tau}^2 - \Lambda_{\tau-1}^2 < \epsilon$ (т. е. если сетка $\Lambda_0, \dots, \Lambda_k$ достаточно частая), то выражение меняется на величину, меньшую $\epsilon \sum_{p=1}^{\infty} |x_p|^2 = \epsilon \|f\|^2$; если мы заменим его на сумму

$$\sum_{\tau=1}^k \sum_{\Lambda_{\tau-1} < \lambda_p \leq \Lambda_{\tau}} \lambda_p^2 |x_p|^2 = \sum_{\Lambda_0 < \lambda_p \leq \Lambda_k} \lambda_p^2 |x_p|^2$$

и если Λ_0 достаточно мало, а Λ_k достаточно велико, то оно произвольно близко к $\sum_{p=1}^{\infty} \lambda_p^2 |x_p|^2$. Таким образом, эта сумма есть искомый предел, т. е. значение интеграла.

Следующая интегральная формула доказывается в точности таким же способом.

Мы видим, что $Af = \lambda f$ приводит к тому, что $(q_j - \lambda) f(q_1, \dots, q_l) = 0$, т. е. $f(q_1, \dots, q_l) = 0$ повсюду, за исключением только, может быть, $(l-1)$ -мерной плоскости $q_j = \lambda$. Однако эта плоскость несущественна (в соответствии со сказанным в II. 3, в связи с условием **B.**), поскольку ее мера Лебега (т. е. объем) равна нулю. Следовательно, $f \equiv 0$ ⁸⁴⁾. Значит, никогда не существует решения $Af = \lambda f$, не равного нулю. Но мы видим также (не строго!), где можно было бы ожидать решения: $(q_j - \lambda) f(q_1, \dots, q_l) = 0$ означает, что $f \neq 0$ может быть лишь при $q_j = \lambda$. Линейная комбинация решений с различными λ , скажем с $\lambda = \lambda', \lambda'', \dots, \lambda^{(s)}$, была бы тогда f , не равной нулю только в точках

$$q_j = \lambda', \lambda'', \dots, \lambda^{(s)}.$$

⁸⁴⁾ В этом пункте строгий математический метод, которому мы следуем, отвечается от символического метода Дирака (сравни, например, его книгу, цитированную в прим. ¹⁾ на стр. 9). Последний сводится к тому, что f , для которых $(q - \lambda) f(q) = 0$, тоже рассматриваются в качестве решений (для простоты мы положили $l = j = 1$, $q_j = q$). Однако поскольку все $(f, g) = \int f(q) \overline{g(q)} dq = 0$, а f должна быть $\neq 0$, то $f(q)$ надо мыслить бесконечной в точке $q = \lambda$ (единственной, где она $\neq 0$), и столь сильно бесконечной, что $(f, g) \neq 0$. Поскольку при $q \neq \lambda$, $f(q) = 0$, то $\int f(q) \overline{g(q)} dq$ может зависеть только от $\overline{g(\lambda)}$ и в действительности ясно, что интеграл, в силу своего свойства аддитивности, должен быть пропорционален $\overline{g(\lambda)}$. Следовательно, он должен быть равен $c \overline{g(\lambda)}$, и c должно быть отлично от нуля. Если мы заменим $f(g)$ на $\frac{1}{c} f(g)$, мы получим $c = 1$. Значит, мы имеем фиктивную функцию $f(q)$, для которой имеет место $\int f(q) \overline{g(q)} dq = \overline{g(\lambda)}$.

Достаточно, конечно, рассмотреть случай $\lambda = 0$. Обозначим $f(q) = \delta(q)$, определяя ее условиями:

$$\Delta. \quad q\delta(q) \equiv 0, \quad \int \delta(q) f(q) dq = f(0).$$

Для произвольных λ , $\delta(q - \lambda)$ является решением. Хотя функции δ со свойством Δ и не существует, есть последовательности функций, сходящихся к поведению такого рода (конечно, предельная функция не существует), например:

$$f_\varepsilon(q) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon} & \text{при } |x| < \varepsilon \\ 0 & \text{при } |x| > \varepsilon \end{cases} \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow +0$$

или $f_a(q) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-ax^2}$ при $a \rightarrow +\infty$. (Сравни также I. 3 и, в частности, прим. ³²⁾, стр. 27.)

Таким образом, мы можем рассматривать как линейную комбинацию всех решений с $\lambda \leq \lambda_0$ такую f , которая $\neq 0$ только для $\lambda \leq \lambda_0$. Но в случае чисто дискретного спектра у нас было

$$E(\lambda_0) = \sum_{\lambda_p \leq \lambda_0} P[\varphi_p] = P_{\mathfrak{N}_{\lambda_0}},$$

$$\mathfrak{N}_{\lambda_0} = [\varphi_p (\lambda_p \leq \lambda_0)].$$

т. е. \mathfrak{N}_{λ} состояло из линейных комбинаций всех φ_p с $\lambda_p \leq \lambda_0$ или из всех решений уравнения $Af = \lambda f$ с $\lambda \leq \lambda_0$. Соответственно — разумеется, в неточном и эвристическом смысле! — можно ожидать, что теперь $E(\lambda_0) = P_{\mathfrak{N}_{\lambda_0}}$, где \mathfrak{N}_{λ_0} состоит из тех f , которые не равны нулю только для $q_j \leq \lambda_0$. $\mathfrak{N}_{\infty} — \mathfrak{N}_{\lambda_0}$ состоит тогда, очевидно, из тех f , которые для $q_j \leq \lambda_0$ всегда равны нулю, следовательно,

$$E(\lambda_0) f(q_1, \dots, q_l) = \begin{cases} f(q_1, \dots, q_l) & \text{для } q_j \leq \lambda_0, \\ 0 & \text{для } q_j > \lambda_0. \end{cases}$$

Значит, мы нашли совершенно нестрогим образом семейство проекционных операторов $E(\lambda)$, от которых можно ждать, что они удовлетворяют требованиям $\bar{\mathcal{S}}_1$. — $\bar{\mathcal{S}}_3$. для нашего A . В действительности $\bar{\mathcal{S}}_1$. и $\bar{\mathcal{S}}_2$. удовлетворяются тривиально, а в $\bar{\mathcal{S}}_1$. даже случай $\lambda \rightarrow \lambda_0$ без условия $\lambda \geq \lambda_0$, т. е. $E(\lambda)$ непрерывна как функция λ повсюду. Чтобы убедиться в том, что $\bar{\mathcal{S}}_3$. тоже удовлетворяется, достаточно доказать справедливость уравнений:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \|E(\lambda) f\|^2 = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d \left(\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\lambda} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |f(q_1, \dots, q_j, \dots, q_l)|^2 dq_1 \dots dq_j \dots dq_l \right) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\lambda \left(\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |f(q_1, \dots, q_{j-1}, \lambda, q_{j+1}, \dots, q_l)|^2 \times \right. \\ & \quad \left. \times dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_l \right) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} q_j^2 |f(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_l)|^2 \times \\ & \quad \times dq_1 \dots dq_{j-1} dq_j dq_{j+1} \dots dq_l = \|Af\|^2. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda) f, g) = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\left(\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\lambda} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(q_1, \dots, q_j, \dots, q_l) \overline{g(q_1, \dots, q_j, \dots, q_l)} \times \right. \\
 & \times dq_1 \dots dq_j \dots dq_l \left. \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\lambda \left(\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(q_1, \dots, q_{j-1}, \lambda, q_{j+1}, \dots, q_l) \times \right. \\
 & \times \overline{g(q_1, \dots, q_{j-1}, \lambda, q_{j+1}, \dots, q_l)} dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_l \left. \right) = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} q_j f(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_l) \times
 \end{aligned}$$

$$\times \overline{g(q_1, \dots, q_{j-1}, q_j, q_{j+1}, \dots, q_l)} dq_1 \dots dq_{j-1} dq_j dq_{j+1} \dots dq_l = (Af, g).$$

Мы снова, таким образом, убеждаемся, что старая формулировка проблемы собственных значений — формулировка для точечного спектра — здесь не пригодна, поскольку $E(\lambda)$ непрерывно возрастает повсюду.

Этот пример указывает нам и в общем случае путь, на котором можно найти $E(\lambda)$ и для непрерывного спектра: мы можем определить (некорректным образом!) решения уравнения $Af = \lambda f$ (поскольку λ лежит в непрерывном спектре, эти f даже не принадлежат к \mathfrak{N}_{∞} !) и образовать их линейные комбинации для всех $\lambda \leq \lambda_0$. Они уже будут частично принадлежать \mathfrak{N}_{∞} и, возможно, образуют замкнутое линейное многообразие \mathfrak{N}_{λ_0} . Тогда можно положить $E(\lambda_0) = P_{\mathfrak{N}_{\lambda_0}}$, и если мы правильно выберем его, то может удастся доказать выполнение \bar{S}_1 . — \bar{S}_3 . (для A и этих $E(\lambda)$), и тем самым post factum преобразовать эвристические аргументы в точные⁸⁵⁾.

В качестве второго примера мы хотим рассмотреть другой важный оператор волновой механики $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_j}$. Чтобы избежать ненужных усложнений, положим $l = j = 1$ (так же точно рассматриваются и другие случаи). Итак, мы должны рассмотреть оператор

$$A'f(q) = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} f(q).$$

Если область изменения q есть $-\infty < q < +\infty$, то это эрмитов оператор, как мы убедились в II. 5. С другой стороны, при конеч-

⁸⁵⁾ Точную формулировку этой идеи (которую мы здесь рассматриваем только как эвристическое утверждение) можно найти в статьях Hellinger'a, J. f. Math. Bd. 136 (1909) и Weyl'y, Math. Ann. Bd. 68 (1910).

ной области $a \leqq q \leqq b$ это не так:

$$(A'f, g) - (f, A'g) = \int_a^b \frac{h}{2\pi i} f'(q) \overline{g(q)} dq - \int_a^b f(q) \overline{\frac{h}{2\pi i} g'(q)} dq =$$

$$= \frac{h}{2\pi i} \int_a^b \{f'(q) \overline{g(q)} + f(q) \overline{g'(q)}\} dq = \frac{h}{2\pi i} [f(q) \overline{g(q)}]_a^b =$$

$$= \frac{h}{2\pi i} [f(b) \overline{g(b)} - f(a) \overline{g(a)}].$$

Чтобы это выражение исчезало, область определения $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ должна быть ограничена таким образом, чтобы для двух произвольным образом взятых из нее f и g было бы $f(a) \overline{g(a)} = f(b) \overline{g(b)}$, т. е. $f(a) : f(b) = \overline{g(b)} : \overline{g(a)}$. Если мы будем теперь менять f при фиксированном g , то увидим, что $f(a) : f(b)$ должно быть одним и тем же числом θ во всей области (θ может также быть 0 или ∞); тогда замена f на g приводит к $\theta = \frac{1}{0}$, т. е. $|\theta| = 1$. Значит, для того чтобы $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ был эрмитовым оператором, мы должны постулировать «граничное условие» вида

$$f(a) : f(b) = \theta$$

(где θ — любое фиксированное число абсолютной величины 1).

Сначала мы возьмем интервал $-\infty < q < \infty$. Решениями уравнения $A\varphi = \lambda\varphi$, т. е. $\frac{h}{2\pi i} \varphi'(q) = \lambda\varphi(q)$ будут тогда функции

$$\varphi(q) = c e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q}.$$

Однако они непосредственно не могут быть использованы для наших нужд, потому что $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q)|^2 dq = \int_{-\infty}^{\infty} |c|^2 dq = +\infty$ (если только не имеет места $c = 0, \varphi \equiv 0$). Заметим, что в первом примере мы нашли решение $\delta(q - \lambda)$, т. е. фиктивную несуществующую функцию (ср. прим. 84)). Теперь мы нашли $e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q}$, т. е. вполне добропорядочную функцию, которая, однако, не принадлежит к \mathfrak{H}_{∞} вследствие бесконечности интеграла от квадрата ее модуля. С нашей точки зрения оба эти факта значат одно и то же, ибо то, что не принадлежит \mathfrak{H}_{∞} , для нас не существует⁸⁶⁾.

⁸⁶⁾ Конечно, только успех в физических приложениях может оправдать эту точку зрения и ее использование в квантовой механике.

Как и в первом случае, образуем теперь линейные комбинации решений с $\lambda \leqslant \lambda_0$, т. е. функции

$$f(q) = \int_{-\infty}^{\lambda_0} c(\lambda) e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q} d\lambda.$$

Нам надо надеяться, что среди них встретятся функции из \mathfrak{H}_∞ , что оные образуют замкнутое линейное многообразие $\mathfrak{N}'_{\lambda_0}$ и, наконец, что проекционные операторы $E(\lambda_0) = P_{\mathfrak{N}'_{\lambda_0}}$ образуют принадлежащее оператору A' разложение единицы. Мы получим подтверждающий первое предположение пример, полагая, скажем,

$$c(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{для } \lambda \geqslant \lambda_1 \\ 0, & \text{для } \lambda < \lambda_1 \end{cases} \quad \left| \begin{array}{l} \lambda_1 < \lambda_0, \\ \end{array} \right.$$

$$f(q) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_0} e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q} d\lambda = \frac{e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda_0 q} - e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda_1 q}}{\frac{2\pi i}{h} q},$$

потому что эта $f(q)$ регулярна при всех конечных значениях аргумента и убывает как $1/q$ при $q \rightarrow \pm\infty$, так что $\int_{-\infty}^{\infty} |f(q)|^2 dq$ конечен. Но и другие предположения также оказываются выполненными, как то действительно следует из теории интегралов Фурье. В самом деле, эта теория утверждает следующее⁸⁷⁾:

Пусть $f(x)$ — любая функция с конечным $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$. Тогда может быть образована функция

$$L f(x) = F(y) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} f(x) dx,$$

для которой интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} |F(y)|^2 dy$ также конечен и именно равен $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$. Более того, $L L f(x) = f(-x)$. (Это так называемое преобразование Лапласа, играющее важную роль во всей теории дифференциальных уравнений.)

⁸⁷⁾ Planchele, Circ. Math. di Pal. 30 (1910); Titchmarsh, Lond. Math. Soc. Proc. 22 (1924).

Если мы заменим x, y на $\sqrt{\frac{2\pi}{h}} q, \sqrt{\frac{2\pi}{h}} p$, то получим преобразование

$$Mf(q) = F(p) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{2\pi i}{h} pq} f(q) dq,$$

обладающее теми же свойствами. Именно, оно отображает \mathfrak{N}_∞ на самое себя [$Mf(q) = g(p)$ разрешимо для всякого $g(p)$ из $\mathfrak{N}_\infty : f(q) = Mg(-p)$], оставляет $\|f\|$ инвариантной и линейно. Согласно II. 5 этот оператор M унитарен. Кроме того, $M^2 f(q) = f(-q)$ и, значит, $M^{-1} f(q) = M^* f(q) = Mf(-q)$, так что M коммутирует с M^2 , т. е. с операцией $f(q) \rightarrow f(-q)$.

Далее, то, что мы имели в виду относительно $\mathfrak{N}'_{\lambda_0}$, состояло в следующем: $f(q)$ принадлежит к $\mathfrak{N}'_{\lambda_0}$, если $F(p) = M^{-1} f(q)$ равно нулю для всех $p > \lambda_0$. (Здесь

$$F(p) = \sqrt{h} c(p)$$

с $c(\lambda)$, определенным выше.) Но эти $F(p)$, как мы знаем, образуют замкнутое линейное многообразие \mathfrak{N}_{λ_0} . Следовательно, и отображение $\mathfrak{N}'_{\lambda_0}$ этого \mathfrak{N}_{λ_0} , полученное с помощью M , есть также замкнутое линейное многообразие. $E'(\lambda_0)$ образуется из $E(\lambda_0)$ совершенно так же, как $\mathfrak{N}'_{\lambda_0}$ из \mathfrak{N}_{λ_0} : преобразованием всего \mathfrak{N}_∞ при помощи M . Значит, $E'(\lambda_0) = ME(\lambda_0)M^{-1}$. Тогда $E'(\lambda)$ также, как и $E(\lambda)$, обладает свойствами \bar{S}_1, \bar{S}_2 . Остается еще доказать \bar{S}_3 , т. е. то, что разложение единицы $E(\lambda)$ принадлежит к A' .

При этом мы ограничимся тем, что покажем следующее: Если $f(q)$ дифференцируема без особых трудностей в смысле сходимости

и интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{h}{2\pi i} f'(q) \right|^2 dq$ конечен, то и интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2$

также конечен и $(A'f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E'(\lambda)f, g)^{88})$.

⁸⁸⁾ То есть $E'(\lambda)$ принадлежит не самому $A' = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$, но оператору, область определения которого включает в себя область определения A' и совпадает с A' в этой области. В развитие этого замечания см. II. 9.

В самом деле, $[M^{-1}f(q) = F(p)]$:

$$\begin{aligned} A'f(q) &= \frac{h}{2\pi i} f'(q) = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} (MF(p)) = \\ &= \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{V^h} \int F(p) e^{\frac{2\pi i}{h} pq} dp \right) = \frac{V^h}{2\pi i} \int F(p) \frac{\partial}{\partial q} \left(e^{\frac{2\pi i}{h} pq} \right) dp = \\ &= \frac{1}{V^h} \int F(p) \cdot p \cdot e^{\frac{2\pi i}{h} pq} dp = M(pF(p)). \end{aligned}$$

Следовательно, для упоминавшихся f , $A' = MAM^{-1}$ (A оператор $q \dots$, или, поскольку мы пользуемся здесь переменной p , то $p \dots$). Поскольку сделанные выше утверждения выполняются для A , $E(\lambda)$, то они справедливы и после преобразования \mathfrak{N}_∞ с помощью M . Следовательно, они выполняются также и для $A' = MAM^{-1}$ и $E'(\lambda) = ME(\lambda)M^{-1}$. Существенно иначе обстоит дело для $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ в интервале $a \leqq q \leqq b$ ($a < b$, a и b конечны), когда, как мы выяснили, для сохранения эрмитовости оператора необходимо также граничное условие

$$f(a) : f(b) = \theta \quad (|\theta| = 1).$$

Уравнение $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} f(q) = \lambda f(q)$ опять решается функцией

$$f(q) = ce^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q},$$

но теперь интеграл

$$\int_a^b |f(q)|^2 dq = \int_a^b |c|^2 dq = (b - a)|c|^2$$

конечен, так что $f(q)$ всегда принадлежит к \mathfrak{N}_∞ . С другой стороны, должно быть удовлетворено граничное условие

$$f(a) : f(b) = e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda(a-b)} = \theta$$

или, если мы положим $\theta = e^{-i\alpha}$ ($0 \leqq \alpha \leqq 2\pi$),

$$\frac{2\pi i}{h} \lambda(a-b) = -i\alpha - 2k\pi i \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots),$$

$$\lambda = \frac{h}{b-a} \left(\frac{\alpha}{2\pi} + k \right).$$

Следовательно, мы имеем дискретный спектр и нормированное решение определяется теперь условием $(b-a)|c|^2=1$, т. е., например, $c = \frac{1}{\sqrt{b-a}}$ и

$$\varphi_k(q) = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q} = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{\frac{2\pi i}{b-a} \left(\frac{a}{2\pi} + k\right)q}$$

$$(k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots).$$

Таким образом, это ортонормированная система, но она также и полна. В самом деле, если $f(q)$ ортогональна ко всем $\varphi_k(q)$, то $e^{\frac{ai}{b-a}q} f(q)$ ортогональна ко всем $e^{\frac{2\pi i}{b-a}kq}$ и, значит, $e^{\frac{ai}{2\pi}x} f\left(\frac{b-a}{2\pi}x\right)$ ортогональна ко всем e^{ikx} , т. е. к $1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \dots$

Кроме того, она определена в интервале

$$a \leqq \frac{b-a}{2\pi} x \leqq b,$$

длина которого равна 2π , так что она должна, согласно известным теоремам, обращаться в нуль⁸⁹⁾. Следовательно, $f(q) = 0$.

Итак, мы имеем здесь дело с чисто дискретным спектром — случай, подробно обсуждавшийся в начале этого раздела. Следует обратить внимание на то, как «граничное условие», т. е. θ или α , оказывает влияние на собственные значения и собственные функции.

В заключение мы можем рассмотреть случай полуограниченного интервала, скажем, $0 \leqq q < +\infty$. Прежде всего мы опять должны убедиться в эрмитовости оператора. Имеем

$$(A'f, g) - (f, A'g) = \frac{h}{2\pi i} \int_0^\infty (f'(q) \overline{g(q)} + f(q) \overline{g'(q)}) dq =$$

$$= \frac{h}{2\pi i} [f(q) \overline{g(q)}]_0^\infty.$$

Что $f(q) \overline{g(q)}$ стремится к нулю при $q \rightarrow +\infty$, показывается так же, как это делалось в II.5 в случае бесконечного (в обе стороны) интервала. Следовательно, требование должно состоять в том, что $f(0) \overline{g(0)} = 0$. Если мы положим $f = g$, то увидим, что «граничное условие» есть $f(0) = 0$. В этом случае обнаруживаются серьезные трудности. Решения уравнения $A'\varphi = \lambda\varphi$ те же самые, что и при интервале $-\infty < q < +\infty$, именно $c e^{\frac{2\pi i}{h} \lambda q}$; они не принадлежат к \mathfrak{X}_∞ .

⁸⁹⁾ Все коэффициенты Фурье исчезают, следовательно, сама функция должна обращаться в нуль (см., например, книгу Куранта и Гильберта, цитированную в прим. ³⁰⁾, стр. 25).

и не удовлетворяют граничному условию. Последнее подозрительно. Но еще удивительнее, что, следуя намеченному выше приему, мы должны были бы достичь того же $E(\lambda)$, что и для интервала $-\infty < q < +\infty$, поскольку (несобственные, т. е. не принадлежащие к \mathfrak{N}_∞) решения — те же самые. Как примирить это с тем, что сам оператор другой? К тому же это не то, что нам нужно, так как, если мы опять определим в гильбертовом пространстве F_Ω функций

$f(q) \left(0 \leqq q < +\infty, \int_0^\infty |f(q)|^2 dq \text{ конечен} \right)$ операторы M и M^{-1} :

$$Mf(q) = F(p) = \frac{1}{V\bar{h}} \int_0^\infty e^{\frac{2\pi i}{\bar{h}} pq} f(q) dq,$$

$$M^{-1}F(p) = f(q) = \frac{1}{V\bar{h}} \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{2\pi i}{\bar{h}} pq} F(p) dp (= MF(-p)),$$

то M отображает гильбертово пространство $F_{\Omega'}$ всех $f(q)$,

$$0 \leqq q < \infty, \quad \int_0^\infty |f(q)|^2 dq,$$

на другое гильбертово пространство: пространство $F_{\Omega''}$ всех $F(p)$,

$$-\infty \leqq p < \infty, \quad \int_0^\infty |F(p)|^2 dp.$$

В то время как, естественно, все еще выполняется $\|Mf(q)\| = \|f(q)\|$ (это следует из ранее упоминавшихся теорем, если положить в них $f(q) = 0$ для $-\infty < q < 0$), $\|M^{-1}F(p)\| = \|F(p)\|$, вообще говоря, не имеет места, поскольку, в силу упоминавшихся теорем, если мы

определим $f(q)$ и для $q < 0$ формулой $f(q) = \frac{1}{V\bar{h}} \int_{-\infty}^\infty e^{-\frac{2\pi i}{\bar{h}} pq} F(p) dp$,

то

$$\|F\|^2 = \int_{-\infty}^\infty |F(p)|^2 dp = \int_{-\infty}^\infty |f(q)|^2 dq,$$

$$\|M^{-1}F\|^2 = \|f\|^2 = \int_0^\infty |f(q)|^2 dq$$

— и, следовательно, $\|M^{-1}F\| < \|F\|$, если только случайно $f(q)$ (в той форме, как нам ее только что пришлось определить) не исчезнет для всех $q < 0$. Следовательно, $E'(\lambda) = ME(\lambda)M^{-1}$ — это совсем не разложение единицы⁹⁰⁾, т. е. наш метод отказывает.

Мы скоро увидим (в прим. 105), стр. 128), что это лежит в самой природе вещей, поскольку этому оператору вообще не принадлежит никакого разложения единицы.

Прежде чем закончить эти ориентирующие рассуждения, приведем несколько формальных правил вычислений с операторами, представленными в символической форме

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda)$$

с помощью их разложения единицы.

Во-первых, пусть F будет проекционным оператором, коммутирующим со всеми $E(\lambda)$. Тогда для всех $\lambda' < \lambda''$,

$$\|E(\lambda'')Ff - E(\lambda')Ff\|^2 = \|(E(\lambda'') - E(\lambda'))Ff\|^2 =$$

$$= \|F(E(\lambda'') - E(\lambda'))f\|^2 \leq \|E(\lambda'') - E(\lambda')\| \|f\|^2,$$

следовательно, поскольку $E(\lambda'')$, $E(\lambda')$, $E(\lambda'') - E(\lambda')$, так же как и

$$E(\lambda'')F, \quad E(\lambda')F, \quad E(\lambda'')F - E(\lambda')F = (E(\lambda'') - E(\lambda'))F,$$

суть проекционные операторы, то

$$\|E(\lambda'')Ff\|^2 - \|E(\lambda')Ff\|^2 \leq \|E(\lambda'')f\|^2 - \|E(\lambda')f\|^2.$$

Следовательно, $\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 \geq \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)Ff\|^2$. Тогда, по $\overline{S_3}$.

⁹⁰⁾ Правда, в действительности верно, что $M^{-1}Mf(q) = f(q)$ (достаточно определить $f(q) = 0$ при $q < 0$ и воспользоваться предыдущими теоремами), но не всегда должно выполняться $MM^{-1}F(p) = F(p)$, потому что, вообще говоря, $\|M^{-1}F\| < \|F\|$ и, значит, $\|MM^{-1}F\| < \|F\|$. Следовательно, $M^{-1}M = 1$, а $MM^{-1} \neq 1$, т. е. M^{-1} не есть истинный обратный элемент M . (Не может существовать и никакого другого обратного элемента, так как если бы он был, то, поскольку $M^{-1}M = 1$, он должен был бы быть равен нашему M^{-1} .) Как следствие этого для $E'(\lambda) = ME(\lambda)M^{-1}$, например, заключение $E'^2(\lambda) = E'(\lambda)$ еще может быть сделано (поскольку сюда входит лишь $M^{-1}M$), однако $E'(\lambda) \rightarrow MM^{-1} \neq 1$ (при $\lambda \rightarrow \infty$).

AFF имеет смысл, если имеет смысл Af . Далее, тогда

$$AF = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda) F) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(FE(\lambda)) = FA, \text{ } ^{91})$$

т. е. A и F тоже коммутируют. В частности, мы можем выбрать любой $E(\lambda)$ в качестве F (согласно $\overline{S_2}$). Тогда

$$\begin{aligned} AE(\lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda' d(E(\lambda') E(\lambda)) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda' d(E(\text{Min}(\lambda, \lambda'))) = \\ &= \int_{-\infty}^{\lambda} + \int_{\lambda}^{\infty} = \int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda') + \int_{\lambda}^{\infty} \lambda' dE(\lambda), \end{aligned}$$

и поскольку $\int_{\lambda}^{\infty} = 0$ (так как функция, стоящая под знаком дифференциала есть константа), то

$$AE(\lambda) = E(\lambda) A = \int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda').$$

В добавок отсюда следует, что

$$A^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda) A) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\left(\int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda')\right) = \text{прим. } ^{92}) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 dE(\lambda).$$

⁹¹⁾ Собственно это следовало бы доказать не символически при помощи строгого уравнения

$$(Af, g) = \int \lambda d(E(\lambda) f, g).$$

Тогда преобразования выглядят так:

$$\begin{aligned} (AFF, g) &= \int \lambda d(E(\lambda) Ff, g) = \int \lambda d(FE(\lambda) f, g) = \\ &= \int \lambda d(E(\lambda) f, Fg) = (Af, Fg) = (FAf, g). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что $AF = FA$.

⁹²⁾ Это следует из уравнения

$$\int f(\lambda) d\left(\int_{-\infty}^{\lambda} g(\lambda') dh(\lambda')\right) = \int f(\lambda) g(\lambda) dh(\lambda),$$

всегда справедливого для интеграла Стильтьеса. Это уравнение ясно без дальнейшего обсуждения в силу обратного характера операций d и \int . Точное доказательство было дано автором: Annals of Mathematics 32 (1931).

Вообще, мы имеем

$$A^n = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^n dE(\lambda),$$

поскольку мы можем по индукции переходить от $n - 1$ к n :

$$\begin{aligned} A^n &= A^{n-1}A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^{n-1} d(E(\lambda) A) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^{n-1} d\left(\int_{-\infty}^{\lambda} \lambda' dE(\lambda')\right) = \\ &= \text{прим. 92)} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^{n-1} \cdot \lambda dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^n dE(\lambda). \end{aligned}$$

Тогда, если $p(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ есть некоторый полином, то

$$p(A) = \int_{-\infty}^{\infty} p(\lambda) dE(\lambda)$$

(под $p(A)$ мы понимаем, конечно,

$$p(A) = a_0I + a_1A + \dots + a_nA^n,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE(\lambda) = 1 \text{ следует из } S_1.$$

Далее установим следующее: если $r(\lambda)$, $s(\lambda)$ — две любые функции, и если мы определяем два оператора B , C (символически) формулами

$$B = \int_{-\infty}^{\infty} r(\lambda) dE(\lambda), \quad C = \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) dE(\lambda) \text{ 93),}$$

то следует, что

$$BC = \int_{-\infty}^{\infty} r(\lambda) s(\lambda) dE(\lambda).$$

⁹³⁾ Это значит

$$(Bf, g) = \int_{-\infty}^{\infty} r(\lambda) d(E(\lambda) f, g), \quad (Cf, g) = \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) d(E(\lambda) f, g).$$

Доказательство мы проведем в точности так же, как в специальном случае $B = C = A$:

$$\begin{aligned} BE(\lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} r(\lambda') d(E(\lambda') E(\lambda)) = \int_{-\infty}^{\infty} r(\lambda') d(E(\text{Min}(\lambda, \lambda'))) = \\ &= \int_{-\infty}^{\lambda} + \int_{\lambda}^{\infty} = \int_{-\infty}^{\lambda} r(\lambda') dE(\lambda') + \int_{\lambda}^{\infty} r(\lambda') dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} r(\lambda') dE(\lambda'), \\ CB &= \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) d(BE(\lambda)) = \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) d\left(\int_{-\infty}^{\lambda} r(\lambda') dE(\lambda') \right) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) r(\lambda) dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} s(\lambda) r(\lambda) dE(\lambda). \end{aligned}$$

Могут быть легко установлены также следующие соотношения:

$$B^* = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{r(\lambda)} dE(\lambda), \quad aB = \int_{-\infty}^{\infty} ar(\lambda) dE(\lambda),$$

$$B \pm C = \int_{-\infty}^{\infty} (r(\lambda) \pm s(\lambda)) dE(\lambda).$$

Значит, не существует никаких формальных возражений против того, чтобы писать $B = r(A)$ для таких функций $r(\lambda)$ ⁹⁴⁾. В частности, замечательны следующие (разрывные!) функции:

$$e_{\lambda}(\lambda') = \begin{cases} 1 & \text{для } \lambda' \leq \lambda, \\ 0 & \text{для } \lambda' > \lambda. \end{cases}$$

Имеем для них, согласно \bar{S}_1 ,

$$e_{\lambda}(A) = \int_{-\infty}^{\infty} e_{\lambda}(\lambda') dE(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} dE(\lambda') = E(\lambda).$$

(В начале этого раздела мы обсуждали оператор $A = q_j \dots$. Его $E(\lambda)$ было умножением на 1 или на 0 соответственно для $q \leq \lambda$ или $q > \lambda$, т. е. умножением на $e_{\lambda}(q)$. Поэтому $e_{\lambda}(q_j \dots) = e_{\lambda}(q_j) \dots$ Этот пример очень хорош для того, чтобы дать интуитивное представление о введенной выше концепции.)

⁹⁴⁾ Точное обоснование этого понятия функции дано автором в Annals of Math. 32 (1931). F. Riesz первый определял общие операторные функции с помощью предельного процесса, примененного к полиномам.

9. Отступление: О существовании и единственности решения проблемы собственных значений

В предыдущем разделе мы рассмотрели вопрос о том, какие разложения единицы $E(\lambda)$ соответствуют данному эрмитову оператору A только качественно, иллюстрируя его частными примерами. Систематическое изучение этой задачи еще предстоит провести. Правда, во всей математической полноте оно вышло бы за рамки нашей книги, и нам придется ограничиться доказательством нескольких моментов и лишь формулировкой остальных, тем более, что точное знание всех этих соотношений не абсолютно необходимо для понимания квантовой механики⁹⁵.

Согласно *теореме 18.*, непрерывность линейных операторов выражается в том, что

$$(St.) \quad \|Af\| \leq C \cdot \|f\|$$

(C произвольно, но фиксировано).

По *теореме 18.* существует и еще несколько эквивалентных форм условия *St.*

$$(St_1.) \quad |(Af, g)| \leq C \cdot \|f\| \cdot \|g\|,$$

$$(St_2.) \quad |(Af, f)| \leq C \cdot \|f\|^2$$

(последнее только для эрмитовых операторов).

Условие *St₁.*, эквивалентное условию непрерывности, выражает введенное Гильбертом понятие ограниченности. Для ограниченных (т. е. непрерывных) эрмитовых операторов Гильберт поставил и разрешил проблему собственных значений (сравни прим.⁶⁴), стр. 78). Но прежде чем обсуждать этот случай, мы должны ввести еще одно дополнительное понятие.

Эрмитов оператор A называется замкнутым, если он обладает следующим свойством: Пусть f_1, f_2, \dots есть точечная последовательность, все Af_n имеют смысл и выполняется $f_n \rightarrow f$, $Af_n \rightarrow f^*$, тогда Af также имеет смысл и равно f^* . Следует заметить, что можно было бы определить непрерывность способом, весьма близким к этому требованию, именно так: если все Af_n и Af имеют смысл и если $f_n \rightarrow f$, то $Af_n \rightarrow Af$. Различие двух определений состоит в том, что для замкнутости заранее требуется существование предела f^* последовательности Af_n , и только в этом предположении утверждается,

⁹⁵) Теория неограниченных эрмитовых операторов, на которую мы в дальнейшем будем ссылаться (в дополнение к гильбертовой теории ограниченных операторов), была развита автором (см. ссылку в прим.⁷⁸), стр. 91. Независимо к подобным результатам пришел M. Stone, Proc. Nat. Acad. Sci. of USA, 1929 и 1930.

что он равен Af . В требовании непрерывности, напротив, утверждается и существование f^* .

Несколько примеров. Пусть \mathfrak{H}_∞ опять будет пространством всех $f(q)$ с конечным интегралом $\int_{-\infty}^{\infty} |f(q)|^2 dq$ ($-\infty < q < \infty$).

A — оператором $q \dots$, определенным для всех $f(q)$, для которых $\int_{-\infty}^{\infty} |f(q)|^2 dq$ и $\int_{-\infty}^{\infty} q^2 |f(q)|^2 dq$ конечны, а A' — оператором $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$,

определенным для всех всюду дифференцируемых функций, для которых конечны $\int_{-\infty}^{\infty} |f(q)|^2 dq$ и $\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{h}{2\pi i} f'(q) \right|^2 dq$. Как мы знаем, оба эти оператора эрмитовы. Оператор A замкнут. В самом деле, положим $f_n \rightarrow f$, $Af_n \rightarrow f^*$, т. е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f_n(q) - f(q)|^2 dq \rightarrow 0;$$

$\int_{-\infty}^{\infty} |qf(q) - f^*(q)|^2 dq \rightarrow 0$. На основе сказанного в II.3 при доказательстве **D.** существует подпоследовательность f_{n_1}, f_{n_2}, \dots последовательности f_1, f_2, \dots , сходящаяся к пределу повсюду, за исключением q -множества меры нуль $f_{n_y}(q) \rightarrow g(q)$. Следовательно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(q) - f(q)|^2 dq = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} |qg(q) - f^*(q)|^2 dq = 0, \quad \text{т. е. всюду,}$$

кроме множества меры нуль $g(q) = f(q)$ и точно так же $qg(q) = f^*(q)$, следовательно, $qf(q) = f^*(q)$, т. е. $f^*(q)$ и $qf(q)$ не различны существенно. Но поскольку $f^*(q)$ принадлежит, по предположению, к \mathfrak{H}_∞ , то $qf(q)$ принадлежит к \mathfrak{H}_∞ также. Соответственно $Af(q)$ имеет смысл и равно $qf(q) = f^*(q)$. Напротив, оператор A' не замкнут.

Действительно, положим $f_n(q) = e^{-\sqrt{q^2 + \frac{1}{n}}}$, $f(q) = e^{-|q|}$. Очевидно, все Af_n имеют смысл, но Af не определено (f не имеет производной в точке $q = 0$). Тем не менее, в чем легко непосредственно убедиться, $f_n \rightarrow f$, $Af_n \rightarrow f^*$, если положить $f^*(q) = -\operatorname{sgn}(q) e^{-|q|}$ ($\operatorname{sgn}(q) = -1, 0, +1$ соответственно для $q <, =, > 0$).

Покажем теперь, что в отличие от непрерывности замкнутость — это свойство, которое без особого труда может быть достигнуто для всех эрмитовых операторов. Это достигается при помощи процесса продолжения, т. е. путем того, что мы оставляем оператор неизменным во всех точках \mathfrak{H}_∞ , где он был определен, но дополним-

тельно определяем его в некоторых точках, где он до того определен не был.

В самом деле, пусть A — некоторый произвольный эрмитов оператор. Мы определим оператор \tilde{A} таким образом: \tilde{Af} имеет смысл, если существует последовательность f_1, f_2, \dots со всеми имеющими смысл Af_n и при том такая, что f есть предел f_n и Af_n также обладает пределом f^* . Тогда $\tilde{Af} = f^*$. Такое определение приемлемо, однако, только в том случае, если оно однозначно, т. е. если из $f_n \rightarrow f, g_n \rightarrow f, Af_n \rightarrow f^*, Ag_n \rightarrow g^*$ следует, что $f^* = g^*$. Действительно, если Ag имеет смысл, то

$$(f^*, g) = \lim(Af_n, g) = \lim(f_n, Ag) = (f, Ag),$$

$$(g^*, g) = \lim(Ag_n, g) = \lim(g_n, Ag) = (f, Ag),$$

и, следовательно, $(f^*, g) = (g^*, g)$. Но эти g всюду плотны и, значит, $f^* = g^*$, т. е. мы определили \tilde{A} корректно. Это \tilde{A} есть продолжение A , т. е. повсюду, где Af определено, определено и \tilde{Af} , равное Af : достаточно положить все $f_n = f$ и $f^* = Af$. Из линейности и эрмитовости оператора A те же свойства следуют для \tilde{A} (по непрерывности). Наконец, \tilde{A} также и замкнут. Действительно, пусть все \tilde{Af}_n имеют смысл, $f_n \rightarrow f, \tilde{Af}_n \rightarrow f^*$. Тогда существуют последовательности $f_{n,1}, f_{n,2}, \dots$ с определенными $Af_{n,m}, f_{nm} \rightarrow f_n, Af_{n,m} \rightarrow f_n^*$ и $\tilde{Af}_n = f_n$. Для каждого n существует N_n такое, что при $m \geq N_n$, $\|f_{n,m} - f_n\| \leq \frac{1}{n}$, $\|Af_{n,m} - f_n^*\| \leq \frac{1}{n}$. Следовательно, $f_{n,N_n} - f_n \rightarrow 0, Af_{n,N_n} - \tilde{Af}_n \rightarrow 0$ и, значит, $f_{n,N_n} - f \rightarrow 0, Af_{n,N_n} - f^* \rightarrow 0$. Отсюда следует, по определению, что $\tilde{Af} = f^*$.

(Следует обратить внимание на то, что не непрерывный оператор никогда не может быть сделан непрерывным с помощью продолжения.)

Если оператор B является продолжением оператора A , т. е. если, коль скоро Af имеет смысл, Bf также имеет смысл и равно Af , то мы будем записывать это как $B \subset A$ или $A \supset B$. Мы доказали уже, что $A \supset \tilde{A}$ и что \tilde{A} эрмитов и замкнут. Очевидно без дальнейшего обсуждения, что для каждого замкнутого B такого, что $A \supset B$, должно выполняться также $\tilde{A} \supset B$. Соответственно \tilde{A} есть наименьшее замкнутое продолжение A . (Значит, $\tilde{\tilde{A}} = \tilde{A}$.)

Тесная связь между A и \tilde{A} подсказывает нам, что A может быть во всех рассуждениях заменено на \tilde{A} , поскольку \tilde{A} естественным образом расширяет область определения A или, если посмотреть с другой стороны, A без всякой необходимости ограничивает

область \tilde{A} . Сделаем так, т. е. заменим везде A на \tilde{A} , тогда мы сможем считать, что все эрмитовы операторы замкнуты.

Рассмотрим опять непрерывный эрмитов оператор A . В этом случае замкнутость эквивалентна замкнутости его области определения. Далее условие $\|Af\| < C \cdot \|f\|$, характеризующее непрерывность, очевидным образом выполняется также и для \tilde{A} . Следовательно, \tilde{A} также непрерывен и, поскольку область определения \tilde{A} таким образом замкнута, и, вместе с тем, всюду плотна, она должна совпадать с \mathfrak{E}_{∞} . Значит, \tilde{A} имеет смысл повсюду и тем самым каждый замкнутый и непрерывный оператор также повсюду определен. Обратное утверждение тоже верно: Если замкнутый оператор всюду имеет смысл, то он непрерывен (это теорема Тörlitz'a⁹⁶⁾, в доказательство которой мы не можем здесь углубляться).

Результат, полученный Гильбертом, состоит в следующем: Каждому непрерывному оператору соответствует одно и только одно разложение единицы. (См. прим.⁶⁴⁾, стр. 78.) Поскольку непрерывный

оператор всегда имеет смысл, то интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)\|^2$ всегда

должен быть конечен; поскольку, к тому же, он равен $\|Af\|^2$ и, следовательно, по $St. \leqq C^2 \cdot \|f\|^2$, мы имеем

$$0 \geq \|Af\|^2 - C^2 \cdot \|f\|^2 =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 - C^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\|E(\lambda)f\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda^2 - C^2) d\|E(\lambda)f\|^2.$$

Положим теперь $f = E(-C - \varepsilon)g$. Тогда $E(\lambda)f = E(\text{Min}(\lambda, -C - \varepsilon))g$ и, следовательно, для $\lambda \geq -C - \varepsilon$ это константа, так что нам

остается рассмотреть только $\int_{-\infty}^{-C - \varepsilon}$. В этом случае $E(\lambda)f = E(\lambda)g$ и

$$\lambda^2 - C^2 \geq (C + \varepsilon)^2 - C^2 > 2C\varepsilon, \text{ так что}$$

$$0 \geq 2C\varepsilon \int_{-\infty}^{-C - \varepsilon} d\|E(\lambda)g\|^2 = 2C\varepsilon \|E(-C - \varepsilon)g\|^2,$$

$$\|E(-C - \varepsilon)g\|^2 \leq 0, \quad E(-C - \varepsilon)g = 0.$$

Таким же путем при $f = g - E(C + \varepsilon)g$ может быть показано, что

$$g - E(C + \varepsilon)g = 0.$$

⁹⁶⁾ Math. Ann. Bd. 69 (1911).

Тем самым, для всех $\epsilon > 0$ будет $E(-C - \epsilon) = 0$, $E(C + \epsilon) = 1$, т. е. $E(\lambda) = 0$ при $\lambda < -C$ и $E(\lambda) = 1$ при $\lambda > C$. (В силу S_2 . последнее выполняется еще и для $\lambda = C$.) Итак, $E(\lambda)$ изменяется лишь в интервале $-C \leq \lambda \leq C$.

Обратно, из этого как следствие вытекает непрерывность A :

$$\begin{aligned} \|Af\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 = \int_{-C}^C \lambda^2 d\|E(\lambda)f\|^2 \leq C^2 \cdot \int_{-C}^C d\|E(\lambda)f\|^2 = \\ &= C^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\|E(\lambda)f\|^2 = C^2 \cdot \|f\|^2, \quad \|Af\| \leq C \cdot \|f\| \end{aligned}$$

Мы видим таким образом, что все непрерывные A исчерпываются разложениями единицы, изменяющимися лишь в конечных интервалах переменной λ . Как же обстоит дело для остальных не непрерывных эрмитовых операторов? Ведь можно еще использовать все разложения единицы, изменяющиеся для сколь угодно больших λ , исчерпают ли они все упомянутые эрмитовы операторы?

Необходимо прежде всего правильно оценить то обстоятельство, что эти операторы могут иметь смысл не повсюду.

Само по себе мысленно, что какой-либо эрмитов оператор может оказаться не определенным в тех точках гильбертова пространства, в которых это можно было бы сделать разумным образом. Так, например, наш оператор $A' = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ был не определен для $f(q) = e^{-|q|}$, и мы могли бы даже ограничить $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ применением только к аналитическим функциям (в интервале $-\infty < q < \infty$, q вещественно)⁹⁷⁾ и так далее.

⁹⁷⁾ Даже $f(q)$, аналитические в $-\infty < q < \infty$ (с конечными $\int_{-\infty}^{\infty} |f(q)|^2 dq$, $\int_{-\infty}^{\infty} |f'(q)|^2 dq, \dots$), всюду плотны в \mathfrak{H}_{∞} . Действительно, по II. 3, *D*. линейные комбинации функций

$$f_{a, b}(q) = \begin{cases} 1 & \text{для } a < q < b, \\ 0 & \text{в остальной области} \end{cases}$$

расположены всюду плотно. Следовательно, достаточно аппроксимировать их произвольно близко при помощи упомянутых выше $f(q)$. В самом деле, например,

$$f_{a, b}^{(s)}(q) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{(x-a)(x-b)}{\epsilon} = \frac{1}{e^{\frac{2(x-a)(x-b)}{\epsilon}} + 1}$$

будет функцией искомого типа и сходится к $f_{a, b}(q)$ при $\epsilon \rightarrow +0$.

Область определения уже застрахована от слишком произвольных сокращений требованием того, чтобы она была всюду плотной. Далее, мы можем ограничиться замкнутыми операторами. Все же еще и это не достаточно эффективно. Действительно, возьмем, например, оператор $A' = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}$ в интервале $0 \leqq q \leqq 1$ и предположим, следовательно, что $f(q)$ всюду дифференцируемы, а интегралы $\int_0^1 |f(q)|^2 dq$ и $\int_0^1 |f'(q)|^2 dq$ конечны. Чтобы A' оказался эрмитовым, надо еще наложить граничное условие $f(0) : f(1) = e^{-i\alpha}$ ($0 \leqq \alpha < 2\pi$); пусть множество этих $f(q)$ называется \mathfrak{A}_α , а сам A' называется A'_α . Рассмотрим далее еще граничное условие $f(1) = f(0) = 0$ и назовем соответствующее множество \mathfrak{A}^0 , а соответственно ограниченный оператор A' назовем A'_0 . Все \tilde{A}'_α суть продолжения \tilde{A}'_0 (который эрмитов, и область определения которого всюду плотна⁹⁸⁾) и, следовательно, и замкнутые \tilde{A}'_α также суть продолжения \tilde{A}'_0 . Все они отличны один от другого и от \tilde{A}'_0 . Действительно, явно унитарная операция $f(q) \rightarrow e^{i\beta q} f(q)$ преобразует A' в $A' + \frac{h\beta}{2\pi} 1$ и \mathfrak{A}_α в $\mathfrak{A}_{\alpha+\beta}$, \mathfrak{A}_0 в \mathfrak{A}_0 ; и, значит, A'_α в $A'_{\alpha-\beta} + \frac{h\beta}{2\pi} 1$, A'_0 в $A'_0 + \frac{h\beta}{2\pi} 1$; и, значит, \tilde{A}'_α в $\tilde{A}'_{\alpha-\beta} + \frac{h\beta}{2\pi} 1$ и \tilde{A}'_0 в $\tilde{A}'_0 + \frac{h\beta}{2\pi} 1$. То есть из $\tilde{A}'_\alpha = \tilde{A}'_0$ следовало бы, что $\tilde{A}'_{\alpha-\beta} = \tilde{A}'_0$, т. е. все \tilde{A}'_γ были бы равны между собой. Тем самым достаточно показать, что $\tilde{A}'_\alpha \neq \tilde{A}'_\gamma$ при $\alpha \neq \gamma$, а это заведомо так, если A'_α , A'_γ не имеют общего эрмитова продолжения, т. е. если A' не эрмитов в соединении \mathfrak{A}_α и \mathfrak{A}_γ . Поскольку $e^{i\alpha q}$ принадлежит к \mathfrak{A}_α , $e^{i\gamma q}$ принадлежит к \mathfrak{A}_γ и

$$(A' e^{i\alpha q}, e^{i\gamma q}) - (e^{i\alpha q}, A' e^{i\gamma q}) =$$

$$= i\alpha \int_0^1 e^{i(\alpha-\gamma)q} dq - i\gamma \int_0^1 e^{i(\alpha-\gamma)q} dq =$$

$$= \int_0^1 e^{i(\alpha-\gamma)q} i(\alpha - \gamma) dq = e^{i(\alpha-\gamma)} - 1 \neq 0,$$

⁹⁸⁾ Опять достаточно аппроксимировать функции $f_{ab}(q)$, $0 \leqq a < b \leqq 1$ при помощи функций из \mathfrak{A}^0 . Например, для этого можно воспользоваться функциями

$$f_{a,b}^{(\epsilon)}(q) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{th} \left\{ \frac{1}{\epsilon} \frac{(x-a-\epsilon)(x-b+\epsilon)}{x(1-x)} \right\}$$

с ϵ , стремящимся к $+0$.

то именно этот случай имеет место. Это означает, что замкнутый эрмитов оператор \tilde{A}'_0 определен в слишком ограниченной области, так как существует его истинное (т. е. отличное от него самого) замкнутое эрмитово продолжение \tilde{A}'_α и при этом процесс расширения бесконечно многозначен, так как можно воспользоваться каждым из \tilde{A}'_α и любой из них будет порождать иное решение проблемы собственных значений. (Каждый раз мы будем иметь чисто дискретный спектр, но он зависит от α : набор $h\left(\frac{\alpha}{2\pi} + k\right)$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

С другой стороны, с помощью самого оператора \tilde{A}'_0 мы вообще не можем ждать никакого разумного решения проблемы собственных значений. В самом деле, мы еще покажем дальше в этом разделе, что эрмитов оператор, принадлежащий какому-либо разложению единицы (т. е. такой, для которого проблема собственных значений разрешима), не имеет ни одного истинного продолжения. Оператор, не имеющий никакого истинного продолжения, — иными словами, уже определенный во всех тех точках, где его можно было бы определить разумным образом, т. е. не нарушая его эрмитова характера, — мы назовем максимальным. Значит, по сказанному, разложение единицы может соответствовать только лишь максимальным операторам.

С другой стороны, имеет место следующая теорема: Каждый эрмитов оператор может быть продолжен до максимального эрмитова оператора. (И притом каждый не максимальный, но замкнутый оператор всегда бесчисленными различными способами. Таким образом, единственный однозначный шаг процесса продолжения — это „замыкание“ $A \rightarrow \tilde{A}$. Ср. прим. 95), стр. 95.) Поэтому наиболее приятным решением проблемы, на которое мы вправе надеяться, было бы: Каждому максимальному эрмитову оператору принадлежит одно и только одно разбиение единицы. (Каждый замкнутый непрерывный оператор определен повсюду в \mathfrak{H}_∞ и является, следовательно, максимальным.)

Таким образом, следует ответить на вопросы: Всегда ли обладает максимальный эрмитов оператор разложением единицы? Может ли случиться так, что несколько разложений будет отвечать одному и тому же оператору?

Мы начнем с того, что сформулируем ответы: Данному максимальному эрмитову оператору не принадлежит ни одного или принадлежит точно одно разложение единицы, причем первый случай реально встречается, т. е. проблема собственных значений наверняка однозначна, но при некоторых условиях неразрешима. Тем не менее последний случай надо рассматривать в известном смысле как

исключение. Мы наметим в основных чертах метод, приводящий к этому результату.

Если мы применим рациональную функцию $f(\lambda)$ к (бесконечно-мерной и диагонализуемой с помощью унитарного преобразования) матрице A , то собственные векторы матрицы A сохранятся, а собственные значения $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ перейдут в $f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)$ ⁹⁹⁾. Если теперь $f(\lambda)$ отображает вещественную ось (в комплексной плоскости) на окружность единичного радиуса, то матрицы с лишь вещественными собственными значениями перейдут в матрицы с собственными значениями, равными по модулю единице, т. е. эрмитовы матрицы перейдут в унитарные¹⁰⁰⁾. Этим свойством обладает, например, $f(\lambda) = \frac{\lambda - i}{\lambda + i}$. Соответствующее преобразование

$$U = \frac{A - iI}{A + iI}, \quad A = -i \frac{U + 1}{U - 1}$$

называется преобразованием Кэли (Cayley). Мы попробуем это преобразование и для эрмитовых операторов в \mathfrak{H}_∞ , т. е. мы определим следующий оператор $U : Uf$ имеет смысл тогда и только тогда, когда $f = (A + iI)\varphi = A\varphi + i\varphi$ и именно тогда $Uf = (A - iI)\varphi = A\varphi - i\varphi$. Мы рассчитываем, что это определение даст нам однозначное Uf для всех f и что U будет унитарным. Доказательство в \mathfrak{H}_n естественно не является более аргументом, поскольку оно предполагает возможность преобразования к диагональной форме, т. е. разрешимость проблемы собственных значений и даже с чисто дискретным спектром. Но если наши утверждения относительно свойств U правильны, то мы сможем разрешить проблему собственных значений A следующим путем.

Для U проблема собственных значений решается таким образом — существует единственное семейство проекционных операторов

⁹⁹⁾ Поскольку мы можем представить себе функцию $f(\lambda)$ аппроксимированной полиномами, то достаточно рассмотреть полиномы, или их основу, т. е. степени $f(\lambda) = \lambda^s$ ($s = 0, 1, 2, \dots$). Поскольку унитарное преобразование здесь не играет роли, мы можем считать A диагональной матрицей; так как диагональные элементы суть собственные значения, то они суть $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Мы должны, следовательно, показать, что и A^s диагональна и что ее диагональные элементы суть $\lambda_1^s, \lambda_2^s, \dots, \lambda_n^s$, но это очевидно.

¹⁰⁰⁾ Чтобы убедиться в том, что эти свойства характерны для эрмитова или соответственно унитарного характера матрицы, опять достаточно доказать это для диагональных матриц. По отношению к диагональной матрице A с элементами $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ диагональная матрица A^* с элементами $\bar{\lambda}_1, \dots, \bar{\lambda}_n$ есть сопряженная транспонированная; значит, $A = A^*$ утверждает, что $\lambda_1 = \bar{\lambda}_1, \dots, \lambda_n = \bar{\lambda}_n$, т. е. что $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ вещественны. А $AA^* = A^*A = 1$ утверждает, что $\lambda_1\bar{\lambda}_1 = 1, \dots, \lambda_n\bar{\lambda}_n = 1$, т. е. что $|\lambda_1| = \dots = |\lambda_n| = 1$.

$E(\sigma)$ ($0 \leq \sigma \leq 1$), удовлетворяющее следующим условиям:

$\bar{S_1}$. $E(0) = 0$, $E(1) = 1$ и при $\sigma \rightarrow \sigma_0$, $\sigma \geq \sigma_0$ имеет место $E(\sigma)f \rightarrow E(\sigma_0)f$.

$\bar{S_2}$. Из $\sigma' \leq \sigma''$ следует, что $E(\sigma') \leq E(\sigma'')$.

$\bar{S_3}$. Всегда выполняется $(Uf, g) = \int_0^1 e^{2\pi i \sigma} d(E(\sigma)f, g)$

(Uf определено повсюду и интеграл в правой части всегда абсолютно сходится¹⁰¹⁾).

Это доказывается в рамках и средствами теории Гильберта, что оказывается возможным в силу того, что унитарный оператор U всегда непрерывен (см. указанную в прим.⁶⁴⁾ стр. 78 и в прим.¹⁰¹⁾ литературу). Аналогия с формулировкой $\bar{S_1} - \bar{S_3}$ для эрмитовых операторов бросается в глаза. Вся разница сводится к тому, что под интегралом вместо вещественного λ , пробегающего интервал $-\infty < \lambda < +\infty$, оказывается комплексная величина $e^{2\pi i \sigma}$, пробегающая окружность единичного радиуса (уже в \mathfrak{X}_n соотношение эрмитовость — унитарность было глубоко аналогично соотношению вещественная ось — контур единичного круга; ср. прим.¹⁰⁰⁾ на стр. 118), и что описание области определения оператора в $\bar{S_3}$ здесь оказывается излишним, поскольку унитарные операторы определены повсюду.

В силу $\bar{S_1}$, $E(\sigma)f \rightarrow E(0)f = 0$ при $\sigma \geq 0$ (поскольку $\sigma \geq 0$ по самой своей природе!), в то время как при $\sigma \rightarrow 1$ (так как $\sigma \leq 1$) не обязательно должно быть $E(\sigma)f \rightarrow E(1)f = f$. Если это в действительности не выполняется, то $E(\sigma)$ терпит разрыв как раз в точке $\sigma = 1$. Но поскольку существует проекционный оператор E' такой, что для $\sigma \rightarrow 1$, $\sigma < 1$, $E(\sigma)f \rightarrow E'f$ (ср. теорему 17. в II. 4, а также прим.⁷⁹⁾ на стр. 94), это означает, что $E' \neq E(1) = 1$, т. е. что $E'f = 0$ также имеет решения $f \neq 0$. Поскольку $E(\sigma) \leq E'$,

¹⁰¹⁾ Доказательство этих фактов смотри в работе автора, цитированной в прим.⁷⁸⁾, стр. 91, а также у A. Wintner'a: Math. Z. Bd 30 (1929).

Абсолютная сходимость всех интегралов $\int_0^1 f(\sigma) d(E(\sigma)f, g)$ с ограниченными $f(\sigma)$ доказывается так: Достаточно рассмотреть вещественную часть $\operatorname{Re}(E(\sigma)f, g)$, поскольку замена f, g на if, g превращает ее в $\operatorname{Im}(E(\sigma)f, g)$. Но так как $\operatorname{Re}(E(\sigma)f, g) = \left(E(\sigma) \frac{f+g}{2}, \frac{f+g}{2} \right) - \left(E(\sigma) \frac{f-g}{2}, \frac{f-g}{2} \right)$, то достаточно исследовать только $(E(\sigma)f, f)$. Но в интеграле $\int_0^1 f(\sigma) d(E(\sigma)f, f)$ подынтегральное выражение ограничено, а функция σ под знаком дифференциала монотонна. Таким образом, утверждение очевидно,

то из $E'f = 0$ следует, что $E(\sigma)f = 0$ для всех $\sigma < 1$. Обратно, по определению E' первое следует из второго. Если все $E(\sigma)f = 0$ ($\sigma < 1$), то мы убеждаемся совершенно так, как в начале раздела II. 8, что $(Uf, g) = (f, g)$ для всех g и, следовательно, $Uf = f$. Напротив, если $Uf = f$, то

$$\int_0^1 e^{2\pi i \sigma} d(E(\sigma)f, f) = (Uf, f) = (f, f),$$

$$\operatorname{Re} \int_0^1 e^{2\pi i \sigma} d(E(\sigma)f, f) = (f, f), \quad \int_0^1 (1 - \cos(2\pi\sigma)) d(E(\sigma)f, f) = 0,$$

$$\int_0^1 (1 - \cos(2\pi\sigma)) d(\|E(\sigma)f\|^2) = 0.$$

Отсюда, совершенно так же, как в начале II. 8, мы получаем $E(\sigma)f = 0$ для всех $\sigma < 1$ (и > 0 , но это выполняется и для $\sigma = 0$). Тем самым разрыв непрерывности $E(\sigma)$ при $\sigma = 1$ означает, что $Uf = f$ разрешимо при $f \neq 0$.

Для наших кэли-образов U будет теперь $\varphi = Af + if$, $U\varphi = Af - if$ и из $U\varphi = \varphi$ таким образом следует, что $f = 0$, $\varphi = 0$. При этом $E(\sigma)f \rightarrow f$ должно выполняться также и для $\sigma \rightarrow 1$. Вследствие этого с помощью отображения

$$\lambda = -i \frac{e^{2\pi i \sigma} + 1}{e^{2\pi i \sigma} - 1} = -\operatorname{ctg} \pi\sigma, \quad \sigma = -\frac{1}{\pi} \operatorname{arcctg} \lambda$$

(которое отображает друг на друга однозначно и монотонно интервалы $0 < \sigma < 1$ и $-\infty < \lambda < +\infty$) мы можем получить из $E(\sigma)$ разложение единицы для $F(\lambda)$ в смысле $\overline{S_1}, \overline{S_2}$.

$$(C.) \quad F(\lambda) = E\left(-\frac{1}{\pi} \operatorname{arcctg} \lambda\right), \quad E = F(-\operatorname{ctg} \pi\sigma).$$

Мы хотим теперь показать, что $F(\lambda)$ удовлетворяет условию $\overline{S_3}$ с оператором A тогда и только тогда, когда $E(\sigma)$ удовлетворяет условию $\overline{S_3}$ с оператором U и таким образом свести вопрос о существовании и единственности решения проблемы собственных значений эрмитова (возможно не непрерывного) оператора A к тому же вопросу в отношении унитарного оператора U . Последняя же задача, как было описано, в желаемом смысле решается.

Итак, пусть A — эрмитов оператор и U — его кэли-образ. Для начала рассмотрим случай, когда U унитарен, так что для него существует $E(\sigma)$, удовлетворяющая условиям $\overline{S_1}, \overline{S_2}$ так же, как и $\overline{S_3}$. Образуем теперь $F(\lambda)$ согласно (C.), тогда для него выполн-

няются $\overline{S_1}, \overline{S_2}$. Если Af имеет смысл, то $Af + if = \varphi, Af - if = U\varphi$ и, следовательно,

$$f = \frac{\varphi - U\varphi}{2i}, \quad Af = \frac{\varphi + U\varphi}{2}.$$

Подсчитаем, в несколько символическом смысле¹⁰²⁾,

$$f = \frac{1}{2i} (\varphi - U\varphi) = \frac{1}{2i} \left(\varphi - \int_0^1 e^{2\pi i \sigma} dE(\sigma) \varphi \right) = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma}}{2i} dE(\sigma) \varphi,$$

$$\begin{aligned} E(\sigma) f &= \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\sigma) E(\sigma') \varphi) = \\ &= \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\min(\sigma, \sigma')) \varphi) = \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} dE(\sigma') \varphi, \end{aligned}$$

$$\|E(\sigma) f\|^2 = (E(\sigma) f, f) = \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\sigma') \varphi, f) =$$

$$= \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(\overline{E(\sigma') f}, \varphi) =$$

$$= \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d \left(\int_0^{\sigma'} \frac{1 - e^{-2\pi i \sigma''}}{-2i} d(\overline{E(\sigma'') \varphi}, \varphi) \right) =$$

$$= \int_0^\sigma \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} \frac{1 - e^{-2\pi i \sigma'}}{-2i} d(\overline{E(\sigma') \varphi}, \varphi) =$$

$$= \int_0^\sigma \frac{(1 - e^{2\pi i \sigma'}) (1 - e^{-2\pi i \sigma'})}{4} d(\|E(\sigma') \varphi\|^2) = \int_0^\sigma \sin^2(\pi \sigma') d(\|E(\sigma') \varphi\|^2).$$

¹⁰²⁾ Мы применяем здесь интегралы Стильтьеса к элементам \mathfrak{H}_∞ вместо чисел. Так что все наши соотношения должны пониматься в том смысле, что мы выбираем некоторое фиксированное g из \mathfrak{H}_∞ и вместо каждого элемента \mathfrak{H}_∞ , появляющегося в вычислениях, подставляем его внутреннее произведение с этим g . Соотношения выполняются для любых g . В противоположность операторным интегралам Стильтьеса в II. 7 это лишь на-
половину символический процесс; вместо одного g из \mathfrak{H}_∞ мы должны были бы
там выбирать f, g — два произвольных элемента из \mathfrak{H}_∞ и вместо (\dots, g)
должны были образовывать $(\dots f, g)$ (точки стоят вместо операторов).

Следовательно, входящий в \bar{S}_3 . интеграл есть

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|F(\lambda) f\|^2 &= \int_0^1 \operatorname{ctg}^2(\pi\sigma) d\|E(\sigma) f\|^2 = \\ &= \int_0^1 \operatorname{ctg}^2(\pi\sigma) d\left(\int_0^\sigma \sin^2(\pi\sigma') d\|E(\sigma') \varphi\|^2\right) = \\ &= \int_0^1 \operatorname{ctg}^2(\pi\sigma) \cdot \sin^2(\pi\sigma') d\|E(\sigma') \varphi\|^2 = \\ &= \int_0^1 \cos^2(\pi\sigma) d\|E(\sigma) \varphi\|^2. \end{aligned}$$

Но поскольку он абсолютно мажорируется интегралом $\int_0^1 d\|E(\sigma) \varphi\|^2 = \|\varphi\|^2$, то он конечен. Далее

$$\begin{aligned} Af &= \frac{1}{2}(\varphi + U\varphi) = \frac{1}{2}\left(\varphi + \int_0^1 e^{2\pi i\sigma} dE(\sigma)\varphi\right) = \\ &= \int_0^1 \frac{1+e^{2\pi i\sigma}}{2} dE(\sigma)\varphi = \int_0^1 -i \frac{e^{2\pi i\sigma}+1}{e^{2\pi i\sigma}-1} \frac{1-e^{2\pi i\sigma}}{2i} dE(\sigma)\varphi = \\ &= \int_0^1 -\operatorname{ctg}(\pi\sigma) d\left(\int_0^\sigma \frac{1-e^{2\pi i\sigma'}}{2i} dE(\sigma')\varphi\right) = \\ &= \int_0^1 -\operatorname{ctg}(\pi\sigma) dE(\sigma)f = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dF(\lambda)f, \end{aligned}$$

т. е. окончательное соотношение из \bar{S}_3 . также выполнено. Соответственно A есть во всяком случае продолжение того оператора, который, по \bar{S}_3 ., принадлежит $F(\lambda)$, но, поскольку (как мы покажем) он максимальен, то A должен с ним совпадать¹⁰³⁾.

¹⁰³⁾ Здесь содержится неявное допущение, что для каждого данного разложения единицы $F(\lambda)$ такой оператор в действительности существует. Это значит, что предполагается, что при конечном $\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|F(\lambda) f\|^2$ может быть

Рассмотрим теперь обратное утверждение. Пусть $F(\lambda)$ принадлежит A в смысле $\bar{S}_1 - \bar{S}_3$. Что можно сказать об U ? Определим сперва $E(\sigma)$ при помощи (C.). Оно, следовательно, будет удовлетворять \bar{S}_1, \bar{S}_2 . Пускай φ произвольно. Напишем (опять символически)

$$f = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\lambda + i} dF(\lambda) \varphi = \int_0^1 \frac{1}{-\operatorname{ctg}(\pi\sigma) + i} dE(\sigma) \varphi = \\ = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma}}{2i} dE(\sigma) \varphi$$

(так как $\frac{1}{\lambda + i}$ или $\frac{1 - e^{2\pi i \sigma}}{2i}$ ограничена, то все сходится). Но тогда

$$F(\lambda) f = E(\sigma) f = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\sigma) E(\sigma') \varphi) = \\ = \int_0^1 \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} d(E(\min(\sigma, \sigma')) \varphi) = \int_0^{\sigma} \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} dE(\sigma') \varphi,$$

$$Af = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dF(\lambda) f = \int_0^1 -\operatorname{ctg}(\pi\sigma) dE(\sigma) f = \\ = \int_0^1 -i \frac{e^{2\pi i \sigma} + 1}{e^{2\pi i \sigma} - 1} d \left(\int_0^{\sigma} \frac{1 - e^{2\pi i \sigma'}}{2i} dE(\sigma') \varphi \right) = \\ = \int_0^1 -i \frac{e^{2\pi i \sigma} + 1}{e^{2\pi i \sigma} - 1} \frac{1 - e^{2\pi i \sigma}}{2i} dE(\sigma) \varphi = \int_0^1 \frac{1 + e^{2\pi i \sigma}}{2} dE(\sigma) \varphi,$$

и, значит,

$$Af + if = \int_0^1 dE(\sigma) \varphi = \varphi; \quad Af - if = \int_0^1 e^{2\pi i \sigma} dE(\sigma) \varphi.$$

найдено такое f^* , что для всех g $(f^*, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(F(\lambda) f, g)$ и что f с этим свойством повсюду плотны. (Эрмитовость оператора, определенного таким образом, следует тогда из \bar{S}_3 : нужно поменять f и g в последнем выражении и взять комплексно-сопряженное.) Оба эти предложения доказываются в статье, цитированной в прим. 78), стр. 91).

Тем самым $U\varphi$ определено и равно $\int_0^1 e^{2\pi i \sigma} dE(\sigma) \varphi$. Поскольку φ было произвольно, то U имеет смысл всюду. Если мы образуем внутреннее произведение с произвольным ψ и возьмем комплексно-сопряженное, то убедимся, что $U^*\psi = \int_0^1 e^{-2\pi i \sigma} dE(\sigma) \psi$. Выкладка в конце II. 8 показывает тогда, что $UU^* = U^*U = 1$, т. е. что U унитарен и принадлежит $E(\sigma)$.

Итак, разрешимость проблемы собственных значений оператора A эквивалентна унитарному характеру его кэли-образа U . Его единственность этим установлена и таким образом последний остающийся вопрос это — всегда ли мы можем образовать U , и если да, то когда он будет унитарен? Чтобы ответить на эти вопросы, мы опять начнем с замкнутого эрмитова оператора A .

Мы определили U таким образом: Если $\varphi = Af + if$ и только тогда $U\varphi$ имеет смысл и равно $Af - if$. Но сначала следует показать, что это определение вообще приемлемо, т. е. что для одного φ не может существовать нескольких f . Или, иными словами, что из $Af + if = Ag + ig$ следует, что $f = g$, или, в силу линейности A , что из $Af + if = 0$ следует, что $f = 0$.

Мы имеем

$$\begin{aligned}\|Af \pm if\|^2 &= (Af \pm if, Af \pm if) = \\ &= (Af, Af) \pm (Af, if) \pm (if, Af) + (if, if) = \\ &= \|Af\|^2 \mp i(Af, f) \pm i(f, Af) + \|f\|^2 = \|Af\|^2 + \|f\|^2.\end{aligned}$$

Итак, из $Af + if = 0$ вытекает $\|f\|^2 \leq \|Af + if\|^2 = 0$, $f = 0$, и, значит, наш способ определения оправдан. Во-вторых, $\|Af - if\| = \|Af + if\|$, т. е. $\|U\varphi\| = \|\varphi\|$. Но, значит, U , коль скоро он определен, непрерывен. Далее, пусть \mathfrak{E} — область определения U (т. е. множество всех $Af + if$) и \mathfrak{F} — область изменения U (множество всех Uf , т. е. множество всех $Af - if$). Так как A и U линейны, то \mathfrak{E} и \mathfrak{F} суть линейные многообразия, но они еще и замкнуты. Действительно, пусть φ — предельная точка \mathfrak{E} или \mathfrak{F} соответственно. Тогда существует последовательность $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ из \mathfrak{E} или из \mathfrak{F} соответственно, сходящаяся к φ : $\varphi_m \rightarrow \varphi$. Значит, $\varphi_n = Af_n \pm if_n$. Поскольку φ_n сходится, они удовлетворяют критерию сходимости Коши (ср. **D.** из II. 1), и поскольку

$$\|f_m - f_n\| \leq \|A(f_m - f_n) \pm i(f_m - f_n)\| = \|\varphi_m - \varphi_n\|,$$

то и f_n , безусловно, удовлетворяют этому критерию, но так как $\|Af_m - Af_n\| = \|A(f_m - f_n)\| \leq \|A(f_m - f_n) \pm i(f_m - f_n)\| = \|\varphi_m - \varphi_n\|$,

то и Af_n также удовлетворяют критерию. Следовательно, f_1, f_2, \dots и Af_1, Af_2, \dots (по D , из II. 1) тоже сходятся: $f_m \rightarrow f$, $Af_m \rightarrow f^*$. Поскольку A — замкнутый оператор, Af определено и равно f^* . Имеем, следовательно:

$$\varphi_n = Af_n \pm if_n \rightarrow f^* \pm if = Af \pm if, \quad \varphi_n \rightarrow \varphi.$$

Но, значит, $\varphi = Af \pm if$, т. е. φ также принадлежит к \mathfrak{E} или к \mathfrak{F} соответственно.

Итак, U определен в замкнутом линейном многообразии \mathfrak{E} и отображает его на замкнутое линейное многообразие \mathfrak{F} . Оператор U линеен и, так как $\|Uf - Ug\| = \|U(f - g)\| = \|f - g\|$, то оставляет все расстояния инвариантными. Мы назовем его изометрическим. Тем самым из $Uf \neq Ug$ следует, что $f \neq g$, т. е. отображение однозначно. Верно также, что $(f, g) = (Uf, Ug)$, что доказывается совершенно так же, как в конце II. 5 доказывается аналогичное соотношение для унитарных операторов. Следовательно, U оставляет также неизменными все внутренние произведения. Но унитарным U будет, конечно, тогда и только тогда, когда $\mathfrak{E} = \mathfrak{F} = \mathfrak{H}_\infty$.

Если A и B — два замкнутых эрмитовых оператора, U и V — их кэли-образы, а вышеописанными множествами будут соответственно \mathfrak{E} , \mathfrak{F} и \mathfrak{G} , \mathfrak{H} , то сразу видно, что если B есть истинное продолжение A , то и V есть истинное продолжение U . Следовательно, \mathfrak{E} есть истинная часть \mathfrak{G} , \mathfrak{F} — истинная часть \mathfrak{H} . Следовательно, $\mathfrak{E} \neq \mathfrak{H}_\infty$, $\mathfrak{F} \neq \mathfrak{H}_\infty$. Значит, U не унитарен и проблема собственных значений A неразрешима. Так мы доказали неоднократно упоминавшуюся прежде теорему: Если проблема собственных значений A разрешима, то не существует истинных продолжений A , т. е. A максимален.

Вернемся теперь к замкнутому эрмитову оператору A с его \mathfrak{E} , \mathfrak{F} и U . Если Af имеет смысл, то для $Af + if = \varphi$ $U\varphi$ тоже имеет смысл и, именно, $Af - if = U\varphi$, следовательно, $f = \frac{1}{2i}(\varphi - U\varphi)$, $Af = \frac{1}{2}(\varphi + U\varphi)$, т. е., если мы положим $\psi = \frac{1}{2i}\varphi$, то $f = \psi - U\psi$, $Af = i(\psi + U\psi)$. Наоборот, для $f = \psi - U\psi$, разумеется, определено Af ; так как поскольку $U\psi$ имеет смысл, то $\psi = Af' + if'$ (Af' определено!), $U\psi = Af' - if'$ и, следовательно, $f = \psi - U\psi = 2if'$. Область определения A есть, таким образом, множество всех $\psi - U\psi$ и, при $f = \psi - U\psi$, $Af = i(\psi + U\psi)$. Тем самым A тоже однозначно определяется по U (так же, как \mathfrak{E} и \mathfrak{F}). Одновременно мы убеждаемся, что множество $\psi - U\psi$ должно быть всюду плотно (как область определения A).

Пойдем теперь в обратном направлении, начиная с двух замкнутых линейных многообразий \mathfrak{E} , \mathfrak{F} и линейного изометрического U , отображающего \mathfrak{E} на \mathfrak{F} . Существует ли эрмитов оператор A , кэли-образом которого является этот U ? Во всяком случае для этого

необходимо, чтобы $\psi - U\psi$ были всюду плотны, так что это предполагается. Искомый оператор A определяется тогда, согласно только что сказанному, однозначно, и остается открытым лишь вопрос о том, возможно ли такое определение, будет ли этот A в действительности эрмитовым, будет ли U в действительности его кэли-образом. Первое, несомненно, справедливо, если f однозначно определяет φ (когда оно вообще существует) через соотношение $f = \varphi - U\varphi$, т. е., если $\varphi = \psi$ следует из $\varphi - U\varphi = \psi - U\psi$ или $\varphi = 0$ следует из $\varphi - U\varphi = 0$. В самом деле, положим $\varphi - U\varphi = 0$. Тогда из $g = \psi - U\psi$ следует, что

$$(\varphi, g) = (\varphi, \psi) - (\varphi, U\psi) = (U\varphi, U\psi) - (\varphi, U\psi) = (U\varphi - \varphi, U\psi) = 0,$$

и, поскольку эти g всюду плотны, то $\varphi = 0$.

Во-вторых, нам нужно доказать, что $(Af, g) = (f, Ag)$, т. е. что (Af, g) переходит в комплексно-сопряженное выражение при замене f и g . Положим $f = \varphi - U\varphi$, $g = \psi - U\psi$, тогда $Af = i(\varphi - U\varphi)$ и

$$\begin{aligned} (Af, g) &= (i(\varphi + U\varphi), \psi - U\psi) = \\ &= i(\varphi, \psi) + i(U\varphi, \psi) - i(\varphi, U\psi) - i(U\varphi, U\psi) = \\ &= i[(U\varphi, \psi) - (U\psi, \varphi)] = i(U\varphi, \psi) + i(\overline{U\psi}, \overline{\varphi}) \end{aligned}$$

и последнее выражение, очевидно, ведет себя желательным образом при переносе мест f и g , т. е. φ и ψ . Ответ на третий вопрос мы получим следующим образом. Обозначим через V кэли-образ A . Его область определения есть множество всех

$$Af + if = i(\varphi + U\varphi) + i(\varphi - U\varphi) = 2i\varphi,$$

т. е. область определения U , и в этой области

$$V(2i\varphi) = V(Af + if) = Af - if = i(\varphi + U\varphi) - i(\varphi - U\varphi) = 2iU\varphi,$$

т. е. $V\varphi = U\varphi$. Следовательно, $V = U$.

Таким образом (замкнутые) эрмитовы операторы A со всюду плотными $\varphi - U\varphi$ соответствуют нашим линейным изометрическим U одно-однозначно, если мы отнесем каждому A его кэли-образ $U^{104})$.

¹⁰⁴⁾ Чтобы проблема собственных значений A была всегда разрешима, из этого должна была бы следовать унитарность U , т. е. условие $\mathcal{E} = \mathfrak{F} = \mathfrak{H}_n$ или \mathfrak{H}_{∞} . Как мы вывели из существования не максимальных A , в \mathfrak{H}_n это не так. Наоборот, в \mathfrak{H}_n это должно выполняться, в чем легко убедиться и непосредственно: поскольку каждое линейное многообразие в \mathfrak{H}_n замкнуто, то то же будет и для многообразия всех $\varphi - U\varphi$, и, поскольку оно всюду плотно, оно равно \mathfrak{H}_n . \mathcal{E} — множество всех φ — имеет не меньшее число измерений, чем его линейное отображение — множество всех $\varphi - U\varphi$, т. е. имеет максимальное число измерений n . Последнее должно иметь место также и для \mathfrak{F} — линейного одно-однозначного изображения \mathcal{E} . Но при конечном n отсюда следует, что $\mathcal{E} = \mathfrak{F} = \mathfrak{H}_n$.

Мы можем теперь обозреть все B — эрмитовы продолжения A , поскольку все V — изометрические продолжения U можно найти без всякого труда ($\varphi - V\varphi$ автоматически повсюду плотны, так как $\varphi - U\varphi$ — подмножество предыдущего множества — всюду плотны). Чтобы оператор A был максимальным, U должен быть тоже максимальным и наоборот. Если U не максимальен, то $\mathfrak{E} \neq \mathfrak{R}_\infty$, $\mathfrak{F} \neq \mathfrak{R}_\infty$. Из этих неравенств в свою очередь следует не максимальный характер U . В самом деле, тогда $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E} = 0$, $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F} \neq 0$; поэтому мы можем выбрать некоторое φ_0 из $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E}$ и некоторое ψ_0 из $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}$ такие, что $\varphi_0 \neq 0$, $\psi_0 \neq 0$; и если мы их еще заменим на $\frac{\varphi_0}{\|\varphi_0\|}$, $\frac{\psi_0}{\|\psi_0\|}$, мы будем иметь $\|\varphi_0\| = \|\psi_0\| = 1$. Определим теперь оператор V в $[\mathfrak{E}, \varphi_0]$ так, что для $f = \varphi + a\varphi_0$ (φ из \mathfrak{E} , a — некоторое число) $Vf = U\varphi + a\psi_0$, причем V , очевидно, линеен; так как φ ортогональна к φ_0 и $U\varphi$ ортогональна к ψ_0 , то $\|f\|^2 = \|\varphi\|^2 + |a|^2$, $\|Vf\|^2 = \|U\varphi + a\psi_0\|^2 = \|U\varphi\|^2 + |a|^2$, и, значит, $\|Vf\| = \|f\|$ и V изометрический оператор. Наконец, V есть истинное продолжение U . Следовательно, максимальный характер A определяется тем, что $\mathfrak{E} = \mathfrak{R}_\infty$ или $\mathfrak{F} = \mathfrak{R}_\infty$.

Если, с другой стороны, A не максимальен, то оба замкнутых линейных многообразия $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E}$ и $\mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}$ отличны от нуля. Пусть ортонормированными системами, растягивающими эти многообразия, будут $\varphi_1, \dots, \varphi_p$ и ψ_1, \dots, ψ_q соответственно (ср. теорему 9. из II. 2); $p = 1, 2, \dots, \infty$; $q = 1, 2, \dots, \infty$; при p или q , равном ∞ , ряд φ или ψ не обрывается. Пусть $r = \text{Min}(p, q)$, тогда мы определим оператор V в $[\mathfrak{E}, \varphi_1, \dots, \varphi_r]$ следующим образом: для

$$f = \varphi + \sum_{v=1}^r a_v \varphi_v \quad (\varphi \text{ из } \mathfrak{E}; a_1, \dots, a_r \text{ — числа}), \quad Vf = U\varphi + \sum_{v=1}^r a_v \psi_v.$$

Далее легко убедиться в том, что V — линейный и изометрический оператор и что он является истинным продолжением U . Его область определения — это $[\mathfrak{E}, \varphi_1, \dots, \varphi_r]$, т. е. при $r = p$ она совпадает с $[\mathfrak{E}, \mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{E}] = \mathfrak{R}_\infty$; его область изменения — это $[\mathfrak{F}, \psi_1, \dots, \psi_r]$ и, следовательно, при $r = q$ она совпадает с $[\mathfrak{F}, \mathfrak{R}_\infty - \mathfrak{F}] = \mathfrak{R}_\infty$. Значит, одна из двух областей во всяком случае равна \mathfrak{R}_∞ . Пусть V будет кэли-образом эрмитова оператора B . В соответствии с нашим рассуждением B есть продолжение A и притом максимальное. Заметим, что φ и ψ могут быть выбраны бесконечным числом разных способов (например, мы можем заменить ψ_1 на любое $\theta\psi_1$ с $|\theta| = 1$). Соответствующая неопределенность остается и в выборе V и B .

Итак, мы до конца проанализировали проблему собственных значений и пришли к следующему выводу: если она разрешима, то она имеет лишь одно решение, однако для немаксимальных операторов она, безусловно, неразрешима. Немаксимальные операторы всегда могут быть бесконечно многими способами продолжены до максимальных (мы все время имеем в виду эрмитовы замкнутые операторы).

Но условие максимальности не есть в точности то же, что условие разрешимости проблемы собственных значений. Первое гласит, что $\mathcal{E} = \mathfrak{K}_\infty$ или $\mathfrak{F} = \mathfrak{K}_\infty$, в то время как последнее — что $\mathcal{E} = \mathfrak{K}_\infty$ и $\mathfrak{F} = \mathfrak{K}_\infty$.

Мы не собираемся подробно исследовать здесь те операторы, для которых имеет место первое условие и не имеет места второе, т. е. операторы, для которых проблема собственных значений неразрешима и поскольку (вследствие максимальности) они не имеют истинных продолжений, то это положение для них окончательно. Операторы эти характеризуются тем, что для них $\mathcal{E} = \mathfrak{K}_\infty$, $\mathfrak{F} \neq \mathfrak{K}_\infty$, или $\mathcal{E} \neq \mathfrak{K}_\infty$, $\mathfrak{F} = \mathfrak{K}_\infty$. Такие операторы существуют на самом деле и все они могут быть получены из двух простых нормальных форм, так что их можно рассматривать как исключения по сравнению с максимальными операторами с разрешимой проблемой собственных значений. Читатель может найти более подробные сведения об этом предмете в статье автора, упомянутой в прим.⁹⁵⁾ стр. 111. Во всяком случае в настоящий момент эти операторы должны быть исключены из квантовомеханического рассмотрения. Причина этого состоит в том, что разложение единицы, принадлежащее данному эрмитову оператору, столь существенно входит (как мы вскоре убедимся) во все представления квантовой механики, что просто невозможно отказаться от его существования, т. е. от разрешимости проблемы собственных значений¹⁰⁵⁾. В соответствии с этим мы будем, как правило, допускать только такие эрмитовы операторы, для которых проблема собственных значений разрешима. Поскольку это свойство является усилением максимальности, мы будем называть такие операторы гипермаксимальными¹⁰⁶⁾.

¹⁰⁵⁾ Тем не менее, как указал автор (цитировано в прим.⁷⁸⁾, стр. 91), следующий оператор является максимальным, но не гипермаксимальным: пусть \mathfrak{K}_∞ — пространство всех $f(q)$, определенных в интервале $0 \leqq q \leqq +\infty$, с конечным интегралом $\int_0^\infty |f(q)|^2 dq$; и пусть R — оператор, $\frac{d}{dq}$, определенный для всех непрерывно дифференцируемых $f(q)$ с конечным интегралом $\int_{-\infty}^\infty |f'(q)|^2 dq$ и с условием $f(0) = 0$, причем оператор, сделанный замкнутым. Он равен тогда $-\frac{2\pi}{h} A'$, если взять A' из II.8 для интервала $0, \infty$, следовательно, эрмитов. Этот R максимальен, но не гипермаксимальен. Убедиться в этом можно прямым вычислением \mathcal{E} и \mathfrak{F} .

Это замечательно потому, что $A' = \frac{h}{2\pi} R$ надлежит интерпретировать физически как оператор импульса в полупространстве, ограниченном с одной стороны стенкой $q = 0$.

¹⁰⁶⁾ Это понятие восходит к Erhard'y Schmidt'y, см. ссылку прим.⁷⁸⁾, стр. 91.

В заключение следует отметить два класса (замкнутых) эрмитовых операторов, которые в то же время непременно гипермаксимальны. Во-первых, это непрерывные операторы: они определены повсюду и, следовательно, максимальны, а поскольку, согласно Гильберту (смотри ссылку в прим. 64), стр. 78), проблема собственных значений для них всегда разрешима, они также гипермаксимальны. Во-вторых, это операторы, вещественные в какой-либо реализации \mathfrak{H}_∞ , если они максимальны. Ведь единственное различие между \mathfrak{E} и \mathfrak{F} по их определению сводилось к знаку перед i , который, если все остальное вещественно, не имеет значения. Таким образом, $\mathfrak{F} = \mathfrak{H}_\infty$ оказывается следствием $\mathfrak{E} = \mathfrak{H}_\infty$ и наоборот, т. е. гипермаксимальность следует из максимальности. Без предположения о свойстве максимальности мы, во всяком случае, можем сказать, что $\mathfrak{H}_\infty - \mathfrak{E}$ и $\mathfrak{H}_\infty - \mathfrak{F}$ имеют одинаково много (одинаковое число) измерений. Следовательно (в терминах, принятых выше при исследовании соотношений продолжения), $p = q$, и, значит, $r = p = q$ и

$$[\mathfrak{E}, \varphi_1, \dots, \varphi_r] = [\mathfrak{E}, \mathfrak{H}_\infty - \mathfrak{E}] = \mathfrak{H}_\infty,$$

$$[\mathfrak{F}, \psi_1, \dots, \psi_r] = [\mathfrak{F}, \mathfrak{H}_\infty - \mathfrak{F}] = \mathfrak{H}_\infty,$$

т. е. продолжения, полученные тогда, были гипермаксимальны. Итак, вещественные операторы всегда имеют гипермаксимальные продолжения. В литературе, указанной в прим. 95), стр. 111, показывается, что то же самое справедливо для всех дефинитных операторов.

10. Коммутирующие операторы

Два оператора R и S коммутируют согласно данному в II. 4 определению, если выполняется $RS = SR$; при этом области определения обеих сторон равенства, если только они не имеют смысла всюду, также должны совпадать. Мы ограничимся сперва эрмитовыми операторами, и притом, чтобы не возникало трудности с областями определения, такими, которые определены всюду, следовательно — непрерывными. Одновременно с R и S мы будем рассматривать и принадлежащие им разложения единицы $E(\lambda)$ и $F(\lambda)$.

Коммутативность R и S означает, что $(RSf, g) = (SRf, g)$ для всех f, g , т. е. что $(Sf, Rg) = (Rf, Sg)$. Далее, из коммутативности R с S следует и коммутативность R^n с S ($n = 0, 1, 2, \dots$), значит, и коммутативность $p(R)$ с S для всех полиномов $p(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$.

Символически

$$R = \int_{-C}^C \lambda dE(\lambda), \quad s(R) = \int_{-C}^C s(\lambda) dE(\lambda)$$

(C — постоянная, введенная в II. 9 для непрерывного оператора R , который обозначался там через A ; $s(x)$ — какая-либо функция; ср. II. 8, особенно прим.⁹⁴⁾ на стр. 110.) Для полиномов $s(x)$ выполняется $(s(R)f, Sg) = (Sf, s(R)g)$, т. е.

$$\ast. \quad \int_{-C}^C s(\lambda) d(E(\lambda)f, Sg) = \int_{-C}^C s(\lambda) d(Sf, E(\lambda)g).$$

Поскольку любую непрерывную функцию можно сколь угодно хорошо аппроксимировать полиномами (равномерно в $-C \leq x \leq C$), то \ast . выполняется еще и для непрерывных $s(x)$. Пусть теперь

$$s(x) = \begin{cases} =\lambda_0 - x & \text{для } x \leq \lambda_0, \\ =0 & \text{для } x \geq \lambda_0, \end{cases}$$

тогда \ast . даст нам

$$\int_{-C}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(E(\lambda)f, Sg) = \int_{-C}^{\lambda_0} (\lambda_0 - \lambda) d(Sf, E(\lambda)g).$$

Заменяя здесь λ_0 на $\lambda_0 + \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$), получим, вычитая и деля на ε :

$$\begin{aligned} & \int_{-C}^{\lambda_0} d(E(\lambda)f, Sg) + \int_{\lambda_0}^{\lambda_0 + \varepsilon} \frac{\lambda - \lambda_0}{\varepsilon} d(E(\lambda)f, Sg) = \\ & = \int_{-C}^{\lambda_0} d(Sf, E(\lambda)g) + \int_{\lambda_0}^{\lambda_0 + \varepsilon} \frac{\lambda - \lambda_0}{\varepsilon} d(Sf, E(\lambda)g). \end{aligned}$$

и при $\varepsilon \rightarrow 0$ (вспоминаем \bar{S}_1 !)

$$\int_{-C}^{\lambda_0} d(E(\lambda)f, Sg) = \int_{-C}^{\lambda_0} d(Sf, E(\lambda)g); \quad (E(\lambda_0)f, Sg) = (Sf, E(\lambda_0)g).$$

Таким образом, все $E(\lambda_0)$ для $-C \leq \lambda_0 \leq C$ коммутируют с S , для остальных же это очевидно непосредственно, поскольку для $\lambda_0 < -C$ или для $\lambda_0 > C$ $E(\lambda_0) = 0$ или соответственно 1.

Итак, если R коммутирует с S , то то же выполняется и для всех $E(\lambda)$. Обратно, если все $E(\lambda)$ коммутируют с S , то \ast . выполняется для каждой функции $s(x)$, благодаря чему все $s(R)$ коммутируют с S . Отсюда мы можем вывести, во-первых, что R тогда и только тогда коммутирует с S , когда это имеет место для всех $E(\lambda)$, и, во-вторых, что в этом случае коммутируют с S и все функции $s(R)$ от R .

Но теперь некоторое $E(\lambda)$ будет коммутировать с S тогда и только тогда, когда это будет иметь место для $E(\lambda)$ и всех $F(\mu)$ (мы применяем нашу теорему для S и $E(\lambda)$ на месте R и S). Таким образом, для коммутативности R и S характерно и то, что все $E(\lambda)$ должны коммутировать со всеми $F(\mu)$. Далее, коммутативность R и S имеет, согласно сказанному выше, следствием и коммутативность $r(R)$ с S , что в свою очередь (если заменить R , S на S , $r(R)$) — коммутативность $r(R)$ с $s(S)$.

Если эрмитовы операторы R и S не связаны условием непрерывности, то положение усложняется, поскольку области определения RS и SR могут слагаться очень ненаглядным образом. Так, например, $R \cdot 0$ имеет смысл всегда (так как $0f = 0$, $R \cdot 0f = R(0f) = R \cdot 0 = 0$), а $0 \cdot R$, напротив, только если R имеет смысл (ср. сказанное по этому поводу в II. 5). Таким образом, для не всюду определенного R вследствие различия областей определения $R \cdot 0 \neq 0 \cdot R$, т. е., строго говоря, R не коммутирует с 0. Такое положение вещей чрезвычайно неприятно для наших дальнейших целей: оператору 0 следовало бы коммутировать не только с непрерывными, но и со всеми эрмитовыми операторами¹⁰⁷⁾. Мы определим поэтому для не непрерывных R , S коммутативность другим способом; мы ограничимся при этом единственными интересными, согласно II. 9, гипермаксимальными R и S . Определяем: R и S должны называться коммутирующими в новом смысле, если все $E(\lambda)$ коммутируют со всеми $F(\mu)$ (это опять соответствующие им разложения единицы) в старом. Для непрерывных R и S новое определение, как мы уже знаем, совпадает со старым, напротив, для разрывных R или S (или обоих) это при некоторых обстоятельствах не имеет места. Примером последнего служит случай операторов R и 0: в старом смысле они не коммутировали, а в новом — коммутируют, поскольку для оператора 0 каждое $F(\mu)$ равно 0 или 1¹⁰⁸⁾, следовательно коммутирует с $E(\lambda)$.

Выше мы доказали, что если R и S — два коммутирующих (непрерывных) эрмитовых оператора, то каждая функция $r(R)$ оператора R коммутирует с каждой функцией $s(S)$ оператора S . Поскольку для $R = S$ эта предпосылка выполняется всегда, то две функции $r(R)$ и $s(R)$ одного и того же оператора всегда перестановочны (это сле-

¹⁰⁷⁾ Поскольку (ср. II. 5) как $R \cdot 1$, так и $1 \cdot R$ имеют смысл тогда и только тогда, когда имеет смысл R , то при $a \neq 0$ то же справедливо и для $R \cdot a1$, $a1 \cdot R$. Таким образом, оба эти произведения равны друг другу, т. е. R коммутирует с $a \cdot 1$. Тем самым коммутативность R с $a \cdot 1$ выполняется с единственным исключением, $a = 0$, R определен не всюду. Это выглядит очень неизящно и подсказывает нам изменение определения коммутативности.

¹⁰⁸⁾ Оператору $a \cdot 1$ отвечает, как легко вычислить, разложение единицы вида $F(\mu) = \begin{cases} = 1 & \text{для } \mu \geq a, \\ = 0 & \text{для } \mu < a. \end{cases}$

дует и из формулы умножения в конце II. 8: $r(R)s(R) = t(R)$, если $r(x)s(x) = t(x)$). Если $r(x)$ и $s(x)$ вещественны, то, кроме того, $r(R)$ и $s(R)$ будут эрмитовыми (в силу II. 8: если $r(x)$ вещественна, то $(r(R))^* = \bar{r}(R) = r(R)$).

Справедливо и обратное утверждение: если A и B — два коммутирующих эрмитовых оператора, то существует такой эрмитов оператор R , что оба они будут его функциями: $A = r(R)$, $B = s(R)$. Можно утверждать и несколько большее: если задано произвольное (конечное или бесконечное) множество коммутирующих эрмитовых операторов A, B, C, \dots , то существует такой эрмитов оператор R , функциями которого будут все A, B, C, \dots . Мы не можем привести здесь доказательство этой теоремы и нам придется ограничиться ссылкой на литературу вопроса¹⁰⁹⁾. Для наших целей понадобится эта теорема только для конечного числа операторов A, B, C, \dots с чисто дискретным спектром. Для этого случая она будет сейчас доказана, относительно же общего случая мы сможем привести лишь некоторые ориентирующие замечания.

Итак, пусть A, B, C, \dots — конечное число эрмитовых операторов с чисто дискретным спектром. Если λ — некоторое число, то назовем \mathfrak{L}_λ замкнутое линейное многообразие, натянутое на совокупность решений уравнения $Af = \lambda f$; соответствующий проекционный оператор назовем E_λ . Число λ тогда и только тогда будет дискретным собственным значением A , когда существуют решения $f \neq 0$, следовательно, для $\mathfrak{L}_\lambda \neq \{0\}$, что значит $E_\lambda \neq 0$. Аналогично мы образуем \mathfrak{M}_λ и F_λ для оператора B , \mathfrak{N}_λ и G_λ для C, \dots . Из $Af = \lambda f$ следует $ABf = BAf = B(\lambda f) = \lambda Bf$. Это значит, что вместе с f в \mathfrak{L}_λ входит и Bf . Так как $E_\lambda f$ всегда принадлежит к \mathfrak{L}_λ , то то же справедливо и для $BE_\lambda f$; тем самым $E_\lambda BE_\lambda f = BE_\lambda f$. Это выполняется тождественно, следовательно, $E_\lambda BE_\lambda = BE_\lambda$. Применение $*$ приводит отсюда к $E_\lambda BE_\lambda = E_\lambda B$. Следовательно, $E_\lambda B = BE_\lambda$. Точно так же, как мы заключили сейчас из коммутативности A и B о коммутативности B и E_λ , из коммутативности B и E_μ следует коммутативность E_λ и E_μ . Поскольку A и B никак не были выделены среди операторов A, B, C, \dots , можно утверждать, что все $E_\lambda, F_\mu, G_\nu, \dots$ коммутируют друг с другом. Итак, $K(\lambda\mu\nu\dots) = E_\lambda F_\mu G_\nu \dots$ — тоже проекционный оператор; его замкнутое линейное многообразие назовем $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$. Согласно *теореме 14*. (II. 4), $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$ будет пересечением $\mathfrak{L}_\lambda, \mathfrak{M}_\mu, \mathfrak{N}_\nu, \dots$

¹⁰⁹⁾ Для двух эрмитовых операторов A и B , принадлежащих нашему специальному классу (так называемых вполне непрерывных, ср. прим. ⁷⁰⁾ на стр. 82), Теплиц (ср., например, прим. ³³⁾ на стр. 29) доказал теорему, из которой следует сформулированная выше (именно, существование полной ортонормированной системы из общих собственных функций операторов A и B). Общая теорема для произвольных A и B или A, B, C, \dots была доказана автором в другом месте (ср. прим. ⁹¹⁾ на стр. 110).

\mathfrak{N}_v, \dots , т. е. совокупностью всех общих решений уравнений

$$Af = \lambda f, \quad Bf = \mu f, \quad Cf = \nu f, \dots$$

Пусть λ, μ, ν, \dots и $\lambda', \mu', \nu', \dots$ — две различные системы чисел, т. е. $\lambda \neq \lambda'$ или $\mu \neq \mu'$, или $\nu \neq \nu', \dots$. Пусть f принадлежит к $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$, а f' — к $\mathfrak{K}(\lambda'\mu'\nu'\dots)$. Функции f и f' ортогональны: для $\lambda \neq \lambda'$ из-за $Af = \lambda f$, $Af' = \lambda' f'$, для $\mu \neq \mu'$ из-за $Bf = \mu f$, $Bf' = \mu' f'$, \dots . Тем самым всё $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$ ортогонально ко всему $\mathfrak{K}(\lambda'\mu'\nu'\dots)$.

Поскольку A имеет чисто дискретный спектр, то всё \mathfrak{K}_∞ (рассматриваемое как замкнутое линейное многообразие) натягивается на \mathfrak{L}_λ . Поэтому $f \neq 0$ не может быть ортогональной ко всем \mathfrak{L}_λ , т. е. по крайней мере для одного \mathfrak{L}_λ ее проекция в \mathfrak{L}_λ должна быть $\neq 0$, т. е. $E_\lambda f \neq 0$. Точно так же должно существовать одно μ с $F_\mu f \neq 0$, одно ν с $G_\nu f \neq 0$, \dots . Вследствие этого мы можем найти для каждой $f \neq 0$ одно λ с $E_\lambda f \neq 0$, затем μ с $F_\mu(E_\lambda f) \neq 0$, затем ν с $G_\nu(F_\mu(E_\lambda f)) \neq 0$, \dots . Так оказывается окончательно, что

$$\dots G_\nu F_\mu E_\lambda f \neq 0; \quad E_\lambda F_\mu G_\nu \dots f \neq 0, \quad K(\lambda\mu\nu\dots) f \neq 0,$$

т. е. что f не ортогональна к $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$. Итак, функция f , ортогональная ко всем $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$, $= 0$. Тем самым на совокупность всех $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$ натягивается все \mathfrak{K}_∞ как замкнутое линейное многообразие.

Пусть теперь $\varphi_{(\lambda\mu\nu\dots)}^{(1)}, \varphi_{(\lambda\mu\nu\dots)}^{(2)}, \dots$ — ортонормированная система, на которую натягивается замкнутое линейное многообразие $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$. (Эта последовательность обрывается или нет, судя по тому, имеет ли $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$ конечное или бесконечное число измерений; если, напротив, $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots) = 0$, то она состоит из 0 членов.) Каждая $\varphi_{(\lambda\mu\nu\dots)}^{(n)}$ принадлежит некоторому $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$, является, следовательно, собственной функцией всех A, B, C, \dots . Две различные $\varphi_{(\lambda\mu\nu\dots)}^{(n)}$ всегда ортогональны друг другу: если они обладают одной и той же системой λ, μ, ν, \dots , то на основании их построения, если они обладают различными системами λ, μ, ν, \dots , то поскольку они принадлежат к различным $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$. Все функции $\varphi_{(\lambda\mu\nu\dots)}^{(n)}$ растягивают то же замкнутое линейное многообразие, что и все $\mathfrak{K}(\lambda\mu\nu\dots)$ — многообразие \mathfrak{K}_∞ . Тем самым $\varphi_{(\lambda\mu\nu\dots)}^{(n)}$ образуют полную ортонормированную систему.

Итак, мы построили полную ортонормированную систему из одних лишь общих собственных функций операторов A, B, C, \dots . В дальнейшем мы предпочтет обозначать ее через ψ_1, ψ_2, \dots , а соответствующие уравнения будем записывать в виде

$$A\psi_m = \lambda_m \psi_m, \quad B\psi_m = \mu_m \psi_m, \quad C\psi_m = \nu_m \psi_m, \dots$$

Возьмем теперь какую-нибудь систему различных друг от друга чисел x_1, x_2, x_3, \dots и построим эрмитов оператор R с одними лишь

дискретными собственными значениями x_1, x_2, \dots и соответствующими им собственными функциями ψ_1, ψ_2, \dots , т. е. положим

$$R \left(\sum_{m=1}^{\infty} x_m \psi_m \right) = \sum_{m=1}^{\infty} x_m x_m \psi_m \quad (110).$$

Пусть, далее, $F(x)$ — определенная в интервале $-\infty < x < +\infty$ функция, для которой имеет место $F(x_m) = \lambda_m$ ($m = 1, 2, \dots$) (для всех остальных значений x функция $F(x)$ может быть произвольной); точно так же $G(x)$ — функция с $G(x_m) = \mu_m$, $H(x)$ — функция с $H(x_m) = v_m, \dots$. Покажем, что

$$A = F(R), \quad B = G(R), \quad C = H(R), \dots$$

Нам надо показать, что, если R обладает чисто дискретным спектром x_1, x_2, \dots с собственными функциями ψ_1, ψ_2, \dots , то $F(R)$ будет обладать чисто дискретным спектром $F(x_1), F(x_2), \dots$ с теми же самыми собственными функциями ψ_1, ψ_2, \dots . Поскольку, однако, функции ψ_1, ψ_2, \dots во всяком случае образуют полную ортонормированную систему, то будет достаточно доказать, что $F(R)\psi_m = F(x_m) \cdot \psi_m$.

Пусть, в согласии с II. 8, $E(\lambda) = \sum_{x_m \leq \lambda} P_{[\psi_m]}$ — принадлежащее R разложение единицы. Тогда, как мы знаем, можно будет записать символически

$$R = \int \lambda dE(\lambda)$$

и, по определению,

$$F(R) = \int F(\lambda) dE(\lambda).$$

⁽¹¹⁰⁾ x_1, x_2, x_3, \dots следует выбрать ограниченными, например, $x_m = \frac{1}{m}$, чтобы R оказался непрерывным. Действительно, из непрерывности R , т. е. из $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$, следует тотчас же

$$\|R\psi_m\| = \|x_m \psi_m\| = |x_m| \leq C \cdot \|\psi_m\| = C, \quad |x_m| \leq C,$$

а из $|x_m| \leq C$ ($m = 1, 2, \dots$) — обратно:

$$\|Rf\|^2 = \left\| R \left(\sum_{m=1}^{\infty} x_m \psi_m \right) \right\|^2 = \left\| \sum_{m=1}^{\infty} x_m x_m \psi_m \right\|^2 = \sum_{m=1}^{\infty} |x_m|^2 |x_m|^2,$$

$$\|f\|^2 = \left\| \sum_{m=1}^{\infty} x_m \psi_m \right\|^2 = \sum_{m=1}^{\infty} |x_m|^2,$$

следовательно, $\|Rf\|^2 \leq C^2 \cdot \|f\|^2$, $\|Rf\| \leq C \cdot \|f\|$, т. е. непрерывность оператора R .

Далее

$$E(\lambda)\psi_m = \begin{cases} =\psi_m & \text{для } x_m \leq \lambda, \\ =0 & \text{для } x_m > \lambda. \end{cases}$$

Отсюда следует, что для всех g

$$(F(R)\psi_m, g) = \int F(\lambda) d(E(\lambda)\psi_m, g) = F(x_m) \cdot (\psi_m, g),$$

т. е. действительно $F(R)\psi_m = F(x_m) \cdot \psi_m$.

Тем самым доказательство для случая чисто дискретного спектра, как мы и обещали, выполнено. Для случая непрерывного спектра нам придется удовлетвориться указаниями примечания¹⁰⁹⁾ (стр. 132). Мы хотели бы только остановиться на одном особенно характерном случае.

Пусть \mathfrak{X}_∞ — пространство всех $f(q_1, q_2)$ с конечным $\int \int |f(q_1, q_2)|^2 dq_1 dq_2$, определенных в квадрате $0 \leq q_1, q_2 \leq 1$. Образуем операторы $A = q_1 \dots$, $B = q_2 \dots$. Они эрмитовы, в рассматриваемой области определения на плоскости q_1, q_2 также и непрерывны (при $-\infty < q_1, q_2 < +\infty$ — нет!), далее, они коммутируют. Следовательно, они оба должны быть функциями одного R . При этом последний должен коммутировать с A и B , откуда, на доказательстве чего мы не будем здесь останавливаться, следует, что R должен иметь вид $s(q_1, q_2) \dots$ [$s(q_1, q_2)$ — ограниченная функция]. Но тогда R^n ($n = 0, 1, 2, \dots$) должен равняться $(s(q_1, q_2))^n \dots$, и $F(R)$ равняться $F(s(q_1, q_2)) \dots$, если $F(x)$ — полином. Последнюю формулу можно, однако, во что мы также не можем глубже вникать здесь, распространить на все $F(x)$. Итак, из $F(R) = A$, $G(R) = B$ следует, что

$$F(s(q_1, q_2)) = q_1, \quad G(s(q_1, q_2)) = q_2^{111}).$$

Это значит, что взаимно обратные отображения $s(q_1, q_2) = x$ и $F(x) = q_1$, $G(x) = q_2$ должны были бы одно-однозначно отображать поверхность квадрата $0 \leq q_1, q_2 \leq 1$ на линейное числовое множество переменной x — нечто, что противоречит геометрической интуиции.

Однако на основе упоминавшегося выше доказательства мы знаем, что это тем не менее должно быть возможным. И в самом деле, отображение желаемого рода действительно осуществляется посредством так называемой кривой Пэано¹¹²⁾. Внимательное изучение приведенного в прим. ¹⁰⁹⁾ доказательства действительно показывает, что оно приводит в рассматриваемом примере к кривой Пэано или родственным ей образованиям.

¹¹¹⁾ На q_1, q_2 -множестве лебеговой меры 0 были бы допустимы исключения!

¹¹²⁾ Ср., например, прим. ⁴⁵⁾ на стр. 41.

11. Шпур

Мы хотим определить здесь некоторые важные инварианты операторов.

Для одной матрицы $\{a_{\mu\nu}\}$ из \Re_n таким инвариантом будет шпур $\sum_{\mu=1}^n a_{\mu\mu}$. Он унитарно-инвариантен, т. е. не меняется, если преобразовать $\{a_{\mu\nu}\}$ к другой (декартовой) системе координат¹¹³⁾. Если же заменить матрицу $\{a_{\mu\nu}\}$ соответствующим оператором

$$A\{x_1, \dots, x_n\} = \{y_1, \dots, y_n\}, \quad y_\mu = \sum_{\nu=1}^n a_{\mu\nu} x_\nu,$$

то элементы $a_{\mu\nu}$ выражаются через A следующим образом. Векторы $\varphi_1 = \{1, 0, \dots, 0\}$, $\varphi_2 = \{0, 1, \dots, 0\}$, ..., $\varphi_n = \{0, 0, \dots, 1\}$ образуют полную и нормированную ортогональную систему, и, очевидно, $a_{\mu\nu} = (A\varphi_\nu, \varphi_\mu)$ (ср. II. 5, в особенности прим. ⁶⁰⁾ на стр. 75).

Итак, шпур выражается формулой $\sum_{\mu=1}^n (A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$, и его инвариантность утверждает, что его значение будет одним и тем же во всякой полной нормированной ортогональной системе.

Такое образование понятия шпера можно немедленно перенести по аналогии в \Re_∞ : если A — линейный оператор, то мы выбираем

¹¹³⁾ Матрица $\{a_{\mu\nu}\}$ представляет преобразование (т. е. оператор) $\eta_\mu = \sum_{\nu=1}^n a_{\mu\nu} \xi_\nu$, ($\mu = 1, \dots, n$, ср. выводы в II. 7). Если мы будем преобразовывать координаты по формулам

$$\xi_\mu = \sum_{\nu=1}^n x_{\nu\mu} \xi_\nu, \quad \eta_\mu = \sum_{\nu=1}^n x_{\nu\mu} \eta_\nu \quad (\mu = 1, \dots, n),$$

то из этого получится

$$\eta_\mu = \sum_1^n a_{\mu\nu} \xi_\nu, \quad (\mu = 1, \dots, n)$$

с

$$a_{\mu\nu} = \sum_{\rho, \sigma=1}^n a_{\rho\sigma} \bar{x}_{\mu\rho} x_{\nu\sigma} \quad (\mu, \nu = 1, \dots, n),$$

где $\{a_{\mu\nu}\}$ — преобразованная матрица. При этом, очевидно, будет

$$\sum_{\mu=1}^n a_{\mu\mu} = \sum_{\mu, \rho, \sigma=1}^n a_{\rho\sigma} \bar{x}_{\mu\rho} x_{\mu\sigma} = \sum_{\rho, \sigma=1}^n a_{\rho\sigma} \left(\sum_{\mu=1}^n \bar{x}_{\mu\rho} x_{\mu\sigma} \right) = \sum_{\rho=1}^n a_{\rho\rho},$$

т. е. шпур останется инвариантным.

какую-нибудь полную ортонормированную систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, для которой все $A\varphi_\mu$ имеют смысл (этого, безусловно, можно добиться, если область определения A всюду плотна — достаточно взять в ней плотную последовательность f_1, f_2, \dots и ортогонализировать ее

с помощью *теоремы 8.* из II. 2) и полагаем $\text{Spur}(A) = \sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$.

Надо показать, что так образованная величина действительно зависит только от A (но не от φ_μ !).

Для этой цели введем сперва две полные ортонормированные системы $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и ψ_1, ψ_2, \dots и положим

$$\text{Spur}(A; \varphi, \psi) = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \psi_\nu)(\psi_\nu, \varphi_\mu).$$

Из *теоремы 7.* раздела II. 2 следует, что это выражение равняется

$\sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$, т. е. зависит от ψ_ν только кажущимся образом. Далее

$$\sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \psi_\nu)(\psi_\nu, \varphi_\mu) = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (\varphi_\mu, A^*\psi_\nu)(\psi_\nu, \varphi_\mu) = \overline{\sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (A^*\psi_\nu, \varphi_\mu)(\varphi_\mu, \psi_\nu)},$$

т. е. $\text{Spur}(A; \varphi, \psi) = \overline{\text{Spur}(A^*; \psi, \varphi)}$. Поскольку правая часть зависит, согласно сказанному выше, от φ_μ только кажущимся образом, то это же должно быть справедливо и для левой: она зависит, следовательно, только кажущимся образом и от φ_μ и от ψ_ν , в действительности же есть функция только от A . Поэтому мы можем обозначать $\text{Spur}(A; \varphi, \psi)$ просто как $\text{Spur } A$. Поскольку он равен

$\sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$, то желаемое доказательство инвариантности завершено.

При этом из последнего равенства следует еще и $\text{Spur}(A) = \overline{\text{Spur}(A^*)}$. Соотношения

$$\text{Spur}(aA) = a \text{Spur}(A), \quad \text{Spur}(A \pm B) = \text{Spur}(A) \pm \text{Spur}(B)$$

очевидны. Далее, выполняется (и для некоммутирующих A и B) соотношение

$$\text{Spur}(AB) = \text{Spur}(BA).$$

Оно доказывается так:

$$\begin{aligned} \text{Spur}(AB) &= \sum_{\mu=1}^{\infty} (AB\varphi_\mu, \varphi_\mu) = \sum_{\mu=1}^{\infty} (B\varphi_\mu, A^*\varphi_\mu) = \\ &= \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (B\varphi_\mu, \psi_\nu)(\psi_\nu, A^*\varphi_\mu) = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (B\varphi_\mu, \psi_\nu)(A\psi_\nu, \varphi_\mu), \end{aligned}$$

где $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и ψ_1, ψ_2, \dots можно считать двумя произвольными полными ортонормированными системами, и симметрия последнего выражения в A и B (при одновременной перестановке φ и ψ) очевидна. Таким образом, для эрмитовых операторов A и B :

$$\text{Spur}(AB) = \overline{\text{Spur}((AB)^*)} = \overline{\text{Spur}(B^*A^*)} = \overline{\text{Spur}(BA)} = \overline{\text{Spur}(AB)},$$

следовательно, $\text{Spur}(AB)$ веществен (для шпера $\text{Spur}(A)$ это естественно так).

Если \mathfrak{M} — замкнутое линейное многообразие, а E — его проекционный оператор, то $\text{Spur}(E)$ определяется следующим образом. Пусть ψ_1, \dots, ψ_k — ортонормированная система, на которую натягивается линейное многообразие \mathfrak{M} , а χ_1, \dots, χ_l — система, растягивающая $\mathfrak{M}_\infty - \mathfrak{M}$ (естественно, что или k , или l , или же оба они бесконечны). Тогда $\psi_1, \dots, \psi_k, \chi_1, \dots, \chi_l$ растягивают в совокупности все \mathfrak{M}_∞ , т. е. образуют полную ортонормированную систему (*теорема 7. а.* из II. 2). Поэтому

$$\begin{aligned} \text{Spur}(E) &= \sum_{\mu=1}^k (E\psi_\mu, \psi_\mu) + \sum_{\mu=1}^l (E\chi_\mu, \chi_\mu) = \sum_{\mu=1}^k (\psi_\mu, \psi_\mu) + \sum_{\mu=1}^l (0, \chi_\mu) = \\ &= \sum_{\mu=1}^k 1 = k, \end{aligned}$$

т. е. $\text{Spur}(E)$ равен числу измерений многообразия \mathfrak{M} .

Если оператор A дефинитен, то все $(A\varphi_\mu, \varphi_\mu) \geq 0$ и, следовательно, $\text{Spur } A \geq 0$. Если при этом $\text{Spur } A = 0$, то должны обращаться в нуль и все $(A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$, и поэтому $A\varphi_\mu = 0$ (*теорема 19.* из II. 5). Если $\|\varphi\| = 1$, то можно подыскать полную ортонормированную систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ с $\varphi_1 = \varphi$ (если последовательность f_1, f_2, \dots всюду плотна, то мы «ортогонализуем» φ, f_1, f_2, \dots — см. доказательство *теоремы 7.* в II. 5 —, благодаря чему возникнет начинаящаяся с φ полная ортонормированная система), следовательно, будет $A\varphi = 0$. Если теперь f произвольна, то для $f = 0$ конечно будет $Af = 0$, для случая же $f \neq 0$ то же следует из предыдущего, если положить $\varphi = \frac{1}{\|f\|} f$. Итак, $A = 0$. Это значит, что если A дефинитен и $\neq 0$, то $\text{Spur } A > 0$.

При всей краткости и простоте наших рассуждений относительно шпера, математически они не безукоризнены. Действительно, мы рассматривали ряды $\sum_{\mu, v=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \psi_v)(\psi_v, \varphi_\mu)$ и $\sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \varphi_\mu)$ не обращая внимания на их сходимость, преобразовывали их друг в друга (меняли порядок суммирования) — короче, делали все, что при корректном обращении делать нельзя. Хотя неряшливость такого рода допу-

сается в теоретической физике и в других случаях, и хотя данная небрежность и не приведет в дальнейших применениях к квантовой механике ни к какой беде, — надо все-таки ясно заявить, что дело идет о неряшлиности.

Тем существеннее подчеркнуть, что в основных статистических утверждениях квантовой механики используется только шпур операторов AB , если и A и B оба дефинитны, и что это понятие может быть обосновано и совершенно точным образом. Поэтому в оставшейся части параграфа мы установим те свойства шпура, которые доказываются с абсолютной математической строгостью.

Рассмотрим сперва шпур произведения A^*A (A — произволен, A^*A в силу II. 4 эрмитов и вследствие $(A^*Af, f) = (Af, Af) \geqslant 0$ дефинитен). Мы имеем:

$$\text{Spur}(A^*A) = \sum_{\mu=1}^{\infty} (A^*A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu}) = \sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, A\varphi_{\mu}) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\varphi_{\mu}\|^2.$$

Поскольку этот ряд содержит лишь члены $\geqslant 0$, то он либо сходится, либо расходится к $+\infty$, т. е. в любом случае имеет смысл. Покажем теперь независимо от предыдущих рассуждений, что его сумма не зависит от выбора $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. При этом мы встретимся лишь с рядами, все члены которых $\geqslant 0$, поэтому все будет иметь смысл и любое изменение порядка суммирования будет дозволено.

Если $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и ψ_1, ψ_2, \dots — две полные ортонормированные системы, то определим

$$\Sigma(A; \varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(A\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2.$$

Согласно *теореме 7*. γ. из II. 2 это выражение равняется $\sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\varphi_{\mu}\|^2$, т. е. $\Sigma(A; \varphi_{\mu}, \psi_{\nu})$ зависит от ψ_{ν} только кажущимся образом. Далее (как $A\varphi_{\mu}$, так и $A^*\psi_{\nu}$ должны иметь смысл),

$$\begin{aligned} \Sigma(A; \varphi_{\mu}, \psi_{\nu}) &= \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(A\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(\varphi_{\mu}, A^*\psi_{\nu})|^2 = \\ &= \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(A^*\psi_{\nu}, \varphi_{\mu})|^2 = \Sigma(A^*; \psi_{\nu}, \varphi_{\mu}). \end{aligned}$$

Поэтому зависимость от φ_{μ} тоже только кажущаяся, поскольку так обстоит дело для крайнего правого выражения. Тем самым оказывается, что $\Sigma(A; \varphi_{\mu}, \psi_{\nu})$ зависит вообще только от A , и мы назовем ее $\Sigma(A)$. Согласно доказанному выше,

$$\Sigma(A) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\varphi_{\mu}\|^2 = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(A\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2$$

и $\Sigma(A) = \Sigma(A^*)$. Таким образом, $\text{Spur}(A^*A)$ определяется заново (и теперь корректно) как $\Sigma(A)$.

Докажем еще независимо некоторые свойства $\Sigma(A)$, которые следовали бы и из уже выведенных общих свойств шпура.

Из определения следует, что всегда $\Sigma(A) \geq 0$, а для $\Sigma(A) = 0$ должны все $A\varphi_\mu = 0$, откуда, как и раньше, следует, что $A = 0$. Это значит, что для $A \neq 0$ будет $\Sigma(A) > 0$.

Ясно, что $\Sigma(aA) = |a|^2\Sigma(A)$. Если $A^*B = 0$, то выполняется:

$$\begin{aligned} \|(A+B)\varphi_\mu\|^2 - \|A\varphi_\mu\|^2 - \|B\varphi_\mu\|^2 &= (A\varphi_\mu, B\varphi_\mu) + (B\varphi_\mu, A\varphi_\mu) = \\ &= 2\operatorname{Re}(A\varphi_\mu, B\varphi_\mu) = 2\operatorname{Re}(\varphi_\mu, A^*B\varphi_\mu) = 0, \end{aligned}$$

следовательно, после суммирования $\sum_{\mu=1}^{\infty}$:

$$\Sigma(A+B) = \Sigma(A) + \Sigma(B).$$

Это соотношение не изменится, если переставить в нем A и B . Следовательно, оно будет справедливым и для $B^*A = 0$. Далее, мы можем заменить A, B на A^* и B^* ; следовательно, в равной степени достаточно и условий $AB^* = 0$ или $BA^* = 0$. Для эрмитова A (или B), мы можем поэтому написать $AB = 0$ или $BA = 0$.

Если E — проекционный оператор замкнутого линейного многообразия \mathfrak{M} , то для рассматривавшихся при определении шпура $\text{Spur}(E)$ функций $\psi_1, \dots, \psi_k, \chi_1, \dots, \chi_l$:

$$\Sigma(E) = \sum_{\mu=1}^k \|E\psi_\mu\|^2 + \sum_{\mu=1}^l \|E\chi_\mu\|^2 = \sum_{\mu=1}^k \|\psi_\mu\|^2 + \sum_{\mu=1}^l \|0\|^2 = \sum_{\mu=1}^k 1 = k.$$

Иными словами, и $\Sigma(E)$ оказывается равным числу измерений M (из-за $E^*E = EE = E$ ничего другого и нельзя было ожидать).

Теперь, к Σ можно свести $\text{Spur}(AB)$ для двух дефинитных (эрмитовых) операторов A и B . Именно, существуют два таких же оператора A', B' со свойством $A'^2 = A, B'^2 = B$ ¹¹⁴⁾ — мы назовем их \sqrt{A} и \sqrt{B} . Чисто формально пишем:

$$\begin{aligned} \text{Spur}(AB) &= \text{Spur}(\sqrt{A}\sqrt{A}\sqrt{B}\sqrt{B}) = \text{Spur}(\sqrt{B}\sqrt{A}\sqrt{A}\sqrt{B}) = \\ &= \text{Spur}((\sqrt{A}\sqrt{B})^*(\sqrt{A}\sqrt{B})) = \Sigma(\sqrt{A}\sqrt{B}). \end{aligned}$$

¹¹⁴⁾ Точно это утверждение формулируется так: Если A гипермаксимален и дефинитен, то существует один и только один такой же оператор A' с $A'^2 = A$. Докажем существование.

Теперь эта $\Sigma(\sqrt{A}\sqrt{B})$ обладает, — на основании собственного определения и без какого бы то ни было учета связей со шпуром, — всеми свойствами, которые мы ожидаем для шпура $\text{Spr}(AB)$ — именно:

$$\Sigma(\sqrt{A}\sqrt{B}) = \Sigma(\sqrt{B}\sqrt{A}).$$

$$\Sigma(\sqrt{A}\sqrt{B+C}) = \Sigma(\sqrt{A}\sqrt{B}) + \Sigma(\sqrt{A}\sqrt{C}).$$

$$\Sigma(\sqrt{A+B}\sqrt{C}) = \Sigma(\sqrt{A}\sqrt{C}) + \Sigma(\sqrt{B}\sqrt{C}).$$

Первое следует из того, что $\Sigma(XY)$ в X и Y симметрично:

$$\Sigma(XY) = \sum_{\mu, v=1}^{\infty} |(XY\varphi_{\mu}, \psi_v)|^2 = \sum_{\mu, v=1}^{\infty} |(Y\varphi_{\mu}, X\psi_v)|^2,$$

второе следует с помощью первого из третьего, следовательно, остается доказать лишь его, т. е. что $\Sigma(\sqrt{A}\sqrt{B})$ аддитивна в A .

Пусть $A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda)$ — представление оператора A через его собственные значения. Поскольку A дефинитен, то $E(\lambda)$ для $\lambda < 0$ постоянно

(следовательно, согласно \bar{S}_1 , равно 0), поскольку иначе для соответственно выбранных $\lambda_1 < \lambda_2 < 0$ было бы $E(\lambda_2) - E(\lambda_1) \neq 0$, значит, можно было бы выбрать $f \neq 0$ с $(E(\lambda_2) - E(\lambda_1))f = f$. Но отсюда следовало бы, как мы уже многократно заключали,

$$E(\lambda)f = \begin{cases} f & \text{для } \lambda \geq \lambda_2, \\ 0 & \text{для } \lambda \leq \lambda_1, \end{cases}$$

следовательно,

$$(Af, f) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d(E(\lambda)f, f) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \lambda d(E(\lambda)f, f) \leqq \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \lambda_2 d(E(\lambda)f, f) = \\ = \lambda_2 ((E(\lambda_2) - E(\lambda_1))f, f) = \lambda_2(f, f) < 0.$$

Поэтому

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda) = \int_0^{\infty} \lambda dE(\lambda) = \int_0^{\infty} \mu^2 dE(\mu^2),$$

и $A' = \int_1^{\infty} \mu dE(\mu^2)$ представляет собой желаемый оператор.

Подчёркнем: из дефинитности мы заключили о том, что $E(\lambda) = 0$ для $\lambda < 0$. Так как из последнего естественно следует дефинитность, то это, т. е. то обстоятельство, что весь спектр $\geqq 0$, — является характерным для дефинитности.

Но в последнем мы убедимся, если запишем $\Sigma(\sqrt{A}\sqrt{B})$ в виде

$$\begin{aligned}\Sigma(\sqrt{A}\sqrt{B}) &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \|\sqrt{A}\sqrt{B}\varphi_{\mu}\|^2 = \sum_{\mu=1}^{\infty} (\sqrt{A}\sqrt{B}\varphi_{\mu}, \sqrt{A}\sqrt{B}\varphi_{\mu}) = \\ &= \sum_{\mu=1}^{\infty} (\sqrt{A} \cdot \sqrt{A}\sqrt{B}\varphi_{\mu}, \sqrt{B}\varphi_{\mu}) = \sum_{\mu=1}^{\infty} (A\sqrt{B}\varphi_{\mu}, \sqrt{B}\varphi_{\mu}).\end{aligned}$$

Тем самым строгое обоснование понятия шпера в том объеме, который мы признали выше желательным, проведено.

Последняя формула позволяет сделать и следующее заключение: если A и B дефинитны, то $AB = 0$ является следствием равенства $\text{Spur}(AB) = 0$. Действительно, последнее утверждает, что $\Sigma(\sqrt{A}\sqrt{B}) = 0$, следовательно, и $\sqrt{A}\sqrt{B} = 0$ (ср. сказанное на стр. 140 или следующее ниже рассмотрение Σ); следовательно, $AB = \sqrt{A} \cdot \sqrt{A}\sqrt{B} \cdot \sqrt{B} = 0$.

Для дефинитного эрмитова оператора A вычисления со шпуром корректны и в первоначальной форме. В самом деле, если $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — полная ортонормированная система, то $\sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu})$ (сумма, которая была призвана определить шпур!) будет суммой с только неотрицательными членами и, следовательно, будет или сходиться, или собственно ($k + \infty$) расходиться. Теперь могут встретиться два случая: или эта сумма бесконечна при любом выборе $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, — тогда шпур действительно определен независимо от $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, а именно равен $+\infty$, — или же она по крайней мере при одном выборе $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, пусть при $\bar{\varphi}_1, \bar{\varphi}_2, \dots$, конечна, но тогда из-за

$$\left(\sum_{\mu=1}^{\infty} (A\bar{\varphi}_{\mu}, \bar{\varphi}_{\mu}) \right)^2 = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} (A\bar{\varphi}_{\mu}, \bar{\varphi}_{\mu})(A\bar{\varphi}_{\nu}, \bar{\varphi}_{\nu}) \geq \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |(A\bar{\varphi}_{\mu}, \bar{\varphi}_{\mu})|^2 = \Sigma(A)$$

будет конечной и $\Sigma(A)$, пусть, например, равной C^2 . Если теперь ψ_1, ψ_2, \dots — какая-либо полная ортонормированная система, то

$$\Sigma(A) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\psi_{\mu}\|^2 = C^2, \quad \|A\psi_1\|^2 \leq C^2, \quad \|A\psi_1\| \leq C.$$

Поскольку каждое ψ с $\|\psi\| = 1$ можно выбрать за ψ_1 такой системы, то из $\|\psi\| = 1$ следует $\|A\psi\| \leq C$. Тем самым в общем случае будет $\|Af\| \leq C\|f\|$: для $f = 0$ это очевидно, а для $f \neq 0$ достаточно положить $\varphi = \frac{1}{\|f\|}f$. Но тем самым A удовлетворяет условию *S1*, из II. 9, т. е. A будет непрерывным оператором. Однако можно утверждать и значительно больше.

Именно, из-за конечности $\Sigma(A)$ оператор A принадлежит к классу так называемых полностью непрерывных операторов, для которых Гильберт показал, что проблема собственных значений разрешима для них в первоначальной форме, т. е. что существует полная ортонормированная система ψ_1, ψ_2, \dots с $A\psi_\mu = \lambda_\mu \psi_\mu$ (и притом еще $\lambda_\mu \rightarrow 0$ для $\mu \rightarrow \infty$)¹¹⁵). Из дефинитности A следует, что $\lambda_\mu = (A\psi_\mu, \psi_\mu) \geq 0$, далее

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \lambda_\mu^2 = \sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\psi_\mu\|^2 = \Sigma(A) = C^2.$$

Если $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ образуют некоторую полную ортонормированную систему, то

$$\begin{aligned} \sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \varphi_\mu) &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\sum_{v=1}^{\infty} (A\varphi_\mu, \psi_v)(\psi_v, \varphi_\mu) \right) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\sum_{v=1}^{\infty} (\varphi_\mu, A\psi_v)(\psi_v, \varphi_\mu) \right) = \\ &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\sum_{v=1}^{\infty} \lambda_v (\varphi_\mu, \psi_v)(\psi_v, \varphi_\mu) \right) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\sum_{v=1}^{\infty} \lambda_\mu |(\varphi_\mu, \psi_v)|^2 \right). \end{aligned}$$

¹¹⁵ Ср. прим. ⁶⁴ на стр. 78. Прямое доказательство удается провести следующим образом. Пусть $\lambda_0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$, все они $\geq \epsilon$ или же все $\leq -\epsilon$, $E(\lambda_0) \neq E(\lambda_1) \neq E(\lambda_2) \neq \dots \neq E(\lambda_n)$. Тогда $E(\lambda_v) - E(\lambda_{v-1}) \neq 0$, следовательно можно выбрать $\varphi_v \neq 0$ с $(E(\lambda_v) - E(\lambda_{v-1})) \varphi_v = \varphi_v$, откуда следует, что $E(\lambda) \varphi_v = \begin{cases} \varphi_v & \text{для } \lambda \geq \lambda_v \\ 0 & \text{для } \lambda \leq \lambda_{v-1} \end{cases}$. Мы можем достичь и $\|\varphi_v\| = 1$. Из сказанного следует, что $(\varphi_\mu, \varphi_v) = 0$ для $\mu \neq v$. Тем самым функции $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ образуют ортонормированную систему и мы можем расширить ее до полной $\varphi_1, \dots, \varphi_n, \varphi_{n+1}, \dots$

Выполняется ($v = 1, \dots, n$)

$$\begin{aligned} \|A\varphi_v\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\|E(\lambda) \varphi_v\|^2 = \int_{\lambda_{v-1}}^{\lambda_v} \lambda^2 d\|E(\lambda) \varphi_v\|^2 \geq \int_{\lambda_{v-1}}^{\lambda_v} \epsilon^2 d\|E(\lambda) \varphi_v\|^2 = \\ &= \epsilon^2 (\|E(\lambda_v) \varphi_v\|^2 - \|E(\lambda_{v-1}) \varphi_v\|^2) = \epsilon^2 \|\varphi_v\|^2 = \epsilon^2. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\varphi_\mu\|^2 = \begin{cases} \geq \sum_{\mu=1}^n \|A\varphi_\mu\|^2 \geq n\epsilon^2, \\ = \Sigma(A) = C^2, \end{cases}$$

что значит, что $n \leq \frac{C^2}{\epsilon^2}$. Таким образом, для $|\lambda| \geq \epsilon$ $E(\lambda)$ вообще может принять только $\leq 2 \cdot \frac{C^2}{\epsilon^2}$ различных значений, т. е. меняется лишь конечным числом скачков, между которыми лежат интервалы постоянства. Но это значит, что при $|\lambda| \geq \epsilon$ имеется только дискретный спектр. Поскольку это справедливо для всех $\epsilon > 0$, то и вообще существует только дискретный спектр.

Поскольку все $\geqslant 0$, мы вправе переменить порядок суммирования

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu}) = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} \lambda_{\nu} |(\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 = \sum_{\nu=1}^{\infty} \lambda_{\nu} \left(\sum_{\mu=1}^{\infty} |(\varphi_{\mu}, \psi_{\nu})|^2 \right) = \\ = \sum_{\nu=1}^{\infty} \lambda_{\nu} \|\psi_{\nu}\|^2 = \sum_{\nu=1}^{\infty} \lambda_{\nu}.$$

Итак, и в этом случае $\sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu})$ оказывается не зависящей от $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, а именно равной сумме собственных значений. Поскольку для системы $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ она конечна, то, значит, она конечна и всегда. Итак, $\text{Spur } A$ опять окажется однозначным, только теперь конечным.

Тем самым мы обосновали обращение со шпуром в обоих случаях.

Получим еще несколько результатов, относящихся к шпуру $\text{Spur}(A)$ и к $\Sigma(A)$. Для всех A с конечной $\Sigma(A)$ выполнялось $\|Af\| \leqslant \sqrt{\Sigma(A)} \cdot \|f\|$, для всех дефинитных (эрмитовых) A с конечным шпуром — $\|Af\| \leqslant \text{Spur}(A) \cdot \|f\|$. Пусть теперь A — дефинитный оператор, $\text{Spur}(A) = 1$ и для соответственно подобранный φ с $\|\varphi\| = 1$ $\|A\varphi\|^2 \geqslant 1 - \varepsilon$ или $(A\varphi, \varphi) \geqslant 1 - \varepsilon$. Поскольку из-за $(A\varphi, \varphi) \leqslant \|A\varphi\| \cdot \|\varphi\| = \|A\varphi\|$ первое условие следует из второго (с $(1 - \varepsilon)^2 \geqslant 1 - 2\varepsilon$ вместо $1 - \varepsilon$, значит с 2ε вместо ε), то достаточно рассмотреть только его.

Пусть ψ ортогональна φ , $\|\psi\| = 1$. Тогда можно найти полную ортонормированную систему χ_1, χ_2, \dots с $\chi_1 = \varphi$, $\chi_2 = \psi$. Следовательно,

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \|A\varphi_{\mu}\|^2 = \begin{cases} = \Sigma(A) \leqslant (\text{Spur}(A))^2 = 1, \\ \geqslant \|A\varphi\|^2 + \|A\psi\|^2 \geqslant 1 - 2\varepsilon + \|A\psi\|^2, \end{cases}$$

$$\|A\psi\|^2 \leqslant 2\varepsilon, \quad \|A\psi\| \leqslant \sqrt{2\varepsilon}.$$

Для произвольной ортогональной к φ функции f отсюда следует $\|Af\| \leqslant \sqrt{2\varepsilon} \|f\|$ (для $f = 0$ это ясно, в противном случае $\psi = \frac{1}{\|f\|} f$). Если учесть еще, что $(Af, g) = (f, Ag)$, то мы сможем сказать, что $|Af, g| \leqslant \sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\| \cdot \|g\|$, если f или g ортогональна к φ .

Если теперь f и g произвольны, то

$$f = \alpha\varphi + f', \quad g = \beta\varphi + g',$$

где f' и g' ортогональны к φ , а $\alpha = (f, \varphi)$ и $\beta = (g, \varphi)$. Таким образом,

$$(Af, g) = \alpha\bar{\beta}(A\varphi, \varphi) + \alpha(A\varphi, g') + \bar{\beta}(Af', \varphi) + (Af', g'),$$

следовательно, если положить $(A\varphi, \varphi) = c$,

$$|(Af, g) - \alpha\bar{\beta}c| \leq |\alpha| \cdot |(A\varphi, g')| + |\beta| \cdot |(Af', \varphi)| + |(Af', g')|$$

и, согласно полученным выше оценкам,

$$|(Af, g) - c\alpha\bar{\beta}| \leq \sqrt{2\varepsilon}(|\alpha| \cdot \|g'\| + |\beta| \cdot \|f'\| + \|f'\| \cdot \|g'\|) \leq$$

$$\leq \sqrt{2\varepsilon} \cdot (\|\alpha\| + \|f'\|)(\|\beta\| + \|g'\|) \leq$$

$$\leq 2\sqrt{2\varepsilon} \cdot \sqrt{|\alpha|^2 + \|f'\|^2} \sqrt{|\beta|^2 + \|g'\|^2} = 2\sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\| \cdot \|g\|.$$

С другой стороны,

$$(Af, g) - c\alpha\bar{\beta} = (Af, g) - c(f, \varphi)(\varphi, g) = ((A - cP_{[\varphi]})f, g).$$

Поэтому всегда выполняется $|((A - cP_{[\varphi]})f, g)| \leq 2\sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\| \cdot \|g\|$, а значит, как мы знаем из II. 9, и

$$\|(A - cP_{[\varphi]})f\| \leq 2\sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\|.$$

Для $f = \varphi$ это дает ($c = (A\varphi, \varphi)$ вещественно и ≥ 0):

$$\|A\varphi - c\varphi\| \leq 2\sqrt{2\varepsilon},$$

$$c = \|c\varphi\| = \begin{cases} \leq \|A\varphi - c\varphi\| + \|A\varphi\| \leq 2\sqrt{2\varepsilon} + 1, \\ \geq -\|A\varphi - c\varphi\| + \|A\varphi\| \geq -2\sqrt{2\varepsilon} + (1 - \varepsilon), \\ 1 - (\varepsilon + 2\sqrt{2\varepsilon}) \leq c \leq 1 + 2\sqrt{2\varepsilon}. \end{cases}$$

Поэтому

$$\|(A - P_{[\varphi]})f\| \leq \|(A - P_{[\varphi]})f\| + \|(c - 1)P_{[\varphi]}f\| \leq$$

$$\leq 2\sqrt{2\varepsilon} \cdot \|f\| + (\varepsilon + 2\sqrt{2\varepsilon})\|P_{[\varphi]}f\| \leq (\varepsilon + 4\sqrt{2\varepsilon})\|f\|.$$

Итак, для $\varepsilon \rightarrow 0$ A равномерно сходится к $P_{[\varphi]}$.

В заключение рассмотрим еще шпур $\text{Spur}(A)$ и $\Sigma(A)$ в реализациях F_Z и F_Ω пространства \mathfrak{F}_∞ (ср. I. 4 и II. 3), поскольку именно в них будут получаться физические следствия.

В F_Z (множество всех $\{x_1, x_2, \dots\}$ с конечной $\sum_{\mu=1}^{\infty} |x_\mu|^2$) оператор A описывается матрицей $\{a_{\mu\nu}\}$:

$$A\{x_1, x_2, \dots\} = \{y_1, y_2, \dots\}, \quad y_\mu = \sum_{\nu=1}^{\infty} a_{\mu\nu} x_\nu.$$

Векторы $\{1, 0, 0, \dots\}, \{0, 1, 0, \dots\}, \dots$ образуют полную ортонормированную систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и $A\varphi_\mu = \{a_{1\mu}, a_{2\mu}, \dots\} = \sum_{\rho=1}^{\infty} a_{\rho\mu} \varphi_\rho$, следовательно, $(A\varphi_\mu, \varphi_\mu) = a_{\mu\mu}$, $\|A\varphi_\mu\|^2 = \sum_{\rho=1}^{\infty} |a_{\rho\mu}|^2$.

Отсюда сейчас же получаем

$$\text{Spur}(A) = \sum_{\mu=1}^{\infty} a_{\mu\mu}, \quad \Sigma(A) = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |a_{\mu\nu}|^2.$$

В F_{Ω} (множестве всех определенных в Ω функций $f(P)$ с конечным $\int_{\Omega} |f(P)|^2 dv$) мы рассматриваем только интегральные операторы

$$Af(P) = \int_{\Omega} a(P, P') f(P') dv'$$

($a(P, P')$ — определенная в Ω функция двух переменных, «интегральное ядро», ср. I. 4). Если $\varphi_1(P), \varphi_2(P), \dots$ — некоторая полная ортонормированная система, то

$$\begin{aligned} \text{Spur}(A) &= \sum_{\mu=1}^{\infty} (A\varphi_{\mu}(P), \varphi_{\mu}(P)) = \\ &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \int_{\Omega} \left[\int_{\Omega} a(P, P') \varphi_{\mu}(P') dv' \right] \overline{\varphi_{\mu}(P)} dv \end{aligned}$$

и, поскольку всегда выполняется (*теорема 7.β.*) из II. 2 в применении к $\overline{g(P)}$)

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\int_{\Omega} \overline{g(P')} \varphi_{\mu}(P') dv' \right) \varphi_{\mu}(P) = \overline{g(P)},$$

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\int_{\Omega} g(P') \varphi_{\mu}(P') dv' \right) \overline{\varphi_{\mu}(P)} = g(P),$$

то

$$\text{Spur}(A) = \int_{\Omega} a(P, P) dv.$$

Далее имеет место

$$\Sigma(A) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \int_{\Omega} \left| \int_{\Omega} a(P, P') \varphi_{\mu}(P') dv' \right|^2 dv,$$

значит из-за (*теорема 7.γ.* из II. 2)

$$\begin{aligned} \sum_{\mu=1}^{\infty} \left| \int_{\Omega} g(P') \varphi_{\mu}(P') dv' \right|^2 &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \left| \int_{\Omega} \overline{g(P')} \varphi_{\mu}(P') dv' \right|^2 = \\ &= \int_{\Omega} |\overline{g(P')}|^2 dv' = \int_{\Omega} |g(P')|^2 dv' \end{aligned}$$

и

$$\Sigma(A) = \int_{\Omega} \int_{\Omega} |a(P, P')|^2 d\mathbf{v} d\mathbf{v}'.$$

Мы видим, что операции $\text{Spur}(A)$ и $\Sigma(A)$ производят то, что было достигнуто в разделе I.4 ценой применения математически весьма рискованных искусственных приемов: при переходе от F_Z к F_{Ω} сумма

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \dots \text{ заменяется интегралом } \int_{\Omega} \dots d\mathbf{v}.$$

Мы продвинулись теперь в математическом изучении эрмитовых операторов достаточно далеко. Дальнейшие сведения по этому предмету интересующийся математической стороной читатель найдет в примыкающей литературе¹¹⁶⁾.

¹¹⁶⁾ Кроме упоминавшихся по ходу рассуждений оригинальных исследований сюда в первую очередь относится статья Хеллингера и Теплица в энциклопедии математических наук (ср. прим. ³³) на стр. 29).

ГЛАВА III

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ СТАТИСТИКА

1. Статистические утверждения квантовой механики

Возвратимся теперь к анализу квантовомеханических теорий, прерванному математическими рассуждениями главы II. До сих пор мы обсудили лишь, как позволяет квантовая механика определить все возможные значения одной определенной физической величины, энергии, — это будут собственные значения оператора энергии H , т. е. числа из его спектра. Напротив, вопрос о том, что может она сказать о значениях других величин, равно как о причинных или статистических связях между ними, не был затронут. Теперь нам надо заняться теми утверждениями теории, которые относятся к этим проблемам. За основу примем волново-механический метод описания, так как эквивалентность обеих теорий уже установлена.

При таком методе описания ясно, что все, что мы хотим сказать о состоянии системы, надо извлекать из ее волновой функции $\varphi(q_1, \dots, q_k)$. (Пусть у системы k степеней свободы и q_1, \dots, q_k — координаты ее конфигурационного пространства.) При этом мы не будем ограничиваться только стационарными состояниями системы (квантовыми орбитами, волновые функции φ которых являются собственными функциями оператора H : $H\varphi = \lambda\varphi$, ср. I. 3), но допускать все состояния системы, т. е. любые волновые функции φ (изменение которых определяется временным дифференциальным уравнением Шредингера: $H\varphi = -\frac{\hbar^2}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi$, ср. I. 2). Какие же высказывания можно сделать относительно системы, находящейся в состоянии φ ?

Прежде всего заметим, что волновая функция φ была нормирована (I. 3) соотношением

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k = 1,$$

т. е. в нашей новой терминологии — как точка гильбертова пространства \mathfrak{H}_∞ всех $f(q_1, \dots, q_k)$ с конечным

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |f(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

(некоторого F_∞) — соотношением $\|\varphi\| = 1$. Иными словами, точка должна лежать на поверхности единичного шара в гильбертовом пространстве¹¹⁷⁾. Мы уже знаем, что постоянный (т. е. не зависящий от q_1, \dots, q_k) множитель в φ лишен физического смысла. (Т. е. можно заменить φ на $a\varphi$, a — комплексное число. В силу нормировки $\|\varphi\| = 1$, должно быть $|a| = 1$). Далее, надо указать еще на то, что φ , помимо координат q_1, \dots, q_k конфигурационного пространства нашей системы, зависит еще и от времени t ; однако гильбертово пространство строится лишь относительно q_1, \dots, q_k (ведь и нормировка относилась только к ним), не учитывая зависимости от t , которое следует скорее рассматривать как параметр. Вследствие этого φ , как точка \mathfrak{H}_∞ , зависит от t , но, напротив, не зависит от q_1, \dots, q_k : ибо как точка \mathfrak{H}_∞ φ представляет всю функциональную зависимость от q_1, \dots, q_k в целом. Поэтому мы будем иногда указывать параметр t в φ (когда φ рассматривается как точка \mathfrak{H}_∞), записывая φ_t .

Итак, рассмотрим состояние $\varphi = \varphi(q_1, \dots, q_k)$. Статистическое утверждение, которое можно тогда сделать, гласит: система находится в точке q_1, \dots, q_k конфигурационного пространства с плотностью вероятности $|\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2$, т. е. вероятность того, что система окажется в объеме V конфигурационного пространства, будет равна

$$\int_V \dots \int_V |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dv.$$

(Это один из первых и самых простых примеров, на которых был осознан статистический характер квантовой механики¹¹⁸⁾; впрочем, связь между этим утверждением и предположением Шредингера о распределении заряда [ср. I. 2] является очевидной.) Далее, пусть энергии системы соответствует оператор H , его собственными значениями

¹¹⁷⁾ Согласно геометрической аналогии, шаром в \mathfrak{H}_∞ с центром φ_0 и радиусом r должно быть множество точек, для которых $\|f - \varphi_0\| \leq r$, его внутренностью — множество $\|f - \varphi_0\| < r$, а поверхностью — множество $\|f - \varphi_0\| = r$. Для единичного шара $\varphi_0 = 0$, $r = 1$.

¹¹⁸⁾ Первые статистические утверждения о поведении системы, находящейся в состоянии φ , восходят к М. Борну; более детально вопрос рассматривался Дираком и Иорданом, ср. ссылки в примечаниях⁸⁾ и²⁾ на стр. 13 и 10.

будут $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, а собственными функциями — $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, тогда вероятностью значения энергии λ_n в состоянии φ будет

$$\left| \int \dots \int \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\varphi_n(q_1, \dots, q_n)} dq_1 \dots dq_k \right|^2.$$

(Ср. работы, упомянутые в прим. 118).) Желательно теперь объединить эти два утверждения и придать им единую форму.

Пусть V — k -мерный параллелепипед

$$q'_1 < q_1 \leqq q''_1, \dots, q'_k < q_k \leqq q''_k.$$

Обозначим интервалы $\{q'_1, q''_1\}, \dots, \{q'_k, q''_k\}$ соответственно через I_1, \dots, I_k . Координатам q_1, \dots, q_k сопоставляются операторы q_1, \dots, q_k соответственно. Разложения единицы, принадлежащие этим операторам, определим следующим образом (ср. II. 8): разложение, принадлежащее $q_j (j = 1, \dots, k)$, обозначается $E_j(\lambda)$ и

$$E_j(\lambda) f(q_1, \dots, q_k) = \begin{cases} f(q_1, \dots, q_k) & \text{для } q_j \leqq \lambda, \\ 0 & \text{для } q_j > \lambda. \end{cases}$$

Введем следующее общее обозначение: если $F(\lambda)$ — некоторое разложение единицы, а I — интервал $\{\lambda', \lambda''\}$, то положим $F(I) = F(\lambda'') - F(\lambda')$ (это — проекционный оператор, так как при $\lambda' \leqq \lambda''$ $F(\lambda') \leqq F(\lambda'')$). Тогда вероятность того, что система находится в указанном выше объеме V , т. е. что q_1 лежит в I_1, \dots, q_k в I_k , составит

$$\int_{q'_1}^{q''_1} \dots \int_{q'_k}^{q''_k} |\varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k = \\ = \int \dots \int |E_1(I_1) \dots E_k(I_k) \varphi(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k$$

(поскольку $E_1(I_1) \dots E_k(I_k) \varphi(q_1, \dots, q_k) = \varphi(q_1, \dots, q_k)$, если q_1 принадлежит I_1, \dots, q_k принадлежит I_k , а в остальных случаях = 0), т. е.

$$= \|E_1(I_1) \dots E_k(I_k) \varphi\|^2.$$

В качестве второго примера рассмотрим вероятность того, что энергия лежит в интервале I , равном $\{\lambda', \lambda''\}$. Разложение единицы $E(\lambda)$ оператора H определено (ср. II. 8) как $E(\lambda) = \sum_{\lambda_n \leqq \lambda} P_{[\varphi_n]}$, поэтому

$$E(I) = E(\lambda'') - E(\lambda') = \sum_{\lambda' < \lambda_n \leqq \lambda''} P_{[\varphi_n]}.$$

Но рассматриваемая вероятность, — поскольку лишь значения энергии $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ относятся к делу, — является суммой вероятностей всех λ_n , для которых $\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''$, и, следовательно, равна

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} \left| \int \dots \int \varphi(q_1, \dots, q_k) \overline{\varphi_n(q_1, \dots, q_k)} dq_1 \dots dq_k \right|^2 = \\ = \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} |(\varphi, \varphi_n)|^2 = \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} (P_{[\varphi_n]} \varphi, \varphi) = \\ = \left(\left\{ \sum_{\lambda' < \lambda_n \leq \lambda''} P_{[\varphi_n]} \right\} \varphi, \varphi \right) = (E(I) \varphi, \varphi) = \|E(I) \varphi\|^2. \end{aligned}$$

Итак, в обоих случаях достигается результат, который можно сформулировать следующим образом:

(W.) Вероятность того, что в состоянии φ величины с операторами R_1, \dots, R_l ¹¹⁹⁾ принимают значения из соответствующих интервалов I_1, \dots, I_l , равна

$$\|E_1(I_1) \dots E_l(I_l) \varphi\|^2,$$

где $E_1(\lambda), \dots, E_l(\lambda)$ — разложения единицы, принадлежащие операторам R_1, \dots, R_l соответственно.

Первый случай correspondовал $l=k$, $R_1=q_1, \dots, R_k=q_k$..., второй — $l=1$, $R_1=\mathbf{H}$. Мы хотим теперь принять, что утверждение W. справедливо и в общем случае; в самом деле, оно включает в себя все статистические утверждения квантовой механики, сделанные до сих пор.

Одно ограничение его применимости все же необходимо. Поскольку при постановке задачи порядок операторов R_1, \dots, R_l совершенно произведен, то он не должен сказываться и на результате, т. е. операторы $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ или, что то же самое, все операторы $E_1(\lambda_1), \dots, E_l(\lambda_l)$ должны коммутировать между собой. Согласно II. 10, это означает, что R_1, \dots, R_l коммутативны. Это условие выполняется в случае q_1, \dots, q_k , а при $l=1$, $R_1=\mathbf{H}$ оно даже беспредметно.

Итак, постулируем W. для любых коммутирующих операторов R_1, \dots, R_l . Тогда $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ взаимно коммутируют и, следо-

¹¹⁹⁾ В IV. 1 мы обсудим более обстоятельно вопрос относительно этого соответствия, сопоставляющего каждой физической величине эрмитов оператор. Пока же мы знаем лишь на основании I. 2, что операторы q_1, \dots, q_k соответствуют координатам, операторы $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$ соответствуют импульсам, а «оператор энергии» \mathbf{H} — энергии.

вательно, $E_1(I_1) \dots E_l(I_l)$ будет проекционным оператором (*теорема 14.* в II. 4), а рассматриваемая вероятность принимает вид

$$W = \|E_1(I_1) \dots E_l(I_l)\varphi\|^2 = (E_1(I_1) \dots E_l(I_l)\varphi, \varphi)$$

(*теорема 12.* в II. 4.).

Прежде чем идти дальше, надо установить некоторые свойства W , которые должны иметь место в любой разумной статистической теории.

1. Порядок утверждений безразличен.

2. Пустые утверждения, т. е. такие, для которых I_j есть интервал $\{-\infty, +\infty\}$, можно вставлять по желанию, не изменяя W , ибо их вклад сводится лишь к множителю

$$E_j(I) = E(+\infty) - E(-\infty) = 1 - 0 = 1.$$

3. Выполняется теорема сложения вероятностей, т. е. если мы разобьем интервал I_j на два интервала I'_j, I''_j , то старая вероятность будет суммой двух новых. Действительно, пусть I_j, I'_j, I''_j обозначают соответственно интервалы $\{\lambda', \lambda''\}, \{\lambda', \lambda\}, \{\lambda, \lambda''\}$, тогда

$$E(\lambda'') - E(\lambda') = (E(\lambda) - E(\lambda')) + (E(\lambda'') - E(\lambda)),$$

т. е. $E(I_j) = E(I'_j) + E(I''_j)$, что в силу второй из приведенных выше форм W (линейной по $E_1(I_1) \dots E_j(I_j) \dots E_l(I_l)$) и дает аддитивность вероятностей.

4. Для абсурдных утверждений (один из I_j пуст) $W = 0$, поскольку в этом случае соответствующее $E_j(I_j) = 0$. Для тривиально справедливых предложений (все I_j равны $\{-\infty, +\infty\}$) $W = 1$, поскольку тогда все $E_j(I_j) = 1$, $W = \|\varphi\|^2 = 1$. Всегда имеет место неравенство $0 \leq W \leq 1$ в силу *теоремы 13.* из II. 4.

Наконец, заметим, что W содержит утверждение: величина R_j может принимать лишь свои собственные значения, т. е. числа из ее спектра. Действительно, если интервал I_j , равный $\{\lambda', \lambda''\}$, лежит вне спектра, то $E_j(\lambda)$ постоянно в нем и, значит,

$$E_j(I_j) = E_j(\lambda'') - E_j(\lambda') = 0,$$

откуда следует, что $W = 0$.

Положим теперь $l = 1$ и обозначим R_1 просто через R . Пусть \mathfrak{R} — та физическая величина, которой сопоставляется оператор R (см. прим. ¹¹⁹). Пусть $F(\lambda)$ — произвольная функция. Требуется вычислить математическое ожидание $F(\mathfrak{R})$.

Для этой цели разделим интервал $\{-\infty, +\infty\}$ на последовательность подинтервалов $\{\lambda_n, \lambda_{n+1}\}$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ Вероятность того, что \mathfrak{R} лежит в подинтервале $\{\lambda_n, \lambda_{n+1}\}$, будет

$$(\{E(\lambda_{n+1}) - E(\lambda_n)\}\varphi, \varphi) = (E(\lambda_{n+1})\varphi, \varphi) - (E(\lambda_n)\varphi, \varphi).$$

и математическое ожидание $F(\mathfrak{R})$ оказывается, следовательно, равным сумме

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} F(\lambda'_n) \{(E(\lambda_{n+1})\varphi, \varphi) - (E(\lambda_n)\varphi, \varphi)\},$$

если λ'_n является надлежащим промежуточным значением из подинтервала $\{\lambda_n, \lambda_{n+1}\}$. Начнем теперь выбирать точки подразделения $\dots, \lambda_{-2}, \lambda_{-1}, \lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots$ все более и более близкими, тогда эта сумма будет сходиться к интегралу Стильтеса

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(\lambda) d(E(\lambda)\varphi, \varphi).$$

Поэтому рассматриваемое математическое ожидание также равно этому интегралу. Но в силу общего определения операторной функции в II. 8 этот интеграл равен $(F(R)\varphi, \varphi)$. Следовательно, мы получаем:

(E₁.) Пусть \mathfrak{R} — произвольная физическая величина, R — ее оператор (см. прим. ¹¹⁹), а $F(\lambda)$ — произвольная функция. Тогда для математического ожидания $F(\mathfrak{R})$ в состоянии φ выполняется

$$Erw(F(\mathfrak{R}); \varphi) = (F(R)\varphi, \varphi).$$

В частности, если мы положим $F(\lambda) = \lambda$, то будет:

(E₂.) Пусть \mathfrak{R}, R будут как и раньше. Тогда для математического ожидания \mathfrak{R} в состоянии φ имеем

$$Erw(\mathfrak{R}; \varphi) = (R\varphi, \varphi).$$

Перейдем теперь к исследованию связей между W , E_1 , E_2 .

Мы вывели E_1 из W , и E_2 из E_1 .

Если обозначить оператор величины $F(\mathfrak{R})$ через S , то сравнение E_1 с E_2 даст нам

$$(S\varphi, \varphi) = (F(R)\varphi, \varphi)$$

для любого состояния φ , т. е. для всех φ с $\|\varphi\| = 1$. Следовательно, и вообще

$$(Sf, f) = (F(R)f, f)$$

(для $f = 0$ это очевидно, а в остальных случаях $\varphi = \frac{1}{\|f\|}f$), значит, также

$$(Sf, g) = (F(R)f, g)$$

(заменить f на $\frac{f+g}{2}$ и на $\frac{f-g}{2}$ и результаты вычесть — получим равенство вещественных частей; беря if, g вместо f, g — мнимых

частей). Таким образом, должно быть $S = F(R)$. Сформулируем этот важный результат отдельно.

(F.) Если величине \mathfrak{R} соответствует оператор R , то величине $F(\mathfrak{R})$ должен соответствовать оператор $F(R)$.

В предположении F , однако, E_1 очевидным образом следует из E_2 .

Поэтому (предполагая F), E_1 и E_2 являются эквивалентными утверждениями. Покажем, что они эквивалентны также и W . Поскольку они следуют из W , то остается лишь убедиться, что W следует из E_1 или из E_2 .

Пусть R_1, \dots, R_l — взаимно коммутирующие операторы, принадлежащие соответственно величинам $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$. Согласно II. 10, они являются функциями одного эрмитова оператора R :

$$R_1 = F_1(R), \dots, R_l = F_l(R).$$

Примем, что R также принадлежит некоторой величине \mathfrak{R} . (Этим самым допускается, что любой величине \mathfrak{R} принадлежит некоторый [гипермаксимальный] эрмитов оператор R и наоборот. Ср. прим.¹¹⁹⁾ на стр. 151 и раздел IV. 2.) Тогда благодаря F ,

$$\mathfrak{R}_1 = F_1(\mathfrak{R}), \dots, \mathfrak{R}_l = F_l(\mathfrak{R}).$$

Допустим теперь, что I_1, \dots, I_l — интервалы, о которых говорится в W , и

$$G_j(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{для } \lambda \text{ из } I_j, \\ 0 & \text{для } \lambda \text{ вне } I_j \end{cases} \quad (j = 1, \dots, l).$$

Положим

$$H(\lambda) = G_1(F_1(\lambda)) \dots G_l(F_l(\lambda))$$

и образуем величину

$$\Theta = H(\mathfrak{R}).$$

Если \mathfrak{R}_j лежит в I_j , т. е. $F_j(\mathfrak{R})$ лежит в I_j , то $G_j(F_j(\mathfrak{R}))$ равняется 1; в остальных случаях оно равно 0. Таким образом, $\Theta = H(\mathfrak{R})$ равно 1, если все \mathfrak{R}_j лежат в своих I_j ($j = 1, \dots, l$), в остальных случаях — это 0. Математическое ожидание Θ равно, стало быть, вероятности W того, что \mathfrak{R}_1 лежит в $I_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ лежит в I_l . Отсюда

$$W = \operatorname{Erw}(\Theta, \varphi) = (H(R)\varphi, \varphi) =$$

$$= (G_1(F_1(R)) \dots G_l(F_l(R))\varphi, \varphi) = (G_1(R_1) \dots G_l(R_l)\varphi, \varphi).$$

Обозначим снова разложение единицы, относящееся к R_j , через $E_j(\lambda)$, и пусть I_j — интервал $\{\lambda'_j, \lambda''_j\}$. Тогда, на основании сказанного

в конце II. 8, в принятых там обозначениях

$$G_j(\lambda) = e_{\lambda_j''}(\lambda) - e_{\lambda_j'}(\lambda),$$

$$G_j(R_j) = e_{\lambda_j''}(R_j) - e_{\lambda_j'}(R_j) = E_j(\lambda_j'') - E_j(\lambda_j') = E_j(I_j)$$

и, значит,

$$W = (E_1(I_1) \dots E_l(I_l) \varphi, \varphi).$$

Но это как раз и есть W .

Вследствие простоты формулировки, утверждения E_2 . и F . особенно удобны как основа, на которой строится вся теория. Мы видели, что наиболее общее возможное вероятностное утверждение W . следует из них, но утверждение W . обладает двумя замечательными особенностями:

1. W . является статистическим, а не причинным утверждением, т. е. из него не следует, какие значения принимают величины $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ в состоянии φ , но лишь с какими вероятностями эти величины принимают все возможные значения.

2. На вопрос в постановке, свойственной W ., нельзя ответить для произвольных величин $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$, но только для таких, для которых соответствующие операторы R_1, \dots, R_l коммутируют друг с другом.

Обсудить значение этих двух фактов будет нашей ближайшей задачей.

2. Статистическая интерпретация

Классическая механика представляет собой причинную дисциплину, т. е. если состояние описываемой ею системы известно со всей подробностью, — для чего в случае k степеней свободы необходимо задать $2k$ чисел: k координат q_1, \dots, q_k конфигурационного пространства и k их производных по времени $\frac{dq_1}{dt}, \dots, \frac{dq_k}{dt}$ или же, вместо последних, k импульсов p_1, \dots, p_k , — то значение любой физической величины (энергии, момента и пр.) можно определить единственным образом и численно точно. Несмотря на это, существует и статистический метод исследования классической механики, но он является, так сказать, лишь роскошью или приправой. А именно, если нам известны не все $2k$ фиксирующих состояние параметра ($q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$), но лишь часть из них (причем даже эти последние могут быть известны не точно), то можно, у средняя каким-нибудь способом по параметрам, оставшимся неизвестными, сделать по крайней мере статистические утверждения относительно всех физических величин. Это же справедливо и для прошлых или будущих состояний системы: если известны $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$

в момент $t = t_0$, то с помощью уравнений движения классической механики можно (причинным образом) вычислить состояние в любой другой момент t ; но если известны лишь некоторые из параметров, то надо усреднить по остальным, и о состояниях в другие моменты времени¹²⁰⁾ можно делать уже лишь статистические утверждения.

Статистические утверждения, с которыми мы сталкиваемся в квантовой механике, имеют другой характер. Здесь в случае k степеней свободы состояние описывается волновой функцией $\varphi(q_1, \dots, q_k)$, т. е. точкой φ надлежащим образом реализованного \mathfrak{M}_∞ ($\|\varphi\| = 1$ — численный множитель абсолютной величины 1 несуществен). И хотя мы считаем поэтому, что задание φ полностью определяет состояние, оно тем не менее делает возможными лишь статистические утверждения о значениях физических величин.

Впрочем, эта статистичность ограничена предсказаниями значений физических величин, в то время как прошлые и будущие состояния φ_t вычисляются из $\varphi_{t_0} = \varphi$ причинным образом. Это позволяет сделать временное уравнение Шредингера (ср. I. 2), так как

$$\varphi_{t_0} = \varphi, \quad \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t = -H\varphi_t$$

определяют всю эволюцию состояния φ_t . Решение этого дифференциального уравнения можно получить даже в явном виде

$$\varphi_t = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (t-t_0) H} \varphi$$

$\left(e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (t-t_0) H} \text{ унитарно } 121 \right)$. (В этой формуле предполагается, что H не зависит от времени, но φ_t определяется однозначно и для

¹²⁰⁾ Хорошую иллюстрацию к этим соотношениям дает кинетическая теория газов.

Один моль (32 г) кислорода содержит $6 \cdot 10^{23}$ молекул кислорода и является, учитывая, что каждая молекула O_2 состоит из двух атомов кислорода (внутренней структурой которых мы пренебрежем, рассматривая их как точечные массы с тремя степенями свободы у каждой), механической системой с $2 \cdot 3 \cdot 6 \cdot 10^{23} = 36 \cdot 10^{23} = k$ степенями свободы. Итак, знание $2k$ параметров позволило бы описать его поведение причинно, но теория газов использует лишь два: давление и температуру, которые являются определенными, сложными, функциями этих $2k$ параметров.

Поэтому она может делать лишь статистические (вероятностные) утверждения. То, что они во многих случаях оказываются почти причинными, т. е. соответствующие вероятности — близкими к 0 или 1, не меняет принципиального положения вещей.

¹²¹⁾ Пусть $F_t(\lambda)$ — зависящая от времени функция, $\frac{\partial}{\partial t} F_t(\lambda) = G_t(\lambda)$, и пусть H — эрмитов оператор, тогда $\frac{\partial}{\partial t} F_t(H) = G_t(H)$, поскольку $\frac{\partial}{\partial t}$ получается вычитанием, делением и переходом к пределу. Если $F_t(\lambda) =$

зависящего от времени H , так как наше дифференциальное уравнение первого порядка, только тогда нет больше простых формул для решения.)

Если желать объяснить акаузальный характер связи между φ и значениями физических величин по примеру классической механики, то, очевидно, естественно понимать его следующим образом: На самом деле φ вовсе не определяет состояния во всех деталях, напротив, чтобы узнать его полностью, необходимо задать дополнительные числа. Иными словами, у системы, помимо φ , имеются еще и другие характеризующие ее параметры или координаты. Будь все они известны, мы смогли бы указать значения всех физических величин точно и определенно; напротив, с одной только φ — точно так же как в классической механике на основе лишь некоторых из q_1, \dots, q_k , p_1, \dots, p_k — возможны только статистические утверждения. Такое понимание — это, конечно, гипотеза, попытка, ценность которой зависит от того, удастся ли в самом деле найти дополнительные координаты, добавляющиеся к φ , и построить с их помощью причинную теорию, находящуюся в согласии с опытом и приводящую при задании одной только φ (и усреднении по остальным координатам) снова к статистическим утверждениям квантовой механики.

Обычно эти гипотетические дополнительные координаты называют «скрытыми параметрами» или «скрытыми координатами», так как они должны были бы играть скрытую роль в сравнении с волновой функцией φ , которая только и раскрыта в настоящее время. Объяснение с помощью скрытых параметров уже свело в классической физике некоторые, казалось бы статистические, соотношения к причинным основаниям механики: характерным примером является кинетическая теория газов (ср. прим. ¹²⁰).

Вопрос о том, возможно ли объяснение этого типа с помощью скрытых параметров в квантовой механике, обсуждался не один раз. Тот взгляд, что на этот вопрос когда-нибудь будет получен положительный ответ, имеет и сейчас выдающихся представителей. Если бы он подтвердился, то сегодняшнюю форму теории пришлось бы

$$= e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (t-t_0)\lambda}, \text{ то это дает}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (t-t_0)H} \right) = -\frac{2\pi i}{\hbar} H e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (t-t_0)H}$$

и после применения к φ приводит к желаемому дифференциальному уравнению.

Так как $|F_t(\lambda)| = 1$, $F_t(\lambda) \overline{F_t(\lambda)} = 1$, то $F_t(H) \{F_t(H)\}^* = 1$, т. е. наш оператор $F_t(H) = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (t-t_0)H}$ унитарен. Поскольку при $t = t_0$ он, очевидно, равен единице, то требование $\varphi_{t_0} = \varphi$ также выполнено.

объявить предварительной, поскольку описание состояний с помощью волновых функций оказалось бы тогда существенно неполным *).

Ниже будет показано (IV. 2), что введение скрытых параметров заведомо невозможно, во всяком случае без фундаментальных изменений существующей теории. Пока же подчеркнем только, что волновая функция φ тем весьма существенно отличается от частичной системы координат и импульсов $q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k$ классической механики, что зависимость φ от времени причинна, а не статистична: φ_{t_0} , как мы видели выше, определяет все φ_t однозначно.

До тех пор, пока более подробный анализ положений квантовой механики не позволит нам объективно доказать (в отрицательном смысле) возможность введения скрытых параметров (что делается в указанном выше месте), мы откажемся от возможности такого объяснения и станем на противоположную точку зрения, т. е. примиримся с тем фактом, что законы, управляющие элементарными процессами (т. е. законы квантовой механики), имеют статистическую природу. (Причинность в макромире может, во всяком случае, быть симулирована нивелирующим действием «закона больших чисел», который проявляется, когда многие элементарные процессы происходят одновременно. Сравни замечание в конце прим. ¹²⁰⁾ на стр. 156 и прим. ¹⁷⁵⁾ на стр. 243.) В соответствии с этим мы убеждаемся, что **W.** (или также **E₂.**) является наиболее всеобъемлющим утверждением относительно элементарных процессов.

Это понимание квантовой механики, принимающее ее статистические утверждения за истинную форму законов природы и отказывающееся от принципа причинности, и есть так называемая статистическая интерпретация. Она восходит к М. Богн'у ¹²²⁾ и является сейчас единственной последовательно проводимой интерпретацией квантовой механики, т. е. суммы нашего опыта относительно элементарных процессов. В дальнейшем мы будем придерживаться этой интерпретации, до тех пор пока не сможем приступить к более подробному обсуждению положения вещей.

3. Одновременная измеримость и измеримость вообще

Вторая замечательная особенность, отмеченная в конце III. 1, была связана с тем, что **W.** объясняло не только вероятности, с которыми некоторая величина \mathfrak{W} принимает те или иные числовые значения, но и указывало вероятностные взаимозависимости между

*) В настоящее время точка зрения, противоположная взглядам автора, разрабатывается группой de Broglie'я (Vigier, Lochak и др.) во Франции, а также Bohm'ом в Америке и Терлецким у нас. — Прим. ред.

¹²²⁾ Z. Physik 37 (1926). Все дальнейшее развитие (ср. прим. ²⁾ на стр. 10) основывается на этом представлении.

несколькими величинами $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ — $W.$, определяло вероятность того, что эти величины одновременно примут некоторые заданные значения (точнее, что эти значения попадут в некоторые интервалы I_1, \dots, I_l). (Все относится к заданному состоянию φ .) Но эти величины $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ были подчинены своеобразному ограничению: их операторы R_1, \dots, R_l должны были коммутировать. В случае же некоммутирующих R_1, \dots, R_l , напротив, $W.$ не давало совершенно никаких сведений о вероятностных взаимозависимостях между $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_l$ и его можно было использовать лишь для определения распределения вероятностей каждой из этих величин самой по себе, безотносительно к остальным.

Скорее всего, тут хотелось бы допустить, что утверждение $W.$ неполно и что должна существовать более общая формула, охватывающая и эти случаи. Действительно, даже если квантовая механика и дает лишь статистические сведения о природе, все же мы могли бы по меньшей мере ожидать от нее описания не только статистики индивидуальных величин, но и корреляции между ними.

Однако в противовес этому представлению, которое на первый взгляд кажется разумным, мы убедимся вскоре, что подобное обобщение $W.$ невозможно и что наряду с формальными (основанными на структуре математического аппарата теории) в пользу ограничения говорят и веские физические причины. Необходимость этого ограничения и его физическое толкование позволят нам даже глубже заглянуть в сущность природы элементарных процессов.

Прежде всего, сошлемся на важный эксперимент, поставленный Compton'ом и Simons'ом еще до создания квантовой механики¹²³⁾. В этом опыте свет рассеивался на электронах и количественное изучение процесса рассеяния состояло в том, что рассеянный свет и рассеянные электроны перехватывались и проводилось измерение их импульсов и энергий, т. е. между квантами света и электронами происходили столкновения, и наблюдатель мог, измеряя пути после столкновения, проверить, удовлетворяются ли законы упругого удара. (Нужно рассматривать только упругие удары, так как нельзя представить себе, чтобы кванты света или электроны могли воспринимать энергию в форме, отличной от кинетической. Ведь весь опыт говорит за то, что и те и другие являются однозначными жестко установленными структурами. Естественно, что расчет столкновения нужно вести релятивистски¹²³⁾.) Такой математический контроль был возможен на самом деле: так как траектории до столкновения были известны, а после столкновения наблюдались, то тем самым задача о столкновениях была переопределена. Ведь чтобы фиксировать

¹²³⁾ Phys. Rev. 26 (1925). Сравни также исчерпывающий обзор W. Bothe в Handbuch der Physik 23 (Quanten), Berlin, 1926, глава 3, в особенности § 73.

ее с точки зрения механики, достаточно двух из этих четырех путей и «центральной линии» удара (направления передачи импульса), т. е., во всяком случае, достаточно знать три пути, а четвертый можно использовать для проверки. Эксперимент полностью подтвердил механические законы удара.

Если считать законы удара справедливыми, а траектории до столкновения известными, то этот результат можно сформулировать также следующим образом. Как измерения траектории кванта света после столкновения, так и измерения такой траектории для электрона достаточно, чтобы определить место и центральную линию столкновения. Эксперимент Комптона — Симонса показывает, что оба эти наблюдения дают один и тот же результат.

Обобщая, можно сказать: одна и та же физическая величина (именно, какая-либо координата точки столкновения или же направление центральной линии) измеряется двумя разными способами (с помощью захвата квантов света или электронов), а результат получается всегда один и тот же.

Эти два измерения происходят не совсем одновременно (квант света и электрон приходят не сразу, и надлежащим изменением измерительной аппаратуры любой из них можно поймать первым — конечно, речь идет о 10^{-9} — 10^{-10} сек). Назовем более раннее измерение M_1 , а более позднее — M_2 , а измеряемую величину — \mathfrak{M} . Теперь существенно следующее. Хотя вся установка такого рода, что до измерения можно делать только статистические утверждения относительно \mathfrak{M} , т. е. относительно M_1 и M_2 (см. ссылку в прим. ¹²³), статистическая корреляция между M_1 и M_2 оказывается совершенно резкой (причинной): значение \mathfrak{M} для M_1 наверняка равно значению \mathfrak{M} для M_2 . Итак, до измерений M_1 и M_2 оба результата совершенно неопределены. После же выполнения M_1 (но еще не M_2) результат M_2 уже определен причинным и единственным образом.

С принципиальной точки зрения можно сказать: а priori мыслыми три степени причинности или непричинности. Во-первых, значение величины \mathfrak{M} могло бы быть полностью статистическим, т. е. результат измерения можно было бы предсказать лишь статистически; и если бы непосредственно вслед за первым было выполнено второе измерение, то оно могло бы опять обладать некоторым распределением, совершенно не зависящим от значения, найденного при первом измерении, например столь же широким, как и у первого ¹²⁴). Во-вторых, мыслимо, что значение величины \mathfrak{M} может иметь дисперсию в первом измерении, но что каждое непосредственно за ним следующее измерение вынуждено

¹²⁴⁾ Одна статистическая теория элементарных процессов была создана Bohr'ом, Kramers'ом и Slater'ом на основе таких представлений. См. Z. Physik 24 (1924), а также прим. ¹²³) на стр. 159. Эксперимент Комптона — Симонса можно рассматривать как опровержение этого взгляда.

давать результат, согласующийся с первым. В третьих, \mathfrak{M} могло бы быть определено причинным образом с самого начала.

Эксперимент Комптона — Симонса показывает теперь, что в статистической теории возможен лишь второй случай. Поэтому, если первоначально система находилась в некотором состоянии, в котором значение \mathfrak{M} не может быть предсказано с достоверностью, то это состояние переходит при измерении M величины \mathfrak{M} (в вышеприведенном примере — M_1) в другое состояние: а именно в такое, в котором значение величины \mathfrak{M} однозначно определено. Кроме того, новое состояние, в которое M переводит систему, зависит не только от установки для получения M , но также от результата измерения M (который не может быть предсказан причинным образом в первоначальном состоянии), поскольку значение \mathfrak{M} в новом состоянии должно быть как раз равно этому M -результату.

Пусть теперь \mathfrak{M} — некоторая величина, оператор которой R имеет чисто дискретный спектр $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ с соответствующими собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, которые, следовательно, образуют полную ортонормированную систему. Кроме того, пусть каждое собственное значение будет простым (т. е. кратности 1, см. II. 6), т. е. $\lambda_\mu \neq \lambda_v$ при $\mu \neq v$. Предположим, что мы измерили \mathfrak{M} и нашли значение λ^* . В каком состоянии окажется система после этого измерения?

В силу предыдущей дискуссии это состояние φ должно быть таким, чтобы возобновленное измерение \mathfrak{M} давало бы результат λ^* с достоверностью. (Конечно, это измерение нужно делать немедленно,

так как через τ секунд φ перейдет в $e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \mathfrak{H} \tau} \varphi$. Ср. III. 2, \mathfrak{H} — это оператор энергии.)

На этот вопрос — когда измерение величины \mathfrak{M} в состоянии φ с достоверностью дает значение λ^* — мы ответим в общем случае, без ограничительных предположений относительно оператора R .

Пусть $E(\lambda)$ — относящееся к R разложение единицы, а I — интервал $\{\lambda', \lambda''\}$. Наше допущение можно сформулировать и так: величина \mathfrak{M} попадает в интервал I с вероятностью 0, если этот интервал не содержит λ^* , или с вероятностью 1, если λ^* принадлежит I , т. е. если $\lambda' < \lambda^* \leq \lambda''$.

Согласно W , это означает, что $\|E(I)\varphi\|^2 = 1$, или, так как $\|\varphi\| = 1$, что $\|E(I)\varphi\| = \|\varphi\|$. Так как $E(I)$ — проекционный оператор, так же как и $1 - E(I)$ (теорема 13., II. 4), то

$$\|\varphi - E(I)\varphi\|^2 = \|\varphi\|^2 - \|E(I)\varphi\|^2 = 0,$$

$$\varphi - E(I)\varphi = 0,$$

$$E(\lambda'')\varphi - E(\lambda')\varphi = E(I)\varphi = \varphi.$$

Предельный переход $\lambda' \rightarrow -\infty$ дает $E(\lambda'')\varphi = \varphi$, а переход $\lambda'' \rightarrow +\infty$ дает $E(\lambda')\varphi = 0$ (ср. §1., II. 7). Поэтому

$$E(\lambda)\varphi = \begin{cases} \varphi & \text{для } \lambda \geq \lambda^*, \\ 0 & \text{для } \lambda < \lambda^*. \end{cases}$$

Но, согласно II. 8, это условие как раз характеризует $R\varphi = \lambda^*\varphi$.

Другой способ доказать, что $R\varphi = \lambda^*\varphi$, основан на E_1 . (т. е. на E_2). То обстоятельство, что величина \mathfrak{N} принимает с достоверностью значение λ^* , означает, что математическое ожидание величины $(\mathfrak{N} - \lambda^*)^2$ равно 0. Это означает, что оператор $F(R)$, где $F(\lambda) = (\lambda - \lambda^*)^2$, т. е. оператор $(R - \lambda^* \cdot 1)^2$, имеет то же математическое ожидание. Поэтому, должно быть

$$\begin{aligned} ((R - \lambda^* \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) &= ((R - \lambda^* \cdot 1)\varphi, (R - \lambda^* \cdot 1)\varphi) = \\ &= \|(R - \lambda^* \cdot 1)\varphi\|^2 = \|R\varphi - \lambda^*\varphi\|^2 = 0, \end{aligned}$$

т. е. $R\varphi = \lambda^*\varphi$.

Итак, мы видим, что в частном случае, который мы рассматривали прежде, должно быть $R\varphi = \lambda^*\varphi$. Как было указано в II. 6, это приводит к следствию, что λ^* должно равняться одному из λ_μ (так как $\|\varphi\| = 1$, то $\varphi \neq 0$), а $\varphi = a\varphi_\mu$. Так как $\|\varphi\| = \|\varphi_\mu\| = 1$, то и $|a|$ должно быть = 1, и, значит, его можно опустить, не изменяя состояния. Итак, $\lambda^* = \lambda_\mu$, $\varphi = \varphi_\mu$ для какого-либо из $\mu = 1, 2, \dots$ (утверждение относительно λ^* можно было бы получить и непосредственно из W , но не утверждение о φ !).

Итак, при сделанных допущениях относительно оператора R измерение величины \mathfrak{N} имеет своим следствием превращение любого состояния ψ в одно из состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, соответственно связанных с результатами измерения $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ Вероятности этих переходов равны поэтому вероятностям измерения $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, так что их можно вычислить из W .

Вероятность того, что значение величины \mathfrak{N} лежит в интервале I , дается тогда, согласно W , выражением $\|E(I)\psi\|^2$. Отсюда, если учсть, что, согласно II. 8, $E(I) = \sum_{\lambda_n \in I} P_{[\varphi_n]}$, будет следовать

$$W = \|E(I)\psi\|^2 = (E(I)\psi, \psi) = \sum_{\lambda_n \in I} (P_{[\varphi_n]}\psi, \psi) = \sum_{\lambda_n \in I} |(\psi, \varphi_n)|^2.$$

Значит, можно ожидать, что вероятность найти λ_n равна $|(\psi, \varphi_n)|^2$. Если можно выбрать интервал I так, чтобы он содержал только одно λ_m , которое тогда и есть как раз λ_n , то высказанное предположение непосредственно следует из вышеприведенной формулы. Если же это не так (т. е. если другие λ_m сгущаются к λ_n), то можно рассуждать, например, следующим образом: Пусть $F(\lambda) = 1$ для $\lambda = \lambda_n$ и = 0 в остальных случаях. Тогда искомая вероятность W_n

будет математическим ожиданием величины $F(\mathfrak{R})$ и, согласно E_2 . (или E_1), равна $(F(R)\psi, \psi)$. Ну, а согласно определению (II. 8),

$$(F(R)\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\lambda) d(\|E(\lambda)\psi\|^2).$$

Вспоминая определение интеграла Стильтеса, легко заметить, что это выражение равно 0, если $E(\lambda)\psi$ непрерывно (по λ !) при $\lambda = \lambda_n$ и, вообще говоря, равно скачку (монотонно возрастающей) λ -функции $\|E(\lambda)\psi\|^2$ в точке $\lambda = \lambda_n$. Но этот скачок равен $\|P_{\mathfrak{M}}\psi\|^2$, где \mathfrak{M} — замкнутое линейное многообразие, растягиваемое всеми решениями уравнения $R\psi = \lambda_n\psi$ (ср. II. 8). В рассматриваемом случае $\mathfrak{M} = [\varphi_n]$ и поэтому

$$W_n = \|P_{[\varphi_n]}\psi\|^2 = |(\psi, \varphi_n)|^2.$$

Мы ответили таким образом при сделанных предположениях относительно оператора R на вопрос о том, «что» происходит при измерении его величины \mathfrak{R} . Конечно, вопрос «как» остается пока невыясненным. Этот разрывный, скачкообразный переход из ψ в одно из состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (которые не зависят от ψ , поскольку ψ входит лишь в соответствующие вероятности $W_n = |(\psi, \varphi_n)|^2$, $n = 1, 2, \dots$ этих скачков) — это, конечно, не переход типа, описываемого времененным уравнением Шредингера. Ведь это уравнение всегда приводит к непрерывному изменению ψ , при котором конечный результат однозначно определен и зависит от ψ (ср. сказанное в III. 2). В дальнейшем мы попытаемся перебросить мост через эту пропасть (ср. VI)¹²⁵.

Предположим опять, что оператор R обладает чисто дискретным спектром, но не будем больше требовать, чтобы все собственные значения были бы простыми. Тогда снова можно образовать последовательности $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, но среди λ_n могут встречаться равные. После измерения величины \mathfrak{R} с достоверностью осуществляется состояние φ , для которого $R\varphi = \lambda^*\varphi$ (λ^* — результат измерения). Отсюда будет следовать, что λ^* равно одному из λ_n , но относительно φ можно сказать лишь следующее. Обозначим те из λ_n , которые равны λ^* , через $\lambda_{n_1}, \lambda_{n_2}, \dots$ (их число конечно или бесконечно). Тогда

$$\varphi = \sum_v a_v \varphi_{n_v}.$$

(Если имеется бесконечно много n_v , то сумма $\sum_v |a_v|^2$ должна быть конечной.) Две таких φ описывают одно и то же состояние, только

¹²⁵⁾ То обстоятельство, что эти скачки связаны с представлением о «квантовых скачках» старой теории квант Бора, обнаружил Jordan Z. Physik 40 (1924).

если они отличаются лишь численным множителем, т. е. если отношение $a_1 : a_2 : \dots$ у них одно и то же. Поэтому, коль скоро имеется больше чем одно n , т. е. коль скоро собственное значение λ^* кратно, то состояние ψ после измерения не определяется однозначно и знанием результата измерения.

Вероятность значения λ^* (согласно W , или, соответственно, E_1 или E_2) вычисляется в точности так же, как и раньше. Она равна

$$W(\lambda^*) = \sum_{\lambda_n=\lambda^*} |\langle \psi, \varphi_n \rangle|^2 = \sum_v |\langle \psi, \varphi_{n_v} \rangle|^2.$$

Если спектр оператора R не чисто дискретен, то возникает следующая ситуация.

Все решения f уравнения $Rf = \lambda f$ растягивают замкнутое линейное многообразие \mathfrak{M}_λ , все \mathfrak{M}_λ вместе — в свою очередь многообразие $\bar{\mathfrak{M}}$ и для несуществования чисто дискретного спектра характерно $\bar{\mathfrak{M}} \neq \mathfrak{N}_\infty$, т. е. $\bar{\mathfrak{M}} = \mathfrak{N}_\infty - \bar{\mathfrak{M}} \neq (0)$ (ср. по этому поводу, а также и по поводу нижеследующего, II. 8). $\mathfrak{M}_\lambda \neq (0)$ в крайнем случае для некоторой последовательности λ , и такие λ образуют дискретный спектр оператора R . Когда мы измеряем величину \mathfrak{N} в состоянии ψ , то вероятность того, что в результате измерения будет получено значение λ^* , равна

$$W(\lambda^*) = \|P_{\mathfrak{M}_{\lambda^*}}\psi\|^2 = (P_{\mathfrak{M}_{\lambda^*}}\psi, \psi).$$

Разумнее всего доказать это с помощью применявшейся выше аргументации, основанной на E_2 . (или E_1) и на функции

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{для } \lambda = \lambda^*, \\ 0 & \text{для } \lambda \neq \lambda^*. \end{cases}$$

Вероятность того, что значением величины \mathfrak{N} окажется некоторое λ^* из дискретного спектра \mathfrak{B} оператора R , будет соответственно равна

$$W = \sum_{\lambda^* \in \mathfrak{B}} (P_{\mathfrak{M}_{\lambda^*}}\psi, \psi) = (P_{\bar{\mathfrak{M}}}\psi, \psi) = \|P_{\bar{\mathfrak{M}}}\psi\|^2,$$

в чем можно убедиться непосредственно с помощью функции

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{для } \lambda^* \text{ из } \mathfrak{B}, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Если, однако, \mathfrak{N} измеряется точно, то после этого должно осуществиться состояние ψ , удовлетворяющее $R\psi = \lambda^*\psi$, и поэтому результат измерения λ^* должен принадлежать \mathfrak{B} , — вероятность удачи точного измерения равна поэтому (в лучшем случае) $\|P_{\bar{\mathfrak{M}}}\psi\|^2$. Но это число не всегда равно 1 и в случае ψ из $\bar{\mathfrak{M}}$ даже равно 0, значит, точное измерение возможно не всегда.

Мы видели, что величина \mathfrak{N} всегда (т. е. в любом состоянии ψ) может быть точно измерена тогда и только тогда, когда эта величина обладает дискретным спектром. Если она не обладает дискретным спектром, то она может быть измерена лишь с ограниченной точностью. Именно, можно разделить числовую прямую $-\infty < \lambda < +\infty$ на интервалы $\dots, I^{(-2)}, I^{(-1)}, I^{(0)}, I^{(1)}, I^{(2)}, \dots$ (пусть точками деления будут $\dots, \lambda^{(-2)}, \lambda^{(-1)}, \lambda^{(0)}, \lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots$; $I^{(n)} = \{\lambda^{(n)}, \lambda^{(n+1)}\}$; максимальная длина интервала $\epsilon = \text{Max}(\lambda^{(n+1)} - \lambda^{(n)})$, расстояние между точками деления является тогда мерой точности) и указать, в каком интервале лежит величина \mathfrak{N} . Математическое рассмотрение этого процесса можно продолжить и дальше. Именно, пусть $F(\lambda)$ обозначает функцию (λ'_n — некоторое промежуточное значение из интервала $I^{(n)}$, выбираемое для каждого $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ произвольным, но в интересах дальнейшего, фиксированным образом):

$$F(\lambda) = \lambda'_n, \text{ если } \lambda \text{ лежит в } I^{(n)}.$$

Тогда приближенное измерение величины \mathfrak{N} будет эквивалентно точному измерению величины $F(\mathfrak{N})$. Значит,

$$\begin{aligned} F(R) &= \int_{-\infty}^{\infty} F(\lambda) dE(\lambda) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \int_{\lambda^{(n)}}^{\lambda^{(n+1)}} F(\lambda) dE(\lambda) = \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lambda'_n \int_{\lambda^{(n)}}^{\lambda^{(n+1)}} dE(\lambda) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \lambda'_n E(I^{(n)}). \end{aligned}$$

Очевидно, что для всех f из принадлежащего $E(I^{(n)})$ замкнутого линейного многообразия имеет место уравнение $F(R)f = \lambda'_n f$, т. е. для оператора $F(R)$ многообразие $\mathfrak{M}_{\lambda'_n}$ содержит это линейное многообразие. Следовательно, $P_{\mathfrak{M}_{\lambda'_n}} \geqq E(I^{(n)})$ и поэтому

$$P_{\mathfrak{M}} \geqq \sum_{n=-\infty}^{+\infty} P_{\mathfrak{M}_{\lambda'_n}} \geqq \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E(I^{(n)}) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (E(\lambda^{(n+1)}) - E(\lambda^{(n)})) = 1 - 0 = 1.$$

Отсюда следует, что

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} P_{\mathfrak{M}_{\lambda'_n}} = P_{\mathfrak{M}} = 1, \quad P_{\mathfrak{M}_{\lambda'_n}} = E(I^{(n)}),$$

т. е. $F(R)$ имеет чисто дискретный спектр, который состоит из λ'_n .

Поэтому $F(\mathfrak{R})$ действительно точно измерима, и вероятность того, что ее значение равно λ'_n , т. е. что значение \mathfrak{R} лежит в $I^{(n)}$, равна

$$\|P_{\mathfrak{R}_{\lambda'_n}} \psi\|^2 = \|E(I^{(n)})\psi\|^2,$$

в согласии с утверждением **W.** для \mathfrak{R} .

Этот результат может быть интерпретирован и физически, и при этом выясняется хорошее согласие теории с обычной физической наглядной точкой зрения.

В свойственном классической механике методе рассмотрения (без каких бы то ни было квантовых условий) хотя и приписывают каждой величине \mathfrak{R} в любом состоянии совершенно определенное значение, но в то же время считают, что любой мыслимый измерительный аппарат, как следствие несовершенства человеческой способности наблюдать (которая позволяет прочесть указание стрелки или же локализовать почернение фотографической пластиинки лишь с ограниченной точностью), может дать это значение лишь в пределах некоторой, никогда не исчезающей, ошибки. Правда, пределы этой ошибки удается за счет достаточного уточнения метода измерения сдвинуть сколь угодно близко к 0, но точно нулем они никогда не будут. Можно ожидать, что это будет так же и в квантовой теории для тех величин \mathfrak{R} , которые, согласно сложившимся для них (в особенности до открытия квантовой механики) наглядным представлениям, не квантованы, например, для декартовых координат электрона (которые могут принимать любое значение от $-\infty$ до $+\infty$ и операторы которых имеют непрерывный спектр). С другой стороны, для тех величин, которые (согласно нашему наглядному представлению о них) «квантованы», верно обратное положение: поскольку они способны принимать лишь дискретные значения, то достаточно наблюдать их лишь с такой точностью, чтобы не возникало более сомнения, какое именно из этих «квантованных» значений было наблюдено, — оно-то уж наверняка будет абсолютно точным. Например, если мы знаем о водородном атоме, что у него меньше энергии, чем нужно для второго снизу энергетического уровня, то мы знаем его энергию с абсолютной точностью: это энергия низшего уровня.

Но такое деление на «квантованные» и «неквантованные» величины соответствует, как мы видели при анализе матричной теории (ср. I. 2 и II. 6), делению на величины \mathfrak{R} с оператором R , обладающим чисто дискретным спектром, и такие, для которых это не имеет места. И как раз для величин первого рода, и только для них, мы нашли возможность абсолютно точного наблюдения, тогда как величины второго рода можно наблюдать лишь со сколь угодно хорошей (но никогда не абсолютной) точностью¹²⁶⁾.

¹²⁶⁾ Во всех таких случаях мы делаем предположение, что структура наблюдаемой системы и измерительной аппаратуры (т. е. все действующие

(Отметим кстати, что упомянутое во введении, равно как и в I. 3, привлечение «несобственных» или не принадлежащих гильбертову пространству собственных функций, — ср. также II. 8, в особенности прим. 8⁴⁾, 8⁶⁾ на стр. 98 и 101, — как раз здесь передает действительность хуже, чем наш метод, вводя нас в заблуждение о существовании таких состояний, в которых величины с непрерывными спектрами принимают в точности определенные значения, хотя как раз этого никогда не бывает. Хотя такие идеализации и предлагались много-кратно, мы считаем, что их надо отклонить и по этой причине, не говоря уже об их математической несостоятельности.)

Тем самым мы достигли некоторой, пока достаточной, ясности в вопросе о процессах, происходящих при измерении одной величины, и мы можем обратиться к одновременному измерению нескольких величин.

Пусть сперва \mathfrak{A} и \mathfrak{S} будут две величины с операторами R , S соответственно. Примем, что они одновременно измеримы. Что отсюда следует?

Будем сначала требовать абсолютно точной измеримости, так что оба оператора R и S должны будут обладать чисто дискретными спектрами: $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ и μ_1, μ_2, \dots Пусть соответствующие полные ортонормированные системы состоят из собственных функций $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и ψ_1, ψ_2, \dots

Чтобы начать обсуждение с простейшего случая, мы предположим сперва, что у одного из этих операторов, скажем у R , есть только простые собственные значения, т. е. $\lambda_m \neq \lambda_n$ для $m \neq n$.

Если \mathfrak{A} и \mathfrak{S} измеряются одновременно, то после этого возникает состояние, в котором как \mathfrak{A} , так и \mathfrak{S} наверняка имеют только что измеренные значения, скажем $\lambda_{\bar{m}}$ и $\mu_{\bar{n}}$, а состояние ψ , которое тогда возникает, должно удовлетворять уравнениям $R\psi = \lambda_{\bar{m}}\psi$, $S\psi = \mu_{\bar{n}}\psi$. Из первого из них следует, что $\psi = \varphi_{\bar{m}}$ (с точностью до численного множителя, которым можно пренебречь), тогда как из второго — что $\psi = \sum_v a_v \psi_{n_v}$, если $\mu_{n_1}, \mu_{n_2}, \dots$ представляют собой все μ_n , равные $\mu_{\bar{n}}$. Если начальным состоянием было φ , то $\lambda_{\bar{m}}, \varphi_{\bar{m}}$ имеет

силовые поля и т. д.) известна точно и ищется лишь состояние, т. е. мгновенные значения координат. Если это (идеализированное) предположение окажется неверным, то, конечно, появятся дополнительные источники неточности.

Даже и в нашем методе описания неточного измерения содержалась некоторая идеализация. Мы предположили, что оно состоит в том, что мы с абсолютной достоверностью решаем, принадлежит рассматриваемое значение интервалу $I = \{\lambda', \lambda''\}$, $\lambda' < \lambda''$ или нет. На самом деле границы λ', λ'' размыты, т. е. необходимое решение происходит лишь с определенной вероятностью. Тем не менее наш метод описания представляется математически наиболее удобным, во всяком случае в настоящее время.

вероятность $|(\varphi, \varphi_m)|^2$. Для $\varphi = \varphi_m$ будет поэтому наверняка $\bar{m} = m$, так что для каждого m можно сказать, что φ_m равно сумме $\sum_n a_n \psi_n$, с равными μ_{n_1} , т. е. $S\varphi_m = \bar{\mu}\varphi_m$ (где $\bar{\mu} = \mu_{n_1} = \mu_{n_2} = \dots$). Следовательно, для $f = \varphi_m$ будет выполняться $RSf = SRf$ (обе части соотношения равны $\lambda_m \mu \varphi_m$). Так что это равенство справедливо также и для их линейных комбинаций и, если R и S непрерывны, то и для предельных точек этих комбинаций, т. е. для всех f . Следовательно, R и S коммутируют.

Если R и S не непрерывны, то рассуждать надо следующим образом. Разложения единицы $E(\lambda)$, $F(\mu)$, принадлежащие операторам R и S , определяются соотношениями

$$E(\lambda) = \sum_{\lambda_m \leq \lambda} P_{[\varphi_m]}, \quad F(\mu) = \sum_{\mu_n \leq \mu} P_{[\psi_n]}.$$

Следовательно, $F(\mu)\varphi_m = \varphi_m$ или $= 0$ в зависимости от того, $\mu \geqq$ или $<$ введенного выше $\bar{\mu}$. Далее, $E(\lambda)\varphi_m = \varphi_m$ или $= 0$ в зависимости от того, $\lambda \geqq$ или $< \lambda_m$. Поэтому в любом случае $E(\lambda)F(\mu)\varphi_m = F(\mu)E(\lambda)\varphi_m$ для всех φ_m . Отсюда, как и выше, следует коммутативность $E(\lambda)$, $F(\mu)$ и, значит (согласно II. 10), коммутативность R и S .

Но, согласно II. 10, существует полная ортонормированная система собственных функций, общих для R и S , т. е. можно принять, что $\varphi_m = \psi_m$. Так как $\lambda_m \neq \lambda_n$ для $m \neq n$, то можно построить функцию $F(\lambda)$, для которой

$$F(\lambda) = \begin{cases} \mu_n & \text{для } \lambda = \lambda_n, n = 1, 2, \dots, \\ & \text{произвольна при других значениях } \lambda, \end{cases}$$

и тогда $S = F(R)$, т. е. $\mathfrak{S} = F(\mathfrak{R})$. Это значит, что \mathfrak{R} и \mathfrak{S} не только измеримы одновременно, но каждое измерение \mathfrak{R} является также измерением \mathfrak{S} , поскольку \mathfrak{S} есть функция от \mathfrak{R} , т. е. \mathfrak{S} причинным образом определяется через \mathfrak{R} ¹²⁷⁾.

Перейдем теперь к более общему случаю, когда не делается никаких предположений относительно кратности собственных значений R , S . В этом случае мы применим совершенно другой метод.

Рассмотрим сначала величину $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$. Одновременное измерение \mathfrak{R} , \mathfrak{S} является также измерением $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$, так как сложение результатов измерений дает значение $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$. Вследствие этого математическое ожидание $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ в любом состоянии ψ является суммой математических ожиданий \mathfrak{R} и \mathfrak{S} . Заметим, что это имеет место независимо

¹²⁷⁾ Последнее предложение можно проверить с помощью W ! Разложение единицы, принадлежащие R и S , можно построить, следя II. 8.

от того, являются ли \mathfrak{R} и \mathfrak{S} статистически независимыми или же между ними существует какая-нибудь корреляция, так как закон

Математическое ожидание суммы = сумме математических ожиданий, как известно, справедлив всегда. Поэтому, если T есть оператор величины $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$, то рассматриваемое математическое ожидание равняется, с одной стороны, $(T\psi, \psi)$, а с другой —

$$(R\psi, \psi) + (S\psi, \psi) = ((R + S)\psi, \psi),$$

т. е. для любого ψ

$$(T\psi, \psi) = ((R + S)\psi, \psi).$$

Поэтому $T = R + S$. Следовательно, величине $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ соответствует оператор $R + S$ ¹²⁸). Таким же способом можно показать, что величина $a\mathfrak{R} + b\mathfrak{S}$ (a, b — вещественные числа) имеет оператор $aR + bS$. (Это следует и из первой формулы, если мы подставим $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ и R, S в функции $F(\lambda) = a\lambda, G(\mu) = b\mu$.)

Одновременное измерение $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ является также измерением величин

$$\frac{\mathfrak{R} + \mathfrak{S}}{2}, \left(\frac{\mathfrak{R} + \mathfrak{S}}{2}\right)^2, \frac{\mathfrak{R} - \mathfrak{S}}{2}, \left(\frac{\mathfrak{R} - \mathfrak{S}}{2}\right)^2, \left(\frac{\mathfrak{R} + \mathfrak{S}}{2}\right)^2 - \left(\frac{\mathfrak{R} - \mathfrak{S}}{2}\right)^2 = \mathfrak{R} \cdot \mathfrak{S}.$$

Операторами этих величин (если воспользоваться еще тем обстоятельством, что если T — оператор величины \mathfrak{T} , то у величины $F(\mathfrak{T})$ будет оператор $F(T)$, откуда у величины \mathfrak{T}^2 — оператор T^2) будут, следовательно,

$$\frac{R + S}{2}, \left(\frac{R + S}{2}\right)^2 = \frac{R^2 + S^2 + RS + SR}{4}, \quad \frac{R - S}{2},$$

$$\left(\frac{R - S}{2}\right)^2 = \frac{R^2 + S^2 - RS - SR}{4}, \quad \left(\frac{R + S}{2}\right)^2 - \left(\frac{R - S}{2}\right)^2 = \frac{RS + SR}{2}.$$

Это значит, что $\mathfrak{R} \cdot \mathfrak{S}$ имеет оператор $\frac{RS + SR}{2}$. Это справедливо также для всех $F(\mathfrak{R}), G(\mathfrak{S})$ (которые ведь тоже измерились вместе с \mathfrak{R} и \mathfrak{S}), и поэтому $F(\mathfrak{R}) \cdot G(\mathfrak{S})$ имеет оператор

$$\frac{F(R)G(S) + G(S)F(R)}{2}.$$

Пусть теперь $E(\lambda)$ и $F(\mu)$ — разложения единицы, соответствующие R и S . Пусть, далее,

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{для } \lambda \leq \bar{\lambda}, \\ 0 & \text{для } \lambda > \bar{\lambda} \end{cases}, \quad G(\mu) = \begin{cases} 1 & \text{для } \mu \leq \bar{\mu}, \\ 0 & \text{для } \mu > \bar{\mu}. \end{cases}.$$

¹²⁸⁾ Мы доказали этот закон, согласно которому оператором величины $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$ является сумма операторов величин \mathfrak{R} и \mathfrak{S} для одновременно измеримых $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$. Ср., что говорится по этому поводу в конце IV. 1 и IV. 2.

Как мы знаем, $F(R) = E(\bar{\lambda})$, $G(S) = F(\bar{\mu})$, поэтому $F(\mathfrak{R}) \cdot G(\mathfrak{S})$ имеет оператор $\frac{EF + FE}{2}$ (для краткости мы пишем E и F вместо $E(\bar{\lambda})$ или $F(\bar{\mu})$). Поскольку $F(\mathfrak{R})$ всегда равно 0,1, то $F(\mathfrak{R})^2 = F(\mathfrak{R})$, и поэтому

$$F(\mathfrak{R}) \cdot (F(\mathfrak{R}) \cdot G(\mathfrak{S})) = F(\mathfrak{R})G(\mathfrak{S}).$$

Применяя теперь нашу формулу умножения к $F(\mathfrak{R})$ и $F(\mathfrak{R}) \cdot G(\mathfrak{S})$ (все они измеримы одновременно), получим для этого произведения оператор

$$\frac{E \frac{EF + FE}{2} + \frac{EF + FE}{2} E}{2} = \frac{E^2F + 2EFE + FE^2}{2} = \frac{EF + FE + 2EFE}{4}.$$

Это выражение должно равняться $\frac{EF + FE}{2}$, откуда следует, что

$$EF + FE = 2EFE.$$

Умножая слева на E , получаем

$$E^2F + EFE = 2 \cdot E^2FE, \quad EF + EFE = 2 \cdot EFE, \quad EF = EFE,$$

а умножение справа дает

$$EFE + FE^2 = 2 \cdot EFE^2, \quad EFE + FE = 2 \cdot EFE, \quad FE = EFE,$$

т. е. $EF = FE$, т. е. все $E(\bar{\lambda})$, $F(\bar{\mu})$ коммутируют и, следовательно, в свою очередь коммутируют и R , S .

Согласно II. 10, это условие, т. е. коммутативность R и S , означает то же самое, что и требование существования некоторого эрмитова оператора T , функциями которого являются R и S : $R = F(T)$, $S = G(T)$. Если этот оператор соответствует величине \mathfrak{T} , то будет также $\mathfrak{R} = F(\mathfrak{T})$, $\mathfrak{S} = G(\mathfrak{T})$. Поэтому это условие оказывается и достаточным для одновременной измеримости, поскольку измерение \mathfrak{T} (абсолютно точное, так как \mathfrak{T} обладает чисто дискретным спектром, ср. II. 10) измеряет одновременно также и его функции \mathfrak{R} и \mathfrak{S} . Итак, коммутативность R и S является необходимым и достаточным условием одновременной измеримости.

Если дано несколько величин \mathfrak{R} , \mathfrak{S} , ... (но конечное число) с операторами R , S , ... и снова требуется абсолютно точная измеримость, то положение с одновременной измеримостью будет обстоять следующим образом. Если все величины \mathfrak{R} , \mathfrak{S} , ... одновременно измеримы, то то же должно выполняться и для всех образованных из них пар, т. е. все операторы R , S , ... должны коммутировать друг с другом. Обратно, если R , S , ... коммутируют друг с другом, то тогда, согласно II. 10, существует оператор T , функциями которого все они являются: $R = F(T)$, $S = G(T)$, ..., и поэтому для соот-

ветствующей величины \mathfrak{I} : $\mathfrak{H} = F(\mathfrak{I})$, $\mathfrak{S} = G(\mathfrak{I})$. Точное измерение величины \mathfrak{I} (\mathfrak{I} снова обладает чисто дискретным спектром, ср. II. 10) является, следовательно, одновременным измерением величин \mathfrak{H} , \mathfrak{S} , т. е. коммутативность операторов R , S , ... необходима и достаточна для одновременной измеримости величин \mathfrak{H} , \mathfrak{S} , ...

Рассмотрим теперь такие измерения, которые не абсолютно точны, но выполняются с (произвольно большой) заранее заданной точностью. Тогда R , S , ... уже не обязаны иметь чисто дискретный спектр.

Поскольку измерения величин \mathfrak{H} , \mathfrak{S} , ... с ограниченной точностью означают то же самое, что и абсолютно точные измерения величин $F(\mathfrak{H})$, $G(\mathfrak{S})$, ..., где $F(\lambda)$, $G(\lambda)$, ... — известные функции, способ построения которых был описан в начале этого параграфа (при обсуждении измерения ограниченной точности; там, разумеется, было дано лишь построение $F(\lambda)$), тогда \mathfrak{H} , \mathfrak{S} , ... наверняка измеримы одновременно, если все $F(\mathfrak{H})$, $G(\mathfrak{S})$, ... измеримы одновременно с абсолютной точностью. Но последнее эквивалентно требованию коммутативности операторов $F(R)$, $G(S)$, ..., которая в свою очередь следует из коммутативности операторов R , S , ... Поэтому коммутативность операторов R , S , ..., во всяком случае, достаточна.

Обратно, если считать величины \mathfrak{H} , \mathfrak{S} , ... одновременно измеримыми, то поступим следующим образом. Достаточно точное измерение величины \mathfrak{I} позволит решить, является ее значение $> \bar{\lambda}$ или $\leq \bar{\lambda}$ (ср. наше определение «ограниченной точности», обсуждавшееся, в частности, в прим. ¹²⁶⁾ на стр. 166). Тогда, если $F(\lambda)$ определено так, что $F(\lambda) = 1$ для $\lambda \leq \bar{\lambda}$ и $= 0$ для $\lambda > \bar{\lambda}$, то $F(\mathfrak{H})$ измеримо абсолютно точно. Соответственно если $G(\mu) = 1$ при $\mu \leq \bar{\mu}$ и $= 0$ при $\mu > \bar{\mu}$, то $G(\mathfrak{S})$ измеримо с абсолютной точностью и, более того, обе величины измеримы одновременно. Следовательно, $F(R)$, $G(S)$ коммутируют. Пусть теперь $E(\lambda)$ и $F(\mu)$ — разложения единицы, принадлежащие R и S . Тогда $F(R) = E(\bar{\lambda})$, $G(S) = F(\bar{\mu})$ и, следовательно, $E(\bar{\lambda})$ и $F(\bar{\mu})$ коммутируют для всех $\bar{\lambda}$ и $\bar{\mu}$. Следовательно, R и S коммутируют, и так как это должно иметь место для любой пары из R , S , ..., то и все R , S , ... должны коммутировать друг с другом. Таким образом, это условие также и необходимо.

Итак, мы видим, что характеристическим условием одновременной измеримости произвольного (конечного) числа величин \mathfrak{H} , \mathfrak{S} , ... является коммутативность их операторов R , S , ... Действительно, это верно как для абсолютно точных измерений, так и для измерений с произвольной точностью, только в первом случае надо еще потребовать, чтобы операторы обладали чисто дискретными спектрами, что характеристично для возможности абсолютно точного измерения.

Тем самым мы построим математическое доказательство того, что W — это наиболее далеко идущее утверждение, которое вообще

возможно в этой (т. е. во включающей W) теории. Ведь оно предполагает лишь коммутативность операторов R_1, \dots, R_l , а без этого условия относительно результатов одновременных измерений величин $\mathfrak{M}_1, \dots, \mathfrak{M}_l$ вообще ничего сказать нельзя, так как одновременное измерение этих величин вообще невозможно.

4. Соотношения неопределенности

В предыдущих параграфах мы пришли к важным выводам об измерительном процессе, шла ли речь об одной величине или же о нескольких, измеримых одновременно. Теперь нам надо выяснить, как будут вести себя величины, не измеримые одновременно, — мы будем интересоваться их статистикой в одной и той же системе (и в одном и том же состоянии φ).

Итак, пусть даны две такие величины \mathfrak{M} и \mathfrak{S} , равно как и их (не коммутирующие) операторы R и S . Несмотря на это предположение, такие состояния φ , в которых обе величины имеют точно определенные значения (т. е. дисперсию, равную 0), могут существовать, т. е. могут существовать собственные функции, общие для них обеих, нельзя только образовать из них полную ортогональную систему, так как тогда R и S коммутировали бы. (Ср. построение, приведенное в II. 8 для соответствующих разложений единицы $E(\lambda)$, $F(\lambda)$: если $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ образуют полную ортогональную систему, о которой шла речь, то как $E(\lambda)$, так и $F(\lambda)$ будут суммами $P_{[\varphi_p]}$ и потому будут коммутировать, так как коммутируют $P_{[\varphi_p]}$.) Легко понять, что это означает, что замкнутое линейное многообразие \mathfrak{M} , натянутое на эти φ , должно быть меньше, чем \mathfrak{M}_{∞} , — потому что, будь оно равно \mathfrak{M}_{∞} , искомая полная ортонормированная система могла бы быть построена точно так же, как это было сделано в начале II. 6 для одного оператора.

В состояниях из \mathfrak{M} наши величины \mathfrak{M} и \mathfrak{S} измеримы одновременно, что проще всего показать, приведя модель такого одновременного измерения. Поскольку общие собственные функции φ операторов R и S растягивают \mathfrak{M} , то тем самым существует и растягивающая \mathfrak{M} (т. е. полная в \mathfrak{M}) ортонормированная система таких φ : $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (и их можно получить путем только что упомянутого построения из II. 6). Расширим систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ до полной системы $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$, добавляя ортонормированную систему ψ_1, ψ_2, \dots , которая растягивает $\mathfrak{M}_{\infty} - \mathfrak{M}$. Пусть теперь $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ — все различные числа, T — оператор, определенный соотношением

$$T \left(\sum_n x_n \cdot \varphi_n + \sum_n y_n \cdot \psi_n \right) = \sum_n \lambda_n x_n \cdot \varphi_n + \sum_n \mu_n y_n \cdot \psi_n,$$

а \mathfrak{T} — соответствующая этому оператору величина.

Измерение \mathfrak{I} создает (как мы это знаем из III. 3) одно из состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$. Если таким состоянием окажется φ_n (что мы заметим потому, что результатом измерения будет одно из λ_n), то нам будут известны и значения величин \mathfrak{R} и \mathfrak{S} . Действительно, \mathfrak{R} и \mathfrak{S} имеют в состоянии φ_n по предположению точно определенные значения, и мы можем с достоверностью предсказать, что в измерении $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$, которое производится немедленно вслед за этим, будут найдены как раз эти значения. С другой стороны, если в результате измерения образуется ψ_n , то ничего подобного не известно (ψ_n не принадлежит \mathfrak{M} ; поэтому \mathfrak{R} и \mathfrak{S} не определены точно в состоянии ψ_n). Но вероятность того, что система будет обнаружена в состоянии ψ_n , равна, как мы знаем, $P_{[\psi_n]} \varphi, \varphi$, а вероятность найти систему в любом из состояний ψ_n ($n = 1, 2, \dots$) —

$$\sum_n P_{[\psi_n]} \varphi, \varphi = P_{\mathfrak{R}_{\infty} - \mathfrak{M}} \varphi, \varphi = \|P_{\mathfrak{R}_{\infty} - \mathfrak{M}} \varphi\|^2 = \|\varphi - P_{\mathfrak{M}} \varphi\|^2.$$

Эта вероятность равна 0, т. е. \mathfrak{R} и \mathfrak{S} измеримы одновременно с достоверностью, если $\varphi = P_{\mathfrak{M}} \varphi$, т. е. если φ принадлежит к \mathfrak{M} ¹²⁹⁾.

Так как нас интересуют сейчас одновременно неизмеримые величины, примем, что осуществляется крайний случай $\mathfrak{M} = (0)$, т. е. предположим, что \mathfrak{R} и \mathfrak{S} не измеримы одновременно ни в каком состоянии или, иными словами, что не существует общих собственных функций для R и S .

Если операторы R, S обладают разложениями единицы $E(\lambda), F(\lambda)$ и система находится в состоянии φ , то, как мы знаем из III. 1, математические ожидания операторов R и S будут равны

$$\rho = (R\varphi, \varphi), \quad \sigma = (S\varphi, \varphi),$$

а их дисперсии, т. е. математические ожидания величин $(\mathfrak{R} - \rho)^2$ и $(\mathfrak{S} - \sigma)^2$ (ср. обсуждение абсолютно точного измерения в III. 3), будут равны

$$\epsilon^2 = ((R - \rho \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = \|(R - \rho \cdot 1) \varphi\|^2 = \|R\varphi - \rho\varphi\|^2,$$

$$\eta^2 = ((S - \sigma \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = \|(S - \sigma \cdot 1) \varphi\|^2 = \|S\varphi - \sigma\varphi\|^2.$$

После известного преобразования эти выражения принимают вид¹³⁰⁾

$$\epsilon^2 = \|R\varphi\|^2 - (R\varphi, \varphi)^2, \quad \eta^2 = \|S\varphi\|^2 - (S\varphi, \varphi)^2$$

¹²⁹⁾ Дальнейшее подробное обсуждение «одновременной измеримости в состоянии φ из \mathfrak{M} » величин \mathfrak{R} и \mathfrak{S} , не измеримых абсолютно точно (непрерывные спектры) и т. д., предоставляемся читателю. Его можно провести точно таким же способом, какой был использован в рассмотрениях III. 3.

¹³⁰⁾ Вычисление с операторами делается следующим образом:

$$\begin{aligned} \epsilon^2 &= ((R - \rho \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = (R^2 \varphi, \varphi) - 2\rho \cdot (R\varphi, \varphi) + \rho^2 = \\ &= \|R\varphi\|^2 - 2 \cdot (R\varphi, \varphi)^2 + (R\varphi, \varphi)^2 = \|R\varphi\|^2 - (R\varphi, \varphi)^2 \end{aligned}$$

и соответственно для η^2 .

(так как $\|\varphi\| = 1$, то уже неравенство Шварца, т. е. *теорема 1.* из II. 1, показывает, что левые части $\geqslant 0$). Возникает вопрос: поскольку ε и η не могут одновременно равняться нулю, хотя порознь ε и η могут быть сделаны сколь угодно малыми (ведь \mathfrak{N} и \mathfrak{S} по отдельности измеримы с произвольной, возможно даже с абсолютной точностью), то должны существовать соотношения между ε и η , которые препятствуют их одновременному уменьшению — какой вид они имеют?

Существование таких соотношений было открыто Heisenberg'ом¹³¹⁾, и они чрезвычайно важны для познания неопределенностей, вносимых квантовой механикой в описание природы. Поэтому их называют соотношениями неопределенности. Мы выведем сначала математически самое важное соотношение этого типа, а затем вернемся к его принципиальному значению и его связи с опытом.

В матричной теории важную роль играли операторы P и Q с перестановочными соотношениями

$$PQ - QP = \frac{\hbar}{2\pi i} 1,$$

они сопоставлялись, например, координате и сопряженному ей импульсу (ср. I. 2) или, более общо, любым двум величинам, которые были канонически сопряженными друг другу в классической механике (см., например, работы, упомянутые в прим. ²⁾ на стр. 10). Рассмотрим несколько более общо любые два эрмитова оператора P и Q , для которых

$$PQ - QP = a \cdot 1.$$

(Так как $(PQ - QP)^* = QP - PQ$, то $(a \cdot 1)^* = \bar{a} \cdot 1 = -a \cdot 1$, $a = -a$, т. е. a должно быть чисто мнимым. Это операторное равенство не распространяется, конечно, на области определения обеих его сторон: $PQ - QP$ может иметь смысл не везде.) Для любого состояния φ тогда будет

$$\begin{aligned} 2 \operatorname{Im}(P\varphi, Q\varphi) &= i[(P\varphi, Q\varphi) - (Q\varphi, P\varphi)] = -i[(QP\varphi, \varphi) - (PQ\varphi, \varphi)] = \\ &= (i\{PQ - QP\}\varphi, \varphi) = ia \cdot \|\varphi\|^2. \end{aligned}$$

Пусть $a \neq 0$, тогда мы имеем (*теорема 1.* из II. 1)

$$\|\varphi\|^2 = -\frac{2i}{a} \operatorname{Im}(P\varphi, Q\varphi) \leq \frac{2}{|a|} |(P\varphi, Q\varphi)| \leq \frac{2}{|a|} \|P\varphi\| \cdot \|Q\varphi\|,$$

¹³¹⁾ Z. Physik 43 (1927). Эти соображения были обобщены Вонг'ом, Naturwiss. 16 (1928). Аналитическое рассмотрение, которое мы собираемся сейчас изложить, было предложено Кеннард'ом, Z. Physik, Bd. 44 (1926), Robertson придал ему современный вид.

поэтому в случае $\|\varphi\| = 1$ это дает

$$\|P\varphi\| \cdot \|Q\varphi\| \geq \frac{|a|}{2}.$$

Так как операторы $P - \rho \cdot 1$, $Q - \sigma \cdot 1$ удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, то имеем аналогично

$$\|P\varphi - \rho\varphi\| \cdot \|Q\varphi - \sigma\varphi\| \geq \frac{|a|}{2},$$

и если мы введем математические ожидания и дисперсии

$$\begin{aligned}\rho &= (P\varphi, \varphi), & \varepsilon^2 &= \|P\varphi - \rho\varphi\|^2, \\ \sigma &= (Q\varphi, \varphi), & \eta^2 &= \|Q\varphi - \sigma\varphi\|^2,\end{aligned}$$

то получится

$$(U.) \quad \varepsilon\eta \geq \frac{|a|}{2}.$$

Для того чтобы имел место знак равенства, необходимо и достаточно, чтобы в неравенствах \leq , использованных при выводе, всегда использовался бы знак $=$. Полагая $P' = P - \rho \cdot 1$ и $Q' = Q - \sigma \cdot 1$, будем иметь

$$-\frac{i|a|}{a} \operatorname{Im}(P'\varphi, Q'\varphi) = |(P'\varphi, Q'\varphi)| = \|P'\varphi\| \cdot \|Q'\varphi\|.$$

Согласно *теореме 1.* из II. 1, второе уравнение означает, что $P'\varphi$ и $Q'\varphi$ отличаются друг от друга лишь на постоянный множитель, и поскольку из $\|P'\varphi\| \cdot \|Q'\varphi\| \geq \frac{|a|}{2} > 0$ следует, что $P'\varphi \neq 0$ и $Q'\varphi \neq 0$, то должно быть $P'\varphi = c \cdot Q'\varphi$, $c \neq 0$. Первое уравнение означает, что $(P'\varphi, Q'\varphi) = c \cdot \|Q'\varphi\|^2$ чисто мнимо и даже что коэффициент при i имеет тот же знак, что и у $-\frac{i|a|}{a}$ (вещественного!), т. е. противоположный знаку a . Итак, $c = i\gamma$, γ вещественно и ≥ 0 в зависимости от того, $\frac{a}{i} \leq 0$. Следовательно,

$$(Gl.) \quad P'\varphi = i\gamma \cdot Q'\varphi, \quad \gamma \text{ вещественно и } \leq 0 \text{ для } ia \leq 0.$$

Определение ρ и σ требует еще, чтобы было $(P'\varphi, \varphi) = 0$ и $(Q'\varphi, \varphi) = 0$. Но поскольку из *(Gl.)* следует, что $(P'\varphi, \varphi) = i\gamma(Q'\varphi, \varphi)$, где слева стоит нечто вещественное, а справа — нечто чисто мнимое, то оба эти уравнения выполняются автоматически. Нам еще осталось определить ε и η . Имеем

$$\varepsilon : \eta = \|P'\varphi\| : \|Q'\varphi\| = |c| = |\gamma|, \quad \varepsilon\eta = \frac{|a|}{2},$$

поэтому, так как ϵ и η оба положительны,

$$\epsilon = \sqrt{\frac{|a| \cdot |\gamma|}{2}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{|a|}{2|\gamma|}}.$$

В случае квантовой механики $a = \frac{h}{2\pi i}$ и мы получаем из (U.)

$$(U') \quad \epsilon \cdot \eta \geq \frac{h}{4\pi}.$$

Можно обсудить и соотношение (Gl.) для того случая, когда P, Q являются, например, операторами теории Шредингера: $P = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \dots, Q = q \dots$ (Ср. I. 2, мы принимаем, что рассматривается механическая система с одной степенью свободы, ее единственной координатой является q .) Тогда (Gl.) дает

$$\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} - \rho \right) \varphi = i\gamma(q - \sigma)\varphi,$$

где из-за $la = \frac{h}{2\pi} > 0$ $\gamma > 0$. Поэтому

$$\frac{\partial}{\partial q} \varphi = \left\{ -\frac{2\pi}{h} \gamma q + \frac{2\pi}{h} \gamma \sigma + \frac{2\pi}{h} \rho l \right\} \varphi,$$

т. е.

$$\begin{aligned} \varphi &= e^{\int \left\{ -\frac{2\pi}{h} \gamma q + \frac{2\pi}{h} \gamma \sigma + \frac{2\pi}{h} \rho l \right\} dq} = \\ &= C e^{-\frac{\pi\gamma}{h} q^2 + \frac{2\pi\gamma}{h} \sigma q + \frac{2\pi\rho}{h} l q} = C' e^{-\frac{\pi\gamma}{h} (q - \sigma)^2 + \frac{2\pi\rho}{h} l q}. \end{aligned}$$

Благодаря $\gamma > 0$ оказывается, что $\|\varphi\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q)|^2 dq$ в самом деле конечно, и C' определяется из условия $\|\varphi\| = 1$:

$$\|\varphi\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(q)|^2 dq = |C'|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\pi\gamma}{h} (q - \sigma)^2} dq =$$

$$= |C'|^2 \sqrt{\frac{h}{2\pi\gamma}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = |C'|^2 \sqrt{\frac{h}{2\pi\gamma}} V\pi = |C'|^2 \sqrt{\frac{h}{2\gamma}} = 1,$$

$$|C'| = \left(\frac{2\gamma}{h} \right)^{\frac{1}{4}}.$$

Поэтому, пренебрегая не имеющим физического смысла множителем модуля 1, найдем, что $C' = \left(\frac{2\gamma}{h}\right)^{\frac{1}{4}}$, т. е.

$$\varphi = \varphi(q) \equiv \left(\frac{2\gamma}{h}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\pi\gamma}{h}(q-\sigma)^2 + \frac{2\pi p}{h} lq}.$$

и η мы уже знаем:

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{h\gamma}{4\pi}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{h}{4\pi\gamma}}.$$

Поэтому, если отвлечься от условия $\varepsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$, они, пока γ меняется от 0 до $+\infty$, пробегают все значения, т. е. любой набор из четырех величин $p, \sigma, \varepsilon, \eta$, удовлетворяющих условию $\varepsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$, реализуется в точности в одном состоянии φ . Впервые такие состояния φ были исследованы Гейзенбергом и применены для разъяснения квантовомеханических соотношений — они исключительно удобны для этой цели, так как дают наивысшую возможную (в квантовой механике) степень приближения к соотношениям классической механики (где ни p , ни q не имеют дисперсии!) и так как ε и η можно придать по произволу приписанные значения (ср. ссылку в прим. 131) на стр. 174).

Наши предыдущие соображения относятся лишь к одному, а именно формальному, аспекту соотношений неопределенности; для полного понимания этих соотношений необходимо еще рассмотреть их с другой точки зрения: с точки зрения непосредственного физического опыта. Действительно, соотношения неопределенности стоят к нему в более прозрачном и более простом отношении, чем многие другие факты, на которых была основана квантовая механика, и потому заслуживают большего, чем приведенное выше чисто формальное доказательство. Наглядное обсуждение тем более необходимо, что на первый взгляд могло бы даже возникнуть впечатление, что мы сталкиваемся здесь с противоречием со здравым смыслом: ведь без дальнейшего обсуждения непонятно, почему нельзя было бы измерить положение и скорость (т. е. координату и импульс) материального тела одновременно и со сколь угодно большой точностью, если только есть достаточно тонкие измерительные средства. Поэтому надо сделать совершенно ясным, путем подробного анализа тончайших процессов измерения (осуществимых, возможно, лишь в смысле мысленных экспериментов), что это не так. Более того, хорошо известные законы волновой оптики, электродинамики и элементарных атомных процессов ставят непреодолимые трудности на пути точного измерения как раз там, где того требует соотношение неопределенности. Дело обстоит даже так, что в этом можно убедиться, еще рассматривая упомянутые процессы чисто классически (не квантово-

теоретически!). Это обстоятельство имеет принципиальное значение, так как показывает, что в классической, обоснованной независимо от справедливости квантовой механики, области (т. е. там, где квантовые явления еще не требуют существенных поправок к старому способу рассмотрения, — значит, единственно непосредственно доступной нашему наглядному восприятию¹³²⁾) мы не вступаем в противоречие

с парадоксально звучащими соотношениями неопределенности квантовой механики.

Нам следует, таким образом, показать, что если p и q являются двумя канонически сопряженными величинами и система находится в состоянии, в котором значение p может быть задано с точностью ϵ (т. е. измерение p допустимо с ошибкой в пределах ϵ), то значение q нельзя узнать с точностью, превосходящей $\eta = \frac{h}{2\pi} : \epsilon$. Иными словами, измерение p с точностью ϵ вносит неопределенность $\eta = \frac{h}{2\pi} : \epsilon$ в значение q .

Естественно, что при таком очень качественном рассмотрении нельзя надеяться точно передать все детали:

вместо соотношения $\epsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$ мы сможем показать только, что $\epsilon\eta \sim h$ (т. е. $\epsilon\eta$ равно h по порядку величины) в случае по возможности наиболее точного измерения. В качестве типичного примера мы рассмотрим сопряженную пару: положение (координата) — импульс частицы T ¹³³⁾.

Исследуем сначала определение положения. Определить положение частицы T можно, наблюдая ее, т. е. если она освещается и рассеянный ею свет поглощается в глазу. Итак (рис. 1), квант света L испускается источником света I в направлении частицы T , при столкновении с T отклоняется от прямолинейного пути $\beta\beta_1$ в направлении $\beta\beta_2$ и в конце своего пути гибнет, поглощаясь экраном Sch .

¹³²⁾ Фундаментальный смысл этого обстоятельства был подчеркнут Бором (см. ссылку в прим. ¹³¹⁾). Однако метод описания, которому мы следуем ниже, не является совершенно классическим в одном отношении: мы будем предполагать, что существуют световые кванты или, иными словами, что свет частоты ν никогда не проявляет себя с количеством энергии меньшим, чем $h\nu$.

¹³³⁾ Нижеследующим обсуждением мы обязаны Гайзенбергу и Бору, см. ссылки в прим. ¹³¹⁾ на стр. 174.

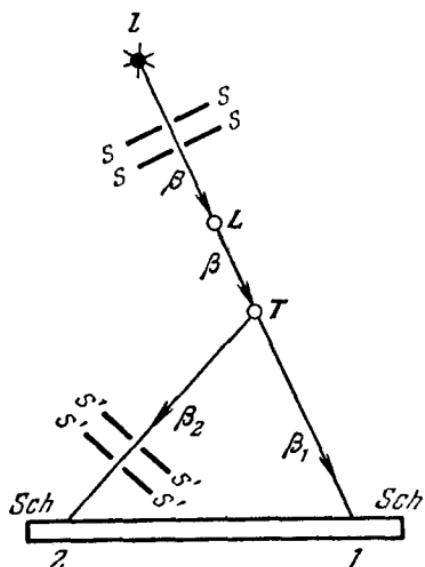


Рис. 1.

(представляющим собой глаз или фотографическую пластинку). Измерение состоит в констатации того, что L встречает экран не в точке 1 (в конце неотклоненного пути $\beta\beta_1$), а в точке 2 (в конце $\beta\beta_2$). Но для того чтобы отсюда сделать вывод о месте столкновения (т. е. о месте нахождения частицы T), надо знать и направления β и β_2 (т. е. направление движения кванта света L до и после столкновения): этого можно достичь, добавляя систему диафрагм ss и $s's'$. (При этом мы, собственно, не измеряем координату частицы T , но лишь судим, имеет ли эта координата определенное — соответствующее точке пересечения направлений β и β_2 , которую можно выбрать по желанию, установив соответствующим образом щели, — значение или нет. Только суперпозиция многих таких рассуждений, т. е. установка многих щелей $s's'$, эквивалентна измерению.) Как же обстоит дело с точностью такого измерения положения?

Его точность принципиальным образом ограничена законами образования оптического изображения. Действительно, с помощью света с длиной волны λ невозможно резко отобразить объекты меньшие, чем λ , или же хотя бы подавить дифракцию до такой степени, чтобы можно было говорить об одном (искаженном) изображении. Конечно, мы не требуем *оптического* изображения, так как для определения положения T достаточно простого факта отклонения L . Однако щели ss и $s's'$ нельзя делать уже, чем λ , так как иначе L не сможет легко преодолеть их без искажений и возникнет целая куча интерференционных полос, так что по направлениям линий, соединяющих последовательные щели ss и $s's'$, уже ничего нельзя будет заключить о направлениях световых лучей β и β_2 . Отсюда следует, что с помощью такой бомбардирующей частицы L невозможно прицелиться и попасть с точностью большей, чем λ .

Итак, длина волны λ это в то же время и мера ошибки при измерении координаты: $\lambda \sim \epsilon$. Дальнейшими характеристиками светового кванта L являются его частота ν , его энергия \bar{E} , его импульс \bar{p} ; между ними существуют хорошо известные соотношения

$$\nu = \frac{c}{\lambda}, \quad \bar{E} = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad \bar{p} = \frac{\bar{E}}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

(c — скорость света)¹³⁴⁾. Следовательно, $\bar{p} \sim \frac{h}{\epsilon}$. В точно не известном процессе столкновения между L и T происходит некоторая передача импульса, которая, очевидно, имеет порядок самого \bar{p} , т. е. тот же порядок, что и $\frac{h}{\epsilon}$. Отсюда для T вытекает неопределенность $\eta \sim \frac{h}{\epsilon}$ в значении импульса.

¹³⁴⁾ Ср., например, оригинальную работу Einstein'a, Ann. Physik 14 (1905) или любой современный учебник.

Этим соотношение $\epsilon\eta \sim h$ было бы доказано, не будь при этом просмотрена одна деталь. Дело в том, что процесс столкновения не так уж неопределен. В действительности известны направления движения L до и после (β и β_2) и поэтому также его импульсы, откуда может быть найдена передача импульса частице T . Следовательно, p не является мерой η . Таковой, скорее, является возможная неопределенность в направлениях лучей β и β_2 . Чтобы установить точнее связь между «прицелом» на маленький объект T и неопределенностью в направлении, которая с этим связана, разумно воспользоваться приспособлением с лучшей фокусировкой, чем щель ss , а именно

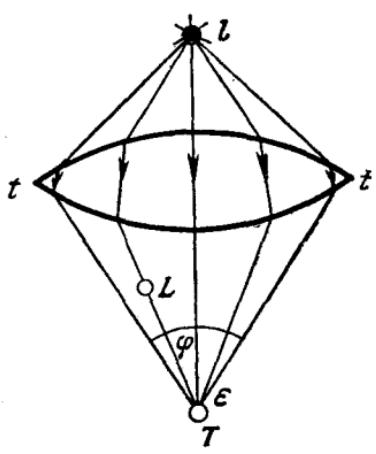


Рис. 2.

линзой. Следовательно, надо учесть результаты известной теории микроскопа, согласно которой для освещения элемента поверхности с линейными размерами ϵ (т. е. для попадания в частицу T лучом L с точностью ϵ) необходимо, чтобы между длиной волны λ и апертурой линзы существовало соотношение $\frac{\lambda}{2 \sin \frac{\varphi}{2}} \sim \epsilon$

(рис. 2)¹³⁵⁾. Неопределенность в tt -компоненте импульса луча L связана с тем, что его направление лежит в угле между

$-\frac{\varphi}{2}$ и $+\frac{\varphi}{2}$, а в остальном неизвестно. Следовательно, ошибка будет порядка

$$2 \sin \frac{\varphi}{2} p = \frac{\lambda}{\epsilon} \cdot \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\epsilon}. \text{ Но это — правильная мера для } \eta, \text{ следовательно, снова } \eta \sim \frac{h}{\epsilon}, \text{ т. е. } \epsilon\eta \sim h.$$

Этот пример очень ясно раскрывает механизм принципа неопределенности: чтобы точнее прицелиться, необходимы широкие глаза (большая апертура φ) и очень коротковолновое излучение, т. е. очень неопределенные (и большие) импульсы световых квантов, которые сталкиваются (эффект Комptonа) с наблюдаемым объектом T в значительной степени неконтролируемым образом и тем самым «размазывают» его импульс.

¹³⁵⁾ По поводу теории микроскопа см., например, Handbuch der Physik, Berlin, 1927, Bd. 18, Kap. 2. G. В очень точных измерениях ϵ , а значит и λ , очень мало, т. е. надо пользоваться γ -лучами или еще более короткими длиниами волн. Обычная линза отказывает при таких условиях, и применяемой была бы только такая, молекулы которой не разрушались бы и не выбивались из своих положений этими γ -лучами. Поскольку существование таких молекул и частиц не нарушает никаких известных законов природы, то их допустимо использовать для целей мысленного эксперимента.

Рассмотрим еще противоположный процесс измерения: измерение скорости (импульса). Сначала следует заметить, что естественным методом измерения скорости частицы T являются измерение ее положений для двух различных моментов времени, скажем 0 и t , и деление изменений координат на t . В этом случае, однако, скорость в интервале времени 0, t должна быть постоянна; если же она изменяется, то это изменение является мерой отклонения вычисленной выше скорости от настоящей скорости (скажем, в момент времени t), т. е. мерой неопределенности измерения. То же справедливо для измерения импульса. Дальше, если измерения координаты сделаны с точностью ϵ , то это в действительности не влияет на точность измерения среднего импульса, так как t можно выбрать произвольно большим. Тем не менее это приведет к изменению импульса порядка $\frac{h}{\epsilon}$ и, следовательно, к неопределенности в конечном значении импульса порядка $\eta \sim \frac{h}{\epsilon}$. Итак, в любом случае получается $\epsilon\eta \sim h$.

Чего-нибудь нового, если только это вообще возможно, можно было бы ждать поэтому только от таких измерений импульса, которые не связаны с измерением положения. Такие измерения вполне возможны, и ими часто пользуются в астрономии, они основаны на эффекте Допплера, и мы сейчас рассмотрим этот эффект.

Как хорошо известно, эффект Допплера состоит в следующем. Свет, излученный телом T , движущимся со скоростью v , частоты ν_0 (измененной на движущемся теле), воспринимается покоящимся наблюдателем как свет измененной частоты ν , которую можно вычислить из соотношения $\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0} = \frac{v}{c} \cos \theta$ (θ — угол между направлением движения и направлением излучения). Правда, эта формула нерелятивистская, т. е. она верна лишь при малых $\frac{v}{c}$, но ее легко можно

было бы исправить). Поэтому определение скорости возможно, если ν наблюдается, а ν_0 известно, скажем, потому, что определенная спектральная линия известного элемента. Точнее, измеряется компонента скорости в направлении наблюдения (направлении излучения света) $v \cos \theta = \frac{c(\nu - \nu_0)}{\nu_0}$ или же соответствующая компонента импульса $p' = p \cos \theta = \frac{mc(\nu - \nu_0)}{\nu_0}$ (m — масса тела T). Дисперсия η импульса p' зависит, очевидно, от дисперсии $\Delta\nu$ частоты ν , так что $\eta \sim \frac{mc \Delta\nu}{\nu_0} \sim \frac{mc \Delta\nu}{\nu}$. Импульс тела T , конечно, изменяется из-за того, что оно испускает квант света частоты ν и тем самым с импульсом

$\bar{p} = \frac{\hbar v}{c}$, но неопределенность в этой величине $\frac{\hbar \Delta v}{c}$ пренебрежимо мала по сравнению с $\frac{mc \Delta v}{v}$ ¹³⁶⁾.

Частоту v можно измерить каким угодно интерференционным методом. Но при таком измерении абсолютно точное значение v получится, естественно, лишь для чисто монохроматических цугов световых волн. Такой цуг волн имеет форму $a \sin\left(2\pi\left(\frac{q}{\lambda} - vt\right) + \alpha\right)$ (q — координата, t — время, a — амплитуда, α — фаза, — это выражение представляет любую компоненту напряженности электрического или магнитного поля) и, значит, распространяется по всему бесконечному пространству и времени. Чтобы избежать этого, приходится заменить это выражение, которое можно записать также и как $a \sin\left(2\pi v\left(\frac{q}{c} - t\right) + \alpha\right)$, так как $\lambda = \frac{c}{v}$, другим, $F\left(\frac{q}{c} - t\right)$, отличным от нуля лишь в конечном интервале изменений своего аргумента. Если световая волна имеет такую форму, то ее, как известно, надо подвергнуть анализу Фурье

$$F(x) = \int_0^{+\infty} a_v \sin(2\pi v x + \alpha_v) dv.$$

Тогда интерференционная картина покажет все частоты v , для которых $a_v \neq 0$, причем интервал частот $v, v + dv$ войдет с относительной интенсивностью $a_v^2 dv$. Дисперсия v , т. е. Δv , должна быть вычислена из этого распределения.

Если рассматриваемый цуг волн имеет протяженность τ по x , т. е. соответственные протяженности по t и q составят τ и $c\tau$, то, как легко видеть, дисперсия частоты v будет $\sim \frac{1}{\tau}$ ¹³⁷⁾. Неопреде-

¹³⁶⁾ Утверждение: $\frac{mc \Delta v}{v}$ велико по сравнению с $\frac{\hbar \Delta v}{c}$ — означает, что v мало по сравнению с $\frac{mc^2}{\hbar}$, или же $\tilde{E} = \hbar v$ мало по сравнению с mc^2 , т. е. энергия светового кванта L мала по сравнению с релятивистской массой покоя тела T , — это и без того неизбежное предположение при нерелятивистских вычислениях.

¹³⁷⁾ Пусть, например, $F(x)$ является конечным монохроматическим цугом волн частоты v_0 , протяженным от 0 до τ :

$$F(x) = \begin{cases} a \sin 2\pi v_0 x & \text{для } 0 \leq x \leq \tau, \\ 0 & \text{вне этого интервала.} \end{cases}$$

(В силу непрерывности, на концах интервала $\sin 2\pi v_0 \tau$ должен равняться 0, т. е. должно быть $v_0 = \frac{n}{2\tau}$, $n = 1, 2, 3, \dots$) Тогда на основе известных

ленность положения возникает при таком способе измерения из-за того, что тело T испытывает отдачу $\frac{hv}{c}$ (в направлении наблюдения) за время индивидуального акта испускания кванта света, т. е. его скорость подвергается изменению порядка $\frac{hv}{mc}$. Поскольку на процесс испускания требуется промежуток времени τ , то момент этого

формул обращения интеграла Фурье (см. прим. ⁸⁷⁾ на стр. 102) $a_v^2 = b_v^2 + c_v^2$, где

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{array}{l} b_v \\ c_v \end{array} \right\} &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} F(x) \left\{ \begin{array}{l} \cos \\ \sin \end{array} \right\} 2\pi v x \cdot dx = 2a \int_0^\tau \sin 2\pi v_0 x \cdot \left\{ \begin{array}{l} \cos \\ \sin \end{array} \right\} 2\pi v x \cdot dx = \\ &= \pm a \int_0^\tau \left(\left\{ \begin{array}{l} \sin \\ \cos \end{array} \right\} \pi(v + v_0)x - \left\{ \begin{array}{l} \sin \\ \cos \end{array} \right\} \pi(v - v_0)x \right) dx = \\ &= -a \left[\frac{\left\{ \begin{array}{l} \cos \\ \sin \end{array} \right\} \pi(v + v_0)x}{\pi(v + v_0)} - \frac{\left\{ \begin{array}{l} \cos \\ \sin \end{array} \right\} \pi(v - v_0)x}{\pi(v - v_0)} \right]_0^\tau = \\ &= \left\{ \begin{array}{l} -a \left[\frac{(-1)^n \cos \pi v \tau - 1}{\pi(v + v_0)} - \frac{(-1)^n \cos \pi v \tau - 1}{\pi(v - v_0)} \right] = \\ \qquad\qquad\qquad = -\frac{2av_0(1 - (-1)^n \cos \pi v \tau)}{\pi(v^2 - v_0^2)}, \\ -a \left[\frac{(-1)^n \sin \pi v \tau}{\pi(v + v_0)} - \frac{(-1)^n \sin \pi v \tau}{\pi(v - v_0)} \right] = \frac{2av_0(-1)^n \sin \pi v \tau}{\pi(v^2 - v_0^2)}, \end{array} \right. \end{aligned}$$

поэтому

$$a_v = \frac{2av_0 \sqrt{2 - 2(-1)^n \cos \pi v \tau}}{\pi(v^2 - v_0^2)} = \frac{4av_0 \left| \left\{ \begin{array}{l} \sin \\ \cos \end{array} \right\} \frac{1}{2} \pi v \tau \right|}{\pi(v^2 - v_0^2)} = \frac{4av_0 |\sin \pi(v - v_0)\tau|}{\pi(v^2 - v_0^2)}.$$

Как видим, наиболее сильно представлены частоты из окрестности $v = v_0$, так что наибольшая часть энергии цуга волн попадает на тот интервал частот, в котором $\pi(v - v_0)\tau$ имеет умеренные значения. Поэтому дисперсия $v - v_0$ (или, что то же самое, дисперсия v) по порядку величины равна $\frac{1}{\tau}$.

$$\int_0^\infty a_v^2 (v - v_0)^2 dv$$

Точное вычисление выражения $\frac{\int_0^\infty a_v^2 dv}{\int_0^\infty a_v^2 (v - v_0)^2 dv}$ дает тот же результат.

изменения скорости не может быть локализован точнее, чем в пределах τ . Отсюда следует неопределенность в положении $\varepsilon \sim \frac{\hbar v}{mc} \tau$. Поэтому

$$\varepsilon \sim \frac{\hbar v}{mc} \tau, \quad \eta \sim \frac{mc \Delta v}{v} = \frac{mc}{v} \frac{1}{\tau}, \quad \varepsilon \eta \sim \hbar,$$

так что мы имеем снова $\varepsilon \eta \sim \hbar$.

Если тело T не самосветящееся, как предполагалось выше, а рассеивает чужой свет (т. е. оно освещено), то вычисление выглядит совершенно аналогично.

5. Проекционные операторы как утверждения

Рассмотрим, как в III. 1, физическую систему S с k степенями свободы, конфигурационное пространство которой описывается k координатами q_1, \dots, q_k (ср. также I. 2). Все физические величины \mathfrak{N} , которые могут быть построены для системы S , являются, в рамках классической механики, функциями от q_1, \dots, q_k и от сопряженных импульсов p_1, \dots, p_k : $\mathfrak{N} = \mathfrak{N}(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ (например, энергия является гамильтоновой функцией $H(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$). С другой стороны, в квантовой механике, как уже было указано в III. 1, величины \mathfrak{N} взаимно однозначно сопоставлены гипермаксимальным эрмитовым операторам R ; в частности, q_1, \dots, q_k соответствуют операторам $Q_1 = q_1 \dots Q_k = q_k \dots$, а p_1, \dots, p_k — операторам $P_1 = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1} \dots, P_k = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k} \dots$. В общем случае, как было пояснено в I. 2 на примере гамильтоновой функции, нельзя из-за неперестановочности Q_i и P_i определить R как $R = \mathfrak{N}(Q_1, \dots, Q_k, P_1, \dots, P_k)$. Не будучи в состоянии высказать что-либо вполне определенное о соотношении между величиной $\mathfrak{N}(q_1, \dots, q_k, p_1, \dots, p_k)$ и ее оператором R , мы тем не менее установили в III. 1 и III. 3 следующие частные правила.

L. Если операторы R, S соответствуют одновременно наблюдаемым величинам $\mathfrak{N}, \mathfrak{S}$, то оператор $aR + bS$ (a, b — вещественные числа) соответствует величине $a\mathfrak{N} + b\mathfrak{S}$.

F. Если оператор R соответствует величине \mathfrak{N} , то величине $F(\mathfrak{N})$ ($F(\lambda)$ — произвольная вещественная функция) соответствует оператор $F(R)$.

L., F. допускают еще некоторое обобщение. Оно вынуждается свойством **F**, и гласит:

F*. Если операторы R, S, \dots соответствуют одновременно измеримым величинам $\mathfrak{N}, \mathfrak{S}, \dots$ (следовательно, коммутируют, пусть их число конечно), то величине $F(\mathfrak{N}, \mathfrak{S}, \dots)$ соответствует оператор $F(R, S, \dots)$.

5] При этом мы примем, что $F(\lambda, \mu, \dots)$ — это вещественный полином по λ, μ, \dots , так чтобы смысл выражения $F(R, S, \dots)$ не вызывал вопросов (R, S, \dots коммутируют), хотя F^* . можно было бы обосновать и для произвольной функции $F(\lambda, \mu, \dots)$ (относительно определения общего выражения $F(R, S, \dots)$ см. ссылку в прим. ⁹⁴⁾ на стр. 110). Тогда, так как любой полином можно получить повторением трех операций $a\lambda$, $\lambda + \mu$, $\lambda\mu$, достаточно рассмотреть лишь эти последние, а поскольку $\lambda\mu = \frac{1}{4}((\lambda + \mu)^2 - (\lambda - \mu)^2)$, т. е. равно

$$\frac{1}{4} \cdot (\lambda + \mu)^2 + \left(-\frac{1}{4}\right) \cdot (\lambda + (-1) \cdot \mu)^2,$$

то указанные три операции можно заменить также операциями $a\lambda$, $\lambda + \mu$, λ^2 . Но две первые принадлежат к типу $L.$, а последняя — к $F..$. Следовательно, F^* . доказано.

С другой стороны, $L.$ распространяется в квантовой механике даже на те случаи, когда \mathfrak{R} , \mathfrak{S} не измеримы одновременно. Мы обсудим этот вопрос позже (в IV. 1), а сейчас ограничимся замечанием, что даже смысл выражения $a\mathfrak{R} + b\mathfrak{S}$, если \mathfrak{R} , \mathfrak{S} одновременно не измеримы, вовсе не представляется ясным.

Наряду с физическими величинами \mathfrak{R} существует еще нечто, являющееся предметом физики: именно альтернативные свойства*) системы S . Альтернативным свойством будет, например, что некоторая величина \mathfrak{R} принимает определенное значение λ , или что значение величины \mathfrak{R} положительно, или что значения двух одновременно измеримых величин \mathfrak{R} и \mathfrak{S} равняются соответственно λ и μ , или что сумма квадратов этих значений > 1 и т. п. Мы обозначали величины через \mathfrak{R} , \mathfrak{S}, \dots , будем обозначать альтернативные свойства буквами $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}, \dots$ Величинам отвечают, как мы только что установили, гипермаксимальные эрмитовы операторы R, S, \dots , что же будет соответствовать альтернативным свойствам?

Мы можем сопоставить каждому альтернативному свойству \mathfrak{E} величину, определив ее так: каждое измерение, разрешающее альтернативу наличия или отсутствия свойства \mathfrak{E} , рассматривается как измерение этой величины; при этом ее значение равно 1, если \mathfrak{E} имеет место, и нулю в противном случае. Величину, которая соответствует альтернативному свойству \mathfrak{E} , будем также обозначать через \mathfrak{E} .

*) Мы решили воспользоваться для перевода немецкого «Eigenschaften» таким оборотом, который точнее передаст по-русски смысл дальнейших рассуждений. Ради краткости мы будем говорить и просто об «альтернатаивах» — Прим. ред.

Такие величины принимают лишь значения 0 и 1, и обратно, любая величина \mathfrak{E} , принимающая лишь эти значения, соответствует альтернативному свойству \mathfrak{E} , которое, очевидно, состоит в следующем: «Значение величины \mathfrak{E} не равно 0». Поэтому для величин \mathfrak{E} , сопоставляемых альтернативным свойствам, этот признак является характерным.

То обстоятельство, что \mathfrak{E} принимает лишь значения 0, 1, может быть сформулировано также следующим образом: его подстановка в полином $F(\lambda) = \lambda - \lambda^2$ тождественно обращает последний в нуль. Если величине \mathfrak{E} соответствует оператор E , то величине $F(\mathfrak{E})$ соответствует оператор $F(E) = E - E^2$; поэтому наше условие гласит: $E - E^2 = 0$, или $E = E^2$. Иными словами: оператор E величины \mathfrak{E} — это проекционный оператор.

Итак, альтернативным свойствам \mathfrak{E} (через посредство соответствующих величин \mathfrak{E} , которые мы только что определили) сопоставляются проекционные операторы E или замкнутые линейные многообразия \mathfrak{M} , если рассматривать наряду с проекционными операторами $E = P_{\mathfrak{M}}$ и принадлежащие им замкнутые линейные многообразия \mathfrak{M} .

Рассмотрим теперь более подробно вычисления с взаимно соответствующими друг другу \mathfrak{E} , E и \mathfrak{M} .

Если мы хотим рассудить альтернативу, обладает ли нет состояния φ свойством \mathfrak{E} , то мы должны измерить величину \mathfrak{E} и установить, равно ли ее значение 1 или 0 (это — то же самое по определению). Тем самым вероятность первого, т. е. того, что \mathfrak{E} имеет место, равна математическому ожиданию \mathfrak{E} , т. е.

$$(E\varphi, \varphi) = \|E\varphi\|^2 = \|P_{\mathfrak{M}\varphi}\|^2,$$

а вероятность второго, т. е. того, что \mathfrak{E} не имеет места, равна математическому ожиданию $1 - \mathfrak{E}$, т. е.

$$((1 - E)\varphi, \varphi) = \|(1 - E)\varphi\|^2 = \|\varphi - P_{\mathfrak{M}\varphi}\|^2.$$

(Сумма, конечно, равна (φ, φ) , т. е. единице.) Следовательно, \mathfrak{E} наверняка имеет место / не имеет места, если соответственно вторая / первая вероятность равна нулю, т. е. при $P_{\mathfrak{M}\varphi} = \varphi / P_{\mathfrak{M}\varphi} = 0$. Иными словами, если φ принадлежит к \mathfrak{M} / ортогонально к \mathfrak{M} или же если φ принадлежит к \mathfrak{M} / к $\mathfrak{R}_{\infty} - \mathfrak{M}$.

Стало быть, \mathfrak{M} может быть определено как множество всех φ , с достоверностью обладающих свойством \mathfrak{E} . (Собственно, этим определяется лишь подмножество \mathfrak{M} , лежащее на поверхности $\|\varphi\| = 1$. Само \mathfrak{M} получается отсюда умножением на положительные константы и добавлением нуля.)

Если мы назовем свойство, противоположное свойству \mathfrak{E} (отрицание \mathfrak{E}), «не \mathfrak{E} », то из сказанного выше непосредственно будет следовать, что если E или \mathfrak{M} относятся к \mathfrak{E} , то к «не \mathfrak{E} » относятся $1 - E$ или $\mathfrak{R}_{\infty} - \mathfrak{M}$.

Как и в отношении величин, здесь также возникает вопрос одновременной измеримости (или, вернее, одновременной рассудимости*) свойств). Ясно, что \mathfrak{E} , \mathfrak{F} одновременно рассудимы тогда и только тогда, когда соответствующие величины \mathfrak{E} , \mathfrak{F} одновременно измеримы (неважно, абсолютно точно или с произвольно большой точностью, поскольку они ведь могут принимать лишь значения 0 и 1), т. е. если E , F коммутируют. Аналогично обстоит дело в случае нескольких свойств \mathfrak{E} , \mathfrak{F} , \mathfrak{G} , ...

Из одновременно рассудимых свойств \mathfrak{E} , \mathfrak{F} можно образовать дальнейшие свойства « \mathfrak{E} и \mathfrak{F} » и « \mathfrak{E} или \mathfrak{F} ». Величина, соответствующая свойству « \mathfrak{E} и \mathfrak{F} », равна 1, если обе величины, соответствующие \mathfrak{E} и \mathfrak{F} , равны 1, равна 0, если одна из них равна нулю, т. е. произведению этих величин. Согласно F^* , ее оператором будет произведение операторов величин \mathfrak{E} и \mathfrak{F} , т. е. EF . По теореме 14. из II. 4, соответствующее замкнутое линейное многообразие будет общей частью \mathfrak{P} многообразий \mathfrak{M} и \mathfrak{N} .

С другой стороны, свойство « \mathfrak{E} или \mathfrak{F} » можно записать как
«не ((не \mathfrak{E}) и (не \mathfrak{F}))»,

и, следовательно, его оператором будет

$$1 - (1 - E)(1 - F) = E + F - EF$$

(по способу построения это, конечно, тоже проекционный оператор). Так как $F - EF$ является проекционным оператором, то линейным многообразием, принадлежащим к $E + F - EF$, будет $\mathfrak{M} + (\mathfrak{N} - \mathfrak{P})$ (теорема 14. из II. 4). Оно является подмножеством $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ и, очевидно, содержит \mathfrak{M} , значит, по симметрии также и \mathfrak{N} , а следовательно, и $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$. Следовательно, оно равно $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$, которое, как замкнутое множество, само равно $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}]$.

Если \mathfrak{E} является свойством, которое всегда имеет место (т. е. пустым), то соответствующая величина равна тождественно 1, т. е. $E = 1$, $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}_\infty$. С другой стороны, если \mathfrak{E} никогда не имеет места (т. е. невозможно), тогда соответствующая ему величина тождественно равна 0, т. е. $E = 0$, $\mathfrak{M} = 0$. Если два свойства \mathfrak{E} , \mathfrak{F} несовместны, то во всяком случае они должны быть одновременно рассудимы и свойство « \mathfrak{E} и \mathfrak{F} » должно быть невозможно, т. е. E и F должны коммутировать, а $EF = 0$. Но поскольку из $EF = 0$ вытекает перестановочность (теорема 14. из II. 4), то это свойство характерно само по себе. Если предположить, что E и F коммутируют, то тогда $EF = 0$ означает попросту, что общее подмножество множеств \mathfrak{M} и \mathfrak{N} состоит лишь из 0, однако из одного последнего условия перестано-

*) Мы переводим словами «рассудить», «рассудимость» используемую автором терминологию «entscheiden», «Entscheidbarkeit», не имеющую аналога в нашей литературе. Прим. перев.

вочность E и F следовать не будет. Напротив, в общем случае $EF = 0$ утверждает для \mathfrak{M} и \mathfrak{N} , что всё \mathfrak{M} ортогонально ко всему \mathfrak{N} (теорема 14. из II. 4).

Если \mathfrak{N} — это величина с оператором R , которому принадлежит разложение единицы $E(\lambda)$, то оператором свойства « \mathfrak{N} лежит в интервале $I = \{\lambda', \mu'\}$ ($\lambda' \leq \mu'$) будет оператор $E(\mu') - E(\lambda')$. Чтобы убедиться в этом, достаточно заметить, например, что вероятность сделанного утверждения равна $((E(\mu') - E(\lambda')) \varphi, \varphi)$ (ср. W , в III. 1). Другой способ: величина, соответствующая рассматриваемому свойству, равна $\mathfrak{E} = F(\mathfrak{N})$, где

$$F(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{при } \lambda' < \lambda \leq \mu', \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

так что $F(R) = E(\mu') - E(\lambda')$ (ср. II. 8 или III. 1). В III. 1 этот оператор обозначался через $E(I)$.

Итак, мы пришли к следующим выводам относительно связи между свойствами \mathfrak{E} , их проекционными операторами E и замкнутыми линейными многообразиями \mathfrak{M} этих операторов:

а) Вероятности того, что свойство \mathfrak{E} имеет или не имеет места в состоянии φ , равны

$$(E\varphi, \varphi) = \|E\varphi\|^2 = \|P_{\mathfrak{M}}\varphi\|^2$$

или

$$((1 - E)\varphi, \varphi) = \|(1 - E)\varphi\|^2 = \|\varphi - P_{\mathfrak{M}}\varphi\|^2.$$

б) \mathfrak{E} с достоверностью имеет или не имеет места в состояниях φ , принадлежащих \mathfrak{M} или $\mathfrak{N}_{\infty} - \mathfrak{M}$ соответственно, и только в таких состояниях.

γ) Для одновременной рассудимости нескольких свойств \mathfrak{E} , \mathfrak{F} , ... перестановочность их операторов E , F , ... является характерной.

δ) Если E , \mathfrak{M} принадлежат свойству \mathfrak{E} , то $1 - E$, $\mathfrak{N}_{\infty} - \mathfrak{M}$ принадлежат свойству «не \mathfrak{E} ».

ε) Если E , \mathfrak{M} принадлежат свойству \mathfrak{E} , а F , \mathfrak{N} — свойству \mathfrak{F} и если \mathfrak{E} и \mathfrak{F} одновременно рассудимы, то EF и общая часть \mathfrak{M} , \mathfrak{N} принадлежат свойству « \mathfrak{E} и \mathfrak{F} », а $E + F - EF$ и $\{\mathfrak{M}, \mathfrak{N}\}$ (равное $[\mathfrak{M}, \mathfrak{N}]$) принадлежат свойству « \mathfrak{E} или \mathfrak{F} ».

η) \mathfrak{E} всегда имеет место, если $E = 1$ или же если $\mathfrak{M} = \mathfrak{N}_{\infty}$, и никогда не имеет места, если $E = 0$ или же если $\mathfrak{M} = (0)$.

θ) \mathfrak{E} , \mathfrak{F} несовместны, если $EF = 0$ или, также, если всё \mathfrak{M} ортогонально всему \mathfrak{N} .

ζ) Пусть величине \mathfrak{N} соответствует оператор R и пусть I — некоторый интервал. Пусть $E(\lambda)$ — разложение единицы, принадлежащее R , $I = \{\lambda', \mu'\}$ ($\lambda' \leq \mu'$), $E(I) = E(\mu') - E(\lambda')$ (ср. III. 1). Тогда оператор $E(I)$ принадлежит свойству « \mathfrak{N} лежит в I ».

С помощью предложений α) — ζ) можно вывести указанные выше вероятностные утверждения $W.$, $E_{1.}$, $E_{2.}$, а также утверждения из III. З относительно одновременной измеримости. Ясно, что последние утверждения эквивалентны γ); $W.$ следует из α), ε), ζ), а $E_{1.}$, $E_{2.}$ являются его следствиями.

Мы видим, что связь между свойствами физической системы, с одной стороны, и проекционными операторами, с другой, делает возможным некое логическое исчисление над ними. Однако в противоположность исчислению обычной логики эта система обогащена характерным для квантовой механики понятием «одновременной рассудимости».

Это, основанное на проекционных операторах, исчисление предложений имеет, пожалуй, определенные преимущества над исчислением величин, опирающимся на совокупность всех (гипермаксимальных) эрмитовых операторов, состоящие в том, что понятие «одновременной рассудимости» является уточнением понятия «одновременной измеримости». Например, чтобы вопросы «лежит ли \mathfrak{A} в $I?$ » и «лежит ли \mathfrak{B} в $J?$ » [\mathfrak{A} и \mathfrak{B} обладают операторами R и S , а эти в свою очередь — разложениями единицы $E(\lambda)$ и $F(\mu)$; $I = \{\lambda', \lambda''\}$, $J = \{\mu', \mu''\}$] были бы одновременно рассудимы, мы требуем лишь (согласно γ), ζ), чтобы операторы $E(I) = E(\lambda'') - E(\lambda')$ и $F(J) = F(\mu'') - F(\mu')$ коммутировали. Для одновременной же измеримости \mathfrak{A} , \mathfrak{B} необходима перестановочность всех $E(\lambda)$ со всеми $F(\mu)$.

6. Теория излучения

Мы снова вывели все статистические утверждения квантовой механики, приведенные в I. 2, и даже существенно обобщили их и придали им систематический порядок с одним-единственным исключением. Именно, нам недостает гайзенбергова выражения для вероятности перехода из одного стационарного состояния квантованной системы в другое, хотя как раз оно сыграло важную роль в создании квантовой механики (ср. сказанное по этому поводу в I. 2). Следуя методу Dirac'a¹³⁸⁾, мы покажем теперь, каким образом могут быть выведены эти вероятности переходов из обычных статистических утверждений квантовой механики, т. е. из только что изложенной теории. Это тем более важно, что такой вывод позволит нам глубже заглянуть в механизм переходов между стационарными состояниями, а также в смысл частотно-энергетических условий Эйнштейна — Бора. Теория излучения, развитая Дираком, является одним из самых прекрасных достижений в области квантовой механики.

¹³⁸⁾ Proc. Roy. Soc., London 114 (1927). См. также изложение в книге Weyl'a, Gruppentheorie und Quantenmechanik, Leipzig, 1931; 2-е изд., стр. 91 и последующие.

Пусть S — система (например, квантованный атом), энергии которой соответствует эрмитов оператор H_0 . Обозначим координаты, описывающие конфигурационное пространство системы S (если, например, S состоит из l частиц, то имеется $3l$ декартовых координат: $x_1 = q_1, y_1 = q_2, z_1 = q_3, \dots, x_l = q_{3l-2}, y_l = q_{3l-1}, z_l = q_{3l}$), для краткости через ξ ; далее, для простоты пусть H_0 имеет чисто дискретный спектр: собственные значения W_1, W_2, \dots , собственные функции $\varphi_1(\xi), \varphi_2(\xi), \dots$ (некоторые из W_n могут совпадать). Произвольное состояние системы S , т. е. волновая функция $\varphi(\xi)$, развивается в соответствии с временным уравнением Шредингера (ср. III. 2)

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t(\xi) = -H_0 \varphi_t(\xi),$$

т. е. если при $t = t_0$ $\varphi_t(\xi) = \varphi(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \varphi_k(\xi)$, то для произвольного времени

$$\varphi_t(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} W_k (t-t_0)} \varphi_k(\xi).$$

Состояние $\varphi(\xi) = \varphi_k(\xi)$ переходит, следовательно, в $e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} W_k (t-t_0)} \varphi_k(\xi)$, т. е. само в себя (так как множитель $e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} W_k (t-t_0)}$ не играет роли). Значит, состояния $\varphi_k(\xi)$ стационарны. Таким образом, мы сперва вовсе не находим переходов из одного состояния $\varphi_k(\xi)$ в другое. Как же получается, что о таких переходах все-таки говорят? Объяснение несложно. Мы не учли агента, который вызывает такие переходы, — свет. Ведь уже согласно первоначальной теории Бора стационарные квантовые орбиты нарушались лишь при испускании света (ср. прим. 5) на стр. 12), но если не обращать на него внимания (как в только что намеченной постановке задачи), то совершенно разумно, что получается абсолютная и постоянная стабильность. Таким образом, следует расширить исследуемую систему так, чтобы она включила в себя и свет, который, возможно, будет испущен S , т. е. вообще весь свет, который может вступать во взаимодействие с S . Обозначим через L систему, образуемую светом (т. е. электромагнитным полем классической теории, исключая стационарное поле, порождаемое электронными и ядерными зарядами). Рассмотрению подлежит тогда система $S + L$.

Итак, надо найти следующие вещи:

1. Набор переменных для квантовомеханического описания системы L , т. е. конфигурационное пространство L .
2. Оператор энергии системы $S + L$. Эта энергия состоит из трех частей:

а) Энергия системы S , существующая независимо от L , т. е. невозмущенная энергия S : для системы S — это оператор H_0 .

β) Энергия системы L , существующая независимо от S , т. е. невозмущенная энергия L . Обозначим соответствующий оператор через H_L .

γ) Остальная часть энергии, т. е. энергия взаимодействия S и L . Обозначим ее оператор через H_w .

Как видно, здесь идет речь о вопросах, на которые, в духе основных принципов квантовой механики, сначала нужно ответить классически, с тем чтобы полученные таким образом результаты можно было затем перевести на язык операторов (ср. I. 2). Встанем поэтому сперва на чисто классическую точку зрения относительно природы света: будем рассматривать его (в духе электромагнитной теории света) как осцилляторное состояние электромагнитного поля¹³⁹⁾.

Во избежание излишних усложнений (диссиpация света в бесконечном пространстве и т. д.) будем считать, что S и L заключены в очень большой замкнутой полости H объема \mathcal{V} с абсолютно отражающими стенками. Состояние электромагнитного поля в H описывается, как известно, напряженностями электрического и магнитного полей: $E = \{E_x, E_y, E_z\}$, $H = \{H_x, H_y, H_z\}$. Все величины E_x, \dots, H_z являются функциями декартовых координат x, y, z общей точки полости H и времени t . Следует указать еще, что теперь мы будем часто рассматривать вещественные пространственные векторы $a = \{a_x, a_y, a_z\}$, $b = \{b_x, b_y, b_z\}$ и т. д. (например, E, H), а также разные конструкции с ними, как, например, внутреннее или скалярное произведение

$$[a, b] = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z.$$

Здесь, конечно, не возникает опасности спутать это скалярное произведение с внутренним произведением (φ, ψ) в \mathfrak{H}_∞ . Обозначим дифференциальный оператор $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ через Δ , а известные векторные операции — через div , grad и rot . Векторы E и H удовлетворяют в пустом пространстве H уравнениям Максвелла:

$$\text{div } H = 0, \quad \text{rot } E + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} H = 0,$$

$$\text{div } E = 0, \quad \text{rot } H - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} E = 0.$$

¹³⁹⁾ Интересующийся этими вопросами читатель может найти изложение электромагнитной теории света в любом учебнике электродинамики, например, A b r a h a m - B e c k e r, Theorie der Elektrizität, Berlin, 1930. (Есть русский перевод: А брагам-Беккер, Теория электричества, ОНТИ, Л.—М., 1936.) Ср. также дальнейшее изложение, проходящее в рамках теории Максвелла.

Первое уравнение первой строки будет удовлетворено, если положить $\mathfrak{H} = \text{rot } \mathfrak{A}$ (где $\mathfrak{A} = \{\mathfrak{A}_x, \mathfrak{A}_y, \mathfrak{A}_z\}$ — так называемый вектор-потенциал; его компоненты также зависят от x, y, z, t), а второе — если $\mathfrak{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathfrak{A}$. После этого уравнения второй строки приобретают вид

$$(A_1) \quad \operatorname{div} \mathfrak{A} = 0, \quad \Delta \mathfrak{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathfrak{A} = 0.$$

[В целях повышения симметрии пространства и времени, вектор-потенциал вводится часто несколько отличным способом. То, что предложенный способ введения \mathfrak{A} дает общее решение уравнений Максвелла — здесь надо обратить особое внимание на то, что из первого уравнения второй строки следует лишь, что $\frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div} \mathfrak{A} = 0$, т. е. $\operatorname{div} \mathfrak{A} = f(x, y, z)$, — доказывается в большинстве изложений теории Максвелла. Поэтому мы не станем дольше останавливаться на этом. Ср. прим. ¹³⁹⁾ на стр. 191.] Уравнения (A₁) являются исходным пунктом для дальнейшего. Свойство стенок полости H отражать свет можно выразить в виде условия перпендикулярности вектора-потенциала \mathfrak{A} к стенкам на границах H . Известный метод нахождения всех таких \mathfrak{A} состоит в следующем. Так как в рассматриваемой проблеме t нигде не фигурирует явно, то наиболее общим выражением для \mathfrak{A} будет линейная комбинация всех решений, имеющих вид произведения вектора, зависящего от x, y, z , на зависящий от времени скаляр,

$$\mathfrak{A} = \mathfrak{A}(x, y, z, t) \equiv \bar{\mathfrak{A}}(x, y, z) \cdot \tilde{q}(t).$$

Уравнения (A₁) дают тогда

$$(A_{1.1}) \quad \operatorname{div} \bar{\mathfrak{A}} = 0, \quad \Delta \bar{\mathfrak{A}} = \eta \bar{\mathfrak{A}},$$

$\bar{\mathfrak{A}}$ перпендикулярно к стенкам H на границе.

$$(A_{1.2}) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{q}(t) = c^2 \eta \tilde{q}(t).$$

Здесь, согласно (A_{1.1}), η зависит лишь от x, y, z , а согласно (A_{1.2}) — лишь от t . Значит, η есть константа.

Таким образом, уравнения (A₁) формулируют проблему собственных значений, в которой η является параметром для собственных значений и $\bar{\mathfrak{A}}$ — собственной функцией. Теория таких задач полностью разработана, и мы приведем здесь лишь результаты ¹⁴⁰⁾.

¹⁴⁰⁾ Ср. R. Courant und D. Hilbert, Methoden der mathematischen Physik I, VI, § 2.2.—5., стр. 358—363, Berlin, 1924.

Задача **(A₁.)** имеет чисто дискретный спектр, все собственные значения η_1, η_2, \dots (пусть им соответствуют $\bar{\mathfrak{A}}_1, \bar{\mathfrak{A}}_2, \dots$) отрицательны и стремятся к $-\infty$ при $n \rightarrow +\infty$. Полную систему $\bar{\mathfrak{A}}_1, \bar{\mathfrak{A}}_2, \dots$ можно нормировать условием

$$\int_H \int \int [\bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz = \begin{cases} 4\pi c^2 & \text{для } m = n, \\ 0 & \text{для } m \neq n. \end{cases}$$

(Мы выбрали $4\pi c^2$ вместо обычной 1, поскольку в дальнейшем такая нормировка окажется немного более практической.) Обозначим $\eta_n (< 0)$ через $-\frac{4\pi^2 \rho_n^2}{c^2}$ ($\rho_n > 0$, при $n \rightarrow +\infty$ имеем также $\rho_n \rightarrow +\infty$), тогда **(A₂.)** даст

$$\tilde{q}_n(t) = \gamma \cos 2\pi \rho_n(t - \tau) \quad (\gamma, \tau \text{ произвольны}).$$

Таким образом, самое общее решение \mathfrak{A} имеет вид

$$\begin{aligned} \mathfrak{A} = \mathfrak{A}(x, y, z, t) &\equiv \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\mathfrak{A}}_n(x, y, z) \tilde{q}_n(t) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\mathfrak{A}}_n(x, y, z) \gamma_n \cos 2\pi \rho_n(t - \tau_n) \end{aligned}$$

($\gamma_1, \gamma_2, \dots, \tau_1, \tau_2, \dots$ — произвольные константы). Энергия произвольного поля $\mathfrak{A} = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\mathfrak{A}}_n(x, y, z) \tilde{q}_n(t)$ (где \mathfrak{A} не предполагается решением задачи **(A.)**, т. е. коэффициенты $\tilde{q}_n(t)$ произвольны) составляет

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{8\pi} \int_H \int \int ([\mathfrak{E}, \mathfrak{E}] + [\mathfrak{H}, \mathfrak{H}]) dx dy dz = \\ &= \frac{1}{8\pi} \int_H \int \int \left(\frac{1}{c^2} \left[\frac{\partial}{\partial t} \mathfrak{A}, \frac{\partial}{\partial t} \mathfrak{A} \right] + [\operatorname{rot} \mathfrak{A}, \operatorname{rot} \mathfrak{A}] \right) dx dy dz = \\ &= \frac{1}{8\pi} \sum_{m, n=1}^{\infty} \int_H \int \int \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_m(t) \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n(t) [\bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{q}_m(t) \tilde{q}_n(t) [\operatorname{rot} \bar{\mathfrak{A}}_m, \operatorname{rot} \bar{\mathfrak{A}}_n] \right) dx dy dz. \end{aligned}$$

Интегрируя по частям, получим¹⁴¹⁾

$$\begin{aligned} \int \int \int_H [\operatorname{rot} \bar{\mathfrak{A}}_m, \operatorname{rot} \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz &= \\ &= \int \int \int_H [\operatorname{rot} \operatorname{rot} \bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz = \\ &= \int \int \int_H [-\Delta \bar{\mathfrak{A}}_m + \operatorname{grad} \operatorname{div} \bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz = \\ &\qquad\qquad\qquad = \frac{4\pi^2 \rho_m^2}{c^2} \int \int \int_H [\bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz. \end{aligned}$$

Поэтому

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{8\pi} \sum_{m,n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_m(t) \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n(t) + \frac{4\pi^2 \rho_m^2}{c^2} \tilde{q}_m(t) \tilde{q}_n(t) \right) \times \\ &\quad \times \int \int \int_H [\bar{\mathfrak{A}}_m, \bar{\mathfrak{A}}_n] dx dy dz = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_m(t) \right)^2 + 4\pi^2 \rho_m^2 (\tilde{q}_m(t))^2 \right]. \end{aligned}$$

Но $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ можно рассматривать как координаты, описывающие мгновенное состояние поля, т. е. как координаты конфигурационного пространства системы L . Сопряженные импульсы \tilde{p}_n (в смысле классической механики) находятся из формулы

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n \right)^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{q}_n^2 \right)$$

в форме

$$\tilde{p}_n = \frac{\partial}{\partial \left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n \right)} E = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n, \quad E = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (\tilde{p}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{q}_n^2)$$

¹⁴¹⁾ Именно,

$$\int \int \int_H [\mathbf{a}, \operatorname{rot} \mathbf{b}] dx dy dz = \int \int \int_H [\operatorname{rot} \mathbf{a}, \mathbf{b}] dx dy dz$$

благодаря тождеству

$$[\mathbf{a}, \operatorname{rot} \mathbf{b}] - [\operatorname{rot} \mathbf{a}, \mathbf{b}] = \operatorname{div} (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$$

($\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ — так называемое внешнее, векторное произведение векторов \mathbf{a} и \mathbf{b}), если только нормальная компонента произведения $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ исчезает на границе H . Так как $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ перпендикулярно к \mathbf{a} и \mathbf{b} , то это безусловно так, если \mathbf{a} или \mathbf{b} перпендикулярно к H . У нас $\mathbf{a} = \operatorname{rot} \bar{\mathfrak{A}}_m$, $\mathbf{b} = \bar{\mathfrak{A}}_n$, так что первое безусловно выполняется.

(ср. I. 2). Отсюда можно получить уравнения движения классической механики

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{p}_n = - \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_n} E = - 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{q}_n, \quad \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}_n = \frac{\partial}{\partial \tilde{p}_n} E = \tilde{p}_n,$$

т. е.

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{q}_n + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{q}_n = 0,$$

что в точности совпадает с уравнениями (*A*₂.), вытекающими из уравнений Максвелла. Тем самым доказана теорема Джинса:

Поле излучения *L* можно описать в смысле чисто классической механики координатами $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$, — которые связаны с мгновенным значением вектор-потенциала \mathfrak{A} , описывающего поле, соотношением

$$\mathfrak{A} = \mathfrak{A}(x, y, z) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{q}_n \bar{\mathfrak{A}}_n(x, y, z), \quad —$$

посредством энергии (гамильтоновой функции)

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (\tilde{p}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{q}_n^2).$$

Точка массы 1, движущаяся по прямой линии, с координатой \tilde{q} , находящаяся в потенциальном поле $C\tilde{q}^2$, $C = 2\pi^2 \rho^2$, обладает энергией $\frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{q} \right)^2 + 4\pi^2 \rho^2 \tilde{q}^2 \right]$. Или же, поскольку опять $\tilde{p} = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{q}$, равной $\frac{1}{2} (\tilde{p}^2 + 4\pi^2 \rho^2 \tilde{q}^2)$. Уравнение движения такой частицы имеет, следовательно, вид $\frac{\partial^2}{\partial t^2} \tilde{q} + 4\pi^2 \rho^2 \tilde{q} = 0$, решением которого является $\tilde{q} = \gamma \cos 2\pi\rho(t - \tau)$ (γ, τ произвольны). Благодаря такому характеру движения эта система называется «линейным осциллятором частоты ρ ». Следовательно, *L* можно рассматривать как совокупность некоторой последовательности линейных осцилляторов, частоты которых являются собственными частотами полости *H*: ρ_1, ρ_2, \dots

Это «механическое» описание электромагнитного поля важно потому, что его можно немедленно реинтерпретировать в духе обычного метода квантовой механики, описывая конфигурационное пространство системы *L* координатами $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$ и заменяя в выражении для *E* величины \tilde{p}_n и \tilde{q}_n на $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_n}, \dots$ и $\tilde{q}_n \dots$ соответственно. Последние операторы обозначим через \tilde{P}_n и \tilde{Q}_n . Тем самым вопросы

1. и 2. β) будут разрешены, в частности, оператором, о котором шла речь в 2. β), явится

$$H_l = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (\tilde{P}_n + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{Q}_n^2).$$

Вопрос 2. α) был решен заранее, так как мы приняли, что H_0 известно. Таким образом, остается лишь вопрос 2. γ), который, однако, не готовит нам дополнительных трудностей.

Согласно классической электродинамике, взаимодействие между S и L вычисляется следующим образом: Пусть S состоит из l частиц (скажем, протоны и электроны) с зарядами и массами $e_1, m_1, \dots, e_l, m_l$ соответственно и с декартовыми координатами $x_1 = q_1, y_1 = q_2, z_1 = q_3, \dots, x_l = q_{3l-2}, y_l = q_{3l-1}, z_l = q_{3l}$ (совокупность которых образует символ ξ , введенный выше) и пусть им соответствуют импульсы $p_1^x, p_1^y, p_1^z, \dots, p_l^x, p_l^y, p_l^z$. Тогда энергия взаимодействия будет иметь вид (в достаточном приближении)

$$\sum_1^l \frac{e_v}{cm_v} (p_v^x \mathfrak{A}_x(x_v, y_v, z_v) + p_v^y \mathfrak{A}_y(x_v, y_v, z_v) + p_v^z \mathfrak{A}_z(x_v, y_v, z_v))^{142}).$$

Соответствующий оператор квантовой механики получается путем замены $p_v^x, p_v^y, p_v^z, x_v, y_v, z_v$ ($v = 1, \dots, l$) на операторы

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_v}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y_v}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z_v}, \dots, x_v, \dots, y_v, \dots, z_v,$$

которые мы обозначим через $P_v^x, P_v^y, P_v^z, Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z$. Учитывая еще, что

$$\mathfrak{A}(x, y, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{q}_n \mathfrak{A}_n(x, y, z),$$

получаем искомый оператор H_w в виде

$$H_w = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{cm_v} \tilde{Q}_n \{ P_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + P_v^y \mathfrak{A}_{n,y}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + P_v^z \mathfrak{A}_{n,z}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) \}.$$

Здесь следует заметить, что мы заменили произведения $p_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(x_v, y_v, z_v)$ операторами, используя произвольный порядок сомножителей: $P_v^x \mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z)$, хотя мы могли бы с равным основанием взять $\mathfrak{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) P_v^x$, а чтобы обеспечить эрмитовость возникающего

¹⁴²⁾ См., например, ссылку в прим. ¹³⁸⁾ на стр. 189.

оператора, в действительности следовало бы пользоваться симметричной записью вида

$$\frac{1}{2} (P_v^x \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) P_v^x), \dots$$

К счастью, все это не играет роли ввиду того, что

$$\begin{aligned} [P_v^x \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots] - [\bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) P_v^x + \dots] = \\ = [P_v^x \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) - \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) P_v^x] + \dots^{143}) = \\ = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots = \frac{\hbar}{2\pi i} \operatorname{div} \bar{\mathcal{A}}_n(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, полная энергия нашей системы $S+L$ и ее оператор

$$H = H_0 + H_t + H_w$$

теперь полностью определены. Но прежде чем преобразовывать H дальше, заметим следующее: конфигурационное пространство системы $S+L$ описывается координатами ξ (т. е. q_1, \dots, q_M или же $x_1, y_1, z_1, \dots, x_L, y_L, z_L$) и $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$, а волновая функция зависит от всей их совокупности. Но допускать в рассмотрение системы с бесконечно многими степенями свободы или же волновые функции с бесконечно большим числом переменных неудобно в формальном отношении и сомнительно с точки зрения законности математических операций, — наши предписания относились ведь всегда к случаю конечного числа координат. Мы будем поэтому сперва учитывать лишь N первых из координат $\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots$, а именно $\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N$ (т. е. мы ограничим \mathcal{A} линейными комбинациями $\bar{\mathcal{A}}_1, \dots, \bar{\mathcal{A}}_N$), и лишь после того, как будет получен готовый результат для такой упрощенной системы, мы выполним фактически необходимый предельный переход $N \rightarrow +\infty$.

¹⁴³⁾ Так как P_v^x коммутирует с Q_v^x, Q_v^z и не коммутирует только с Q_v^y , то для того, чтобы обосновать последующее преобразование (мы опускаем излишние индексы и заменяем \mathcal{A} на F), следует доказать соотношение

$$PF(Q) - F(Q)P = \frac{\hbar}{2\pi i} F'(Q),$$

в котором $P = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \dots$, $Q = q \dots$ Это соотношение, играющее в матричной теории исключительно важную роль, проще всего проверяется с помощью прямого вычисления.

Таким образом, получаем

$$\begin{aligned} H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (\tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{Q}_n^2) + \\ + \sum_{n=1}^N \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{cm_v} \tilde{Q}_n \{ P_v^x \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \\ + P_v^y \bar{\mathcal{A}}_{n,y}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + P_v^z \bar{\mathcal{A}}_{n,z}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) \}. \end{aligned}$$

Вместо \tilde{P}_n , \tilde{Q}_n удобно ввести (не эрмитовы!) оператор \tilde{R}_n и сопряженный ему \tilde{R}_n^* :

$$\tilde{R}_n = \frac{1}{\sqrt{2h\rho_n}} (2\pi\rho_n \tilde{Q}_n + i\tilde{P}_n), \quad \tilde{R}_n^* = \frac{1}{\sqrt{2h\rho_n}} (2\pi\rho_n \tilde{Q}_n - i\tilde{P}_n).$$

Тогда $\tilde{Q}_n = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{2\rho_n}} (\tilde{R}_n + \tilde{R}_n^*)$, и так как $\tilde{P}_n \tilde{Q}_n - \tilde{Q}_n \tilde{P}_n = \frac{h}{2\pi i} 1$, то

$$\tilde{R}_n \tilde{R}_n^* = \frac{1}{2h\rho_n} (\tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{Q}_n^2) + \frac{1}{2} \cdot 1,$$

$$\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n = \frac{1}{2h\rho_n} (\tilde{P}_n^2 + 4\pi^2 \rho_n^2 \tilde{Q}_n^2) - \frac{1}{2} \cdot 1.$$

Поэтому, в частности, $\tilde{R}_n \tilde{R}_n^* - \tilde{R}_n^* \tilde{R}_n = 1$. После этого формула для энергии принимает вид

$$\begin{aligned} H = H_0 + \sum_{n=1}^N h\rho_n \tilde{R}_n^* \tilde{R}_n + \\ + \sum_{n=1}^N \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{2\pi cm_v} \sqrt{\frac{h}{2\rho_v}} (\tilde{R}_n + \tilde{R}_n^*) [P_v^x \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \\ + P_v^y \bar{\mathcal{A}}_{n,y}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + P_v^z \bar{\mathcal{A}}_{n,z}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z)] + C, \end{aligned}$$

где $C = \text{const} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N h\rho_n$. Поскольку аддитивная постоянная в выражении для энергии не имеет смысла, то константу C можно опустить. Это тем более желательно, поскольку при $N \rightarrow +\infty$ C становится бесконечным, что нарушило бы разумную конечность теории.

Эрмитов оператор $\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n$ является гипермаксимальным и обладает чисто дискретным спектром, именно, состоящим из чисел $0, 1, 2, \dots$

Соответствующие собственные функции обозначим через $\psi_0^n(\tilde{q}_n)$, $\psi_1^n(\tilde{q}_n)$, $\psi_2^n(\tilde{q}_n)$, ...

[Если положить $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{\rho_n}} q$ вместо \tilde{q}_n , то

$$\frac{1}{\sqrt{2h\rho_n}} 2\pi \rho_n \tilde{q}_n = 2\pi \sqrt{\frac{\rho_n}{2h}} \tilde{q}_n \quad \text{и} \quad \frac{1}{2h\rho_n} \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_n} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho_n}} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial q},$$

перейдут в $\frac{1}{\sqrt{2}} q$ и $\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial q}$ соответственно, так что получим

$$\tilde{R}_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q + \frac{\partial}{\partial q} \right), \quad \tilde{R}_n^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q - \frac{\partial}{\partial q} \right).$$

$$\tilde{R}_n \tilde{R}_n^* = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} q^2 + \frac{1}{2},$$

$$\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} q^2 - \frac{1}{2}.$$

Теорию собственных значений этих операторов можно найти во многих изложениях, например, Courant—Hilbert, стр. 261, формулы (42), (43) и относящийся к ним материал, а также стр. 76, формулы (60), (61) (русский перевод: Р. Курант и Д. Гильберт, Методы математической физики, ГТТИ, 1933, стр. 84, формулы (30), (31) и стр. 310, формулы (48), (49)); или Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik, стр. 74 и далее.]

Так как $\psi_1(\xi)$, $\psi_2(\xi)$, ... образуют полную ортогональную систему в пространстве ξ , а $\psi_0^n(\tilde{q}_n)$, $\psi_1^n(\tilde{q}_n)$, ... образуют полную ортогональную систему в пространстве \tilde{q}_n , то

$$\Phi_{kM_1 \dots M_N}(\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N) = \psi_k(\xi) \cdot \psi_{M_1}^1(\tilde{q}_1) \dots \psi_{M_N}^N(\tilde{q}_N),$$

$k = 1, 2, \dots, M_1, \dots, M_N = 0, 1, 2, \dots$ образуют полную ортогональную систему в пространстве $\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N$, т. е. в конфигурационном пространстве. Мы можем тогда разложить любую волновую функцию $\Phi = \Phi(\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N)$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi(\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N) &= \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{M_1=0}^{\infty} \dots \sum_{M_N=0}^{\infty} a_{kM_1 \dots M_N} \Phi_{kM_1 \dots M_N}(\xi, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_N) = \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{M_1=0}^{\infty} \dots \sum_{M_N=0}^{\infty} a_{kM_1 \dots M_N} \psi_k(\xi) \psi_{M_1}^1(\tilde{q}_1) \dots \psi_{M_N}^N(\tilde{q}_N). \end{aligned}$$

То обстоятельство, что мы нумеруем полную ортогональную систему и коэффициенты разложения $N+1$ индексом k, M_1, \dots, M_N ,

а не одним, не играет никакой роли. Как показывают рассуждения в II. 2, гильбертово пространство волновых функций Φ можно интерпретировать также как пространство ($N+1$ -кратных) последовательностей $a_{kM_1 \dots M_N}$ (с конечной $\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{M_1=0}^{\infty} \dots \sum_{M_N=0}^{\infty} |a_{kM_1 \dots M_N}|^2$).

Какой же вид принимает оператор H при таком понимании гильбертова пространства? Чтобы выяснить это, вычислим сначала $H\Phi_{kM_1 \dots M_N}$. Так как H_0 действует только на ξ , а $\psi_k(\xi)$ является собственной функцией H_0 с собственным значением W_k и, далее, так как $\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n$ действует лишь на \tilde{q}_n , и $\psi_{M_n}^n(\tilde{q}_n)$ является собственной функцией $\tilde{R}_n^* \tilde{R}_n$ с собственным значением M_n , то

$$\begin{aligned} H\Phi_{kM_1 \dots M_N} = & \left(W_k + \sum_{n=1}^N h\varphi_n M_n \right) \Phi_{kM_1 \dots M_N} + \\ & + \sum_{n=1}^N \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{2\pi cm_v} \sqrt{\frac{h}{2\varphi_n}} [P_v^x \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \\ & + P_v^y \bar{\mathcal{A}}_{n,y}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + P_v^z \bar{\mathcal{A}}_{n,z}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z)] \times \\ & \times \psi_k(\xi) \psi_{M_1}^1(\tilde{q}_1) \dots (\tilde{R}_n + \tilde{R}_n^*) \psi_{M_n}^n(\tilde{q}_n) \dots \psi_{M_N}^N(\tilde{q}_N). \end{aligned}$$

Для любого оператора A , который (подобно выражению [...]) действует лишь на переменную ξ , можно пользоваться разложением

$$A\psi_k(\xi) = \sum_{j=1}^{\infty} (A\psi_k, \psi_j) \cdot \psi_j(\xi) = \sum_j (A)_{kj} \psi_j(\xi),$$

где $(A)_{kj} = (A\psi_k, \psi_j)$. Дальше, как показано в упомянутой выше работе,

$$\tilde{R}_n \psi_M^n(\tilde{q}_n) = \sqrt{M} \psi_{M-1}^n(\tilde{q}_n), \quad \tilde{R}_n^* \psi_M^n(\tilde{q}_n) = \sqrt{M+1} \psi_{M+1}^n(\tilde{q}_n)$$

(при $M=0$ правую часть первого уравнения надо считать, не обращая внимания на появляющееся в ней выражение ψ_{-1}^n , равной нулю). Следовательно,

$$\begin{aligned} H\Phi_{kM_1 \dots M_N} = & \left(W_k + \sum_{n=1}^N h\varphi_n M_n \right) \Phi_{kM_1 \dots M_N} + \\ & + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{h}{2\varphi_n}} \left(\sum_{v=1}^l \frac{e_v}{2\pi cm_v} (P_v^x \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kj} \right) \times \\ & \times (\sqrt{M_n+1} \Phi_{jM_1 \dots M_n+1 \dots M_N} + \sqrt{M_n} \Phi_{jM_1 \dots M_n-1 \dots M_N}). \end{aligned}$$

Теперь оператор H можно представить себе как оператор, действующий на коэффициенты $a_{kM_1 \dots M_N}$ по формуле

$$H_{kM_1 \dots M_N} a_{kM_1 \dots M_N} \Phi_{kM_1 \dots M_N} = \sum_{kM_1 \dots M_N} a'_{kM_1 \dots M_N} \Phi_{kM_1 \dots M_N},$$

где

$$\begin{aligned} Ha_{kM_1 \dots M_N} &= a'_{kM_1 \dots M_N} = \left(W_k + \sum_{n=1}^N h \rho_n M_n \right) a_{kM_1 \dots M_N} + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{h}{2 \rho_n}} \left(\sum_{v=1}^l \frac{e_v}{2 \pi c m_v} (P_v^x \bar{\mathfrak{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kj} \right) \times \\ &\times (\sqrt{M_n} a_{jM_1 \dots M_{n-1} \dots M_N} + \sqrt{M_n + 1} a_{jM_1 \dots M_{n+1} \dots M_N}). \end{aligned}$$

Здесь наше обсуждение оператора H достигло того этапа, когда можно уже осуществить предельный переход $N \rightarrow \infty$. Поскольку система индексации коэффициентов $a_{kM_1 \dots M_N}$ изменяется при таком процессе, то в результате возникает совершенно новый оператор H . Нам нужно ввести компоненты $a_{kM_1 M_2 \dots}$ с бесконечно многими индексами M_1, M_2, \dots , но уже для того, чтобы гарантировать конечность суммы $\sum_{n=1}^{\infty} h \rho_n M_n$, фигурирующей в H , следует ограничиться такими последовательностями M_1, M_2, \dots , которые содержат лишь конечное число элементов, отличных от нуля. Итак, начиная с этого момента будет строиться гильбертово пространство последовательностей $a_{kM_1 M_2 \dots}$ с конечной суммой $\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{M_1=0}^{\infty} \sum_{M_2=0}^{\infty} |a_{kM_1 M_2 \dots}|^2$; при этом индексы k, M_1, M_2 пробегают следующую область: $k = 1, 2, \dots, M_1, M_2, \dots = 0, 1, 2, \dots$, с конечным (но произвольным) числом $M_n \neq 0$ ¹⁴⁴⁾. Окончательно оператор принимает следующий

¹⁴⁴⁾ То, что так описанная система индексов k, M_1, M_2, \dots действительно образует последовательность, можно проще всего доказать следующим образом. Пусть $\pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots$ есть ряд простых чисел 2, 3, 5, ... Произведения $\pi_1^{k-1} \pi_2^{M_1} \pi_3^{M_2} \dots$ в действительности будут конечны, так как, кроме конечного числа исключений, все $M_n = 0$, т. е. сомножители $\pi_{n+1}^{M_n} = 1$. Далее, если k, M_1, M_2, \dots пробегают полностью всю нашу систему индексов, то числа $\pi_1^{k-1} \pi_2^{M_1} \pi_3^{M_2} \dots$ пробегают совокупность всех чисел 1, 2, 3, ... и принимают каждое значение только один раз. Поэтому можно воспользоваться числами $\pi_1^{k-1} \pi_2^{M_1} \pi_3^{M_2} \dots$, чтобы получить однократную систему текущих индексов для коэффициентов $a_{kM_1 M_2 \dots}$.

вид:

$$\mathbf{H} a_{kM_1M_2\dots} = a'_{kM_1M_2\dots} = \left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} h\rho_n M_n \right) a_{kM_1M_2\dots} + \\ + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} w_{kj}^n (\sqrt{M_n+1} a_{jM_1M_2\dots M_n+1\dots} + \sqrt{M_n} a_{jM_1M_2\dots M_n-1\dots}),$$

где w_{kj}^n определяется выражением

$$w_{kj}^n = \sqrt{\frac{h}{2\rho_n}} \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{2\pi c m_v} (P_v^x \bar{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kj}.$$

Прежде чем извлечь из этого результата интересующие нас физические выводы, напомним, что он был получен на основе электродинамической теории света. Было бы желательно установить сперва, достаточно ли проделанного нами шаблонного квантовомеханического преобразования, чтобы передать отклонения света от волновой модели, в частности его на самом деле дискретно-корпускулярную природу. (Конечно, вполне разумно было бы ожидать, что для достижения этой цели надо бы исходить прямо из корпускулярной модели, а не «квантовать» электромагнитное поле, как было сделано выше.)

Непосредственно из вида полученного выражения \mathbf{H} для энергии ясно, что что-то вроде световых корпускул в нем есть. Действительно, если опустить в этом выражении второй член, представляющий своего рода возмущение и который, как вскоре будет видно, является причиной квантовых скачков системы S из одного «стационарного состояния» в другое (т. е. причиной интересующего нас сейчас явления, которое, однако, всегда существенно слабее, чем сама материальная система S и уже присутствующее излучение, и которые, как мы увидим, овеществлены в первом слагаемом \mathbf{H}), то останется только

$$\mathbf{H}_1 a_{kM_1M_2\dots} = \left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} h\rho_n M_n \right) a_{nM_1M_2\dots}$$

Но это выражение для энергии можно интерпретировать следующим образом: это энергия W_k системы S , к которой добавляются энергии $h\rho_n M_n$ ($n = 1, 2, \dots$), в связи с чем напрашивается интерпретация чисел $M_n = 0, 1, 2, \dots$ как чисел частиц, обладающих соответственно энергиями $h\rho_n$. Но $h\rho_n$ — это в точности та энергия, которую, по Эйнштейну, надо приписать световому кванту частоты ρ_n (ср. прим. ¹³⁴⁾ на стр. 179). Итак, строение \mathbf{H}_1 говорит в пользу того представления, что находящееся в полости H электромагнитное поле (за вычетом электростатической части), т. е. L , состоит в действительности из квантов света с частотами ρ_1, ρ_2, \dots и с энергиями

hp_1, hp_2, \dots , числа которых указываются индексами M_1, M_2, \dots ($= 0, 1, 2, \dots$). То обстоятельство, что других частот, помимо ρ_1, ρ_2, \dots , нет, можно сделать легко понятным, если заметить, что эти частоты являются собственными частотами полости H . Действительно, векторы-потенциалы $\tilde{A}_n(xyz) \gamma \cos 2\pi\rho_n(t - \tau)$ представляют собой единственно возможные в H стационарные электромагнитные колебания.

Приведенные соображения и интерпретации обладают поэтому лишь эвристической силой; полностью удовлетворительный и окончательный ответ на наш вопрос мы получим лишь тогда, когда, и если, нам удастся получить выражение H для оператора энергии, отправляясь от модели световых квантов для изучения L . Мы вынуждены были провести сначала классическое рассмотрение из-за того, что доквантумеханическая гипотеза световых квантов не дает нам выражения для энергии взаимодействия кванта света с материей (в этом пункте реинтерпретацию классической электродинамики никогда не удавалось провести). Теперь же мы сможем определить этот член взаимодействия сравнением коэффициентов, если только окажется, что результат, который мы получим, пользуясь общим выражением для энергии взаимодействия, совпадет по форме с оператором H .

Что такое конфигурационное пространство L (вопрос 1.) с точки зрения гипотезы световых квантов? Один-единственный световой квант (в полости H) можно было бы охарактеризовать известными координатами, совокупность которых мы обозначим символом α^{145}). Пусть его стационарные состояния (в H) обладают волновыми

¹⁴⁵⁾ В качестве координат, описывающих световой квант, можно использовать, например, его импульсы p_x, p_y, p_z , а также координату π , определяющую его состояние поляризации. Компоненты p_x, p_y, p_z определяют направление движения светового кванта, т. е. его направляющие косинусы $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z (\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2 = 1)$, равно как его частоту ν , длину волны λ и энергию, ибо согласно Эйнштейну длина вектора импульса равна $\frac{\hbar\nu}{c}$ (ср. прим.

¹³⁴⁾ на стр. 179), и следовательно,

$$p_x = \frac{\hbar\nu}{c} \alpha_x, \quad p_y = \frac{\hbar\nu}{c} \alpha_y, \quad p_z = \frac{\hbar\nu}{c} \alpha_z,$$

т. е.

$$\nu = \frac{c}{\hbar} \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}, \quad \lambda = \frac{c}{\nu}, \quad \text{энергия} = \hbar\nu,$$

$$\alpha_x = \frac{cp_x}{\hbar\nu}, \quad \alpha_y = \frac{cp_y}{\hbar\nu}, \quad \alpha_z = \frac{cp_z}{\hbar\nu}.$$

Здесь, однако, начинает мешать то обстоятельство, что наши собственные колебания $\tilde{A}_n(x, y, z) \gamma \cos 2\pi\rho_n(t - \tau)$ являются стоячими волнами — иных и не может быть в полости H из-за отражающих стенок, — а такие собст-

функциями $\psi_1(u)$, $\psi_2(u)$, ... (которые образуют полную ортонормированную систему) и энергиями E_1 , E_2 , ... Эти стационарные состояния отвечают электромагнитным собственным колебаниям $\bar{\mathcal{A}}_1$, $\bar{\mathcal{A}}_2$, ... с частотами ρ_1 , ρ_2 , ... (Согласно представлениям Эйнштейна должно быть $E_n = \hbar\rho_n$, что также будет доказано.) В связи с этим надо заметить следующее: уже при электромагнитном рассмотрении мы так нормировали энергию света, что ее минимальное значение было равным 0, оно соответствовало индексам $M_1 = M_2 = \dots = 0$. Тем самым мы признали и несуществование за возможное состояние света, и это объективно оправдано. Ведь световые кванты могут в самом деле испускаться и поглощаться, т. е. создаваться и уничтожаться. Между тем такое представление совершенно чуждо квантовой механике: каждая ча-

венные колебания $\bar{\mathcal{A}}_n$ нельзя поставить в соответствие ни с каким «направлением луча» α_x , α_y , α_z . Непосредственно ясно, что наряду с направлением α_x , α_y α_z , во всяком случае, имеется и противоположное направление $-\alpha_x$, $-\alpha_y$, $-\alpha_z$, и то же утверждение справедливо и для импульса. Следовательно, в полости H надо пользоваться не p_x , p_y , p_z , π , а какими-то другими координатами.

В некоторых новых изложениях рассматриваемого предмета это затруднение преодолевается с помощью следующего приема. Будем считать, что полость H является параллелепипедом

$$-A < x < A, \quad -B < y < B, \quad -C < z < C,$$

граничные поверхности которого $x = \pm A$, $y = \pm B$, $z = \pm C$ не считаются отражающими стенками. Отождествим вместо этого

$$x = A \text{ с } x = -A, \quad y = B \text{ с } y = -B, \quad z = C \text{ с } z = -C.$$

Это означает, что излучение, падающее на стенку $x = A$ в точке A , y , z возобновляется в точке $-A$, y , z свое движение в том же направлении (снова внутри полости H), как если бы ничего не случилось, и т. д. (ср., например, статью Л. Ландау и Р. Пайерлса, L. Landau und R. Peterls, Z. Physik, 62 (1930)). Можно сказать также, что пространство считается периодическим в направлениях x , y , z с соответствующими периодами $2A$, $2B$, $2C$.

Аналитическое рассмотрение остается прежним, но граничными условиями теперь будут $\mathfrak{A}(A, y, z) = \mathfrak{A}(-A, y, z)$, $\mathfrak{A}(x, B, z) = \mathfrak{A}(x, -B, z)$, $\mathfrak{A}(x, y, C) = \mathfrak{A}(x, y, -C)$ (вместо прежних: $\frac{\partial}{\partial n} \mathfrak{A} = 0$ на границе), а «элементарные решения», по которым идет разложение, примут вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \cos \\ \sin \end{array} \right\} [2\pi v(t - c(\alpha_x x + \alpha_y y + \alpha_z z))]$$

(а не $\tilde{\mathfrak{A}}(x, y, z)\tilde{\rho}(t)$). Можно легко найти принадлежащие собственным решениям $v = \rho_n$ и

$$\alpha_x = \alpha_{n, x}, \quad \alpha_y = \alpha_{n, y}, \quad \alpha_z = \alpha_{n, z} \quad (n = 1, 2, \dots).$$

Дальнейшее же развитие теории совпадает с приводимым в тексте.

стица привносит свои координаты в конфигурационное пространство системы и тем самым настолько интимно входит в формальное описание всей системы, что фактически ведет себя, как абсолютно неуничтожаемая. Поэтому и после уничтожения ей приходится приписывать своего рода латентное существование, когда ее координаты все еще принадлежат конфигурационному пространству. Следовательно, одно из состояний $\psi_n(u)$ с энергией $E_n = 0$ должно отвечать несуществованию кванта света, — мы предпочитаем обозначать такое состояние через $\psi_0(u)$ ($E_0 = 0$), так что волновые функции $\psi_1(u)$, $\psi_2(u)$, ... описывают существующий световой квант, но только $\psi_0(u)$, $\psi_1(u)$, $\psi_2(u)$, ... образуют полную ортогональную систему.

Перейдем теперь к рассмотрению L , системы всех световых квантов. Поскольку в счет идут и неприсутствующие кванты, то L состоит из столь многих квантов, что их никогда не может оказаться больше этого числа, т. е. количество световых квантов в L бесконечно велико. Поскольку все же нецелесообразно с самого начала иметь дело с бесконечно многими составляющими системы L , то будем сперва поступать так, как если бы имелось всего S световых квантов ($S = 1, 2, \dots$), и только в конце перейдем к пределу $S \rightarrow +\infty$ ¹⁴⁶). Перенумеруем эти световые кванты с помощью чисел $1, \dots, S$ и обозначим их координаты через u_1, \dots, u_S . Конфигурационное пространство системы L будет тогда описываться переменными u_1, \dots, u_S , а конфигурационное пространство $S+L$ — переменными ξ, u_1, \dots, u_S . Наиболее общей волновой функцией $S+L$ будет поэтому $f(\xi, u_1, \dots, u_S)$, а совокупность функций $\varphi_k(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_S}(u_S)$, $k = 1, 2, \dots, n_1, \dots, n_S = 0, 1, 2, \dots$, образует полную ортогональную систему.

Далее, световые кванты обладают фундаментальным свойством быть совершенно тождественными друг другу. Это значит, что на свете не существует способа различить два кванта с одинаковыми координатами u . Иными словами, состояние, в котором световые кванты с номерами m и n имеют некие координаты, например $u_m = u'$, $u_n = u''$, нельзя отличить от состояния, в котором $u_m = u''$, $u_n = u'$. (Это классический, а не квантовомеханический, способ описания, так как мы задали значения u , а не волновую функцию $\varphi(u)$!) Квантовомеханически это будет означать, что состояния, принадлежащие волновым функциям $f(\xi, u_1, \dots, u_m, \dots, u_n, \dots, u_S)$ и

¹⁴⁶⁾ Этот предельный переход $S \rightarrow +\infty$ отличается от предельного перехода $N \rightarrow +\infty$, проделанного в электромагнитной теории! Действительно, если и индексы M_1, M_2, \dots интерпретировать как числа световых квантов, то N будет ограничивать число некогерентных световых квантов (т. е. световых квантов с несовпадающими частотой, направлением распространения — они совместно определяют импульс — и поляризацией; ср. прим. ¹⁴³⁾ на стр. 197), тогда как S ограничивает число световых квантов вообще.

$f(\xi, u_1, \dots, u_n, \dots, u_m, \dots, u_S)$ неразличимы. Иными словами, любая физическая величина \mathfrak{R} имеет в обоих этих состояниях одно и то же математическое ожидание (а значит, поскольку то же справедливо для $F(\mathfrak{R})$, каждая физическая величина имеет одну и ту же статистику — ср. в III. 1 обсуждение предложений E_1 , и E_2). Обозначим функциональную операцию, которая переставляет u_m и u_n , через O_{mn} (O_{mn} является одновременно эрмитовым и унитарным оператором $O_{mn}^2 = 1$, в чем легко убедиться), тогда сделанное утверждение будет означать, что математическое ожидание \mathfrak{R} по какой-нибудь волновой функции f будет совпадать с математическим ожиданием по волновой функции $O_{mn}f$, т. е.

$$(Rf, f) = (RO_{mn}f, O_{mn}f) = (O_{mn}RO_{mn}f, f),$$

откуда

$$R = Q_{mn}RO_{mn}, \quad \text{или же} \quad RO_{mn} = O_{mn}R.$$

Это означает, что в рассматриваемом случае допустимы лишь такие операторы R , которые коммутируют со всеми O_{mn} ($m, n = 1, \dots, S$, $m \neq n$), т. е. (вспоминая определение O_{mn}) такие, в которые все координаты u_1, \dots, u_S входят симметрично.

Волновая функция f , симметричная по всем переменным u_1, \dots, u_S , т. е. для которой $O_{mn}f = f$ ($m, n = 1, \dots, S$, $m \neq n$), переходит под действием такого оператора R в новую волновую функцию того же рода: $O_{mn}Rf = RO_{mn}f = Rf$. Такие f образуют замкнутое линейное многообразие, т. е. они образуют гильбертово подпространство $\tilde{\mathfrak{H}}_\infty^{(S)}$ в гильбертовом пространстве $\mathfrak{H}_\infty^{(S)}$ всех функций f , а операторы R отображают элементы $\tilde{\mathfrak{H}}_\infty^{(S)}$ на элементы из того же подпространства, т. е. их можно рассматривать как операторы в гильбертовом пространстве $\tilde{\mathfrak{H}}_\infty^{(S)}$. Таким образом, пространство $\tilde{\mathfrak{H}}_\infty^{(S)}$ столь же полезно для нужд квантовой механики, как и первоначально рассматривавшееся $\mathfrak{H}_\infty^{(S)}$, и возникает вопрос, не надо ли ввиду симметрии L по отношению к обменам световыми квантами ограничиться симметричными волновыми функциями, т. е. заменить $\mathfrak{H}_\infty^{(S)}$ на $\tilde{\mathfrak{H}}_\infty^{(S)}$. Мы сделаем это, и результат, т. е. желаемое полное совпадение с выражением для H , полученным в электромагнитной теории, оправдает нас post factum¹⁴⁷⁾.

Волновые функции $\varphi_k(\xi)\psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_S}(u_S)$ образуют полную ортонормированную систему в $\mathfrak{H}_\infty^{(S)}$. Пользуясь этой системой, построим теперь полную ортонормированную систему в $\tilde{\mathfrak{H}}_\infty^{(S)}$. Пусть M_0 ,

147) Такая замена $\mathfrak{H}_\infty^{(S)}$ на $\tilde{\mathfrak{H}}_\infty^{(S)}$ равнозначна замене обычной статистики так называемой статистикой Бозе — Эйнштейна, если рассматривать следствия этой замены безотносительно к квантовой механике. Ср. по этому поводу работы Дирака в прим. 138) на стр. 189.

M_1, \dots — некоторые числа $= 0, 1, 2, \dots$, удовлетворяющие условию $M_0 + M_1 + \dots = S$ (так что лишь конечное число из них отлично от нуля). Обозначим через $[M_0, M_1, \dots]$ совокупность всех систем индексов n_1, \dots, n_S , в которых 0 фигурирует M_0 раз, 1 фигурирует M_1 раз, \dots . Имеется в точности $M_0! M_1! \dots$ различных систем. Положим

$$\Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \dots u_S) = \sum_{n_1 \dots n_S \in [M_0 M_1 \dots]} \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_S}(u_S).$$

Так как волновая функция $\Phi_{M_0 M_1 \dots}$ является суммой $M_0! M_1! \dots$ попарно ортогональных слагаемых, модуль каждого из которых равен 1, то квадрат модуля этой волновой функции будет суммой $M_0! M_1! \dots$ единиц, так что ее модуль будет равен $\sqrt{M_0! M_1! \dots}$. Две различные волновые функции содержат попарно ортогональные слагаемые, а потому сами взаимно ортогональны. Волновые функции

$$\psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \dots u_S) = \frac{1}{\sqrt{M_0! M_1! \dots}} \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \dots u_S)$$

образуют, таким образом, ортонормированную систему. Волновая функция $f(\xi, u_1, \dots, u_S)$, симметричная по u_1, \dots, u_S , имеет одно и то же внутреннее произведение со всеми слагаемыми, образующими функцию $\varphi_k(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S)$, значит, она ортогональна к каждому из них, если она ортогональна к $\varphi_k(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S)$, т. е. к $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S)$. Следовательно, если она ортогональна ко всем $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1, \dots, u_S)$, то она будет ортогональна ко всем $\varphi_k(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_S}(u_S)$ и, следовательно, она $\equiv 0$. Стало быть, волновые функции $\varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \dots u_S)$ (которые сами принадлежат к $\bar{\mathfrak{H}}_\infty^{(S)}$) образуют полную ортонормированную систему в $\bar{\mathfrak{H}}_\infty^{(S)}$.

Рассмотрим теперь набор энергий, выступающих в системе $S+L$. Во-первых, [2.α)] там имеется энергия системы S , оператор которой для S определяется уравнением $H_0 \varphi_k(\xi) = W_k \varphi_k(\xi)$ и, значит, для $S+L$ — уравнением

$$H_0 \varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \dots u_S) = W_k \varphi_k(\xi) \psi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \dots u_S).$$

Во-вторых, [2.β)] каждый световой квант l' обладает энергией $H_{l'} \psi_n(u) = E_n \psi_n(u)$. Поэтому m -й квант ($m = 1, \dots, S$) обладает в $S+L$ энергией

$$H_{l_m} \varphi_k(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_m}(u_m) \dots \psi_{n_S}(u_S) =$$

$$= E_{n_m} \varphi_k(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_m}(u_m) \dots \psi_{n_S}(u_S).$$

так что нужно образовать сумму $H_l = H_{l_1} + \dots + H_{l_S}$. Наконец, [2.γ] пусть энергия взаимодействия светового кванта l' с системой S описывается, пока еще точно не известным, оператором V , который мы представим в виде матрицы:

$$V_{l'} \varphi_k(\xi) \psi_n(u) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} V_{kn/jp} \varphi_j(\xi) \psi_p(u).$$

В системе $S+L$, следовательно, будем иметь для m -го светового кванта

$$\begin{aligned} V_{l_m} \varphi_k(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_m}(u_m) \dots \psi_{n_S}(u_S) &= \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} V_{kn_m/jp} \varphi_j(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_p(u_m) \dots \psi_{n_S}(u_S) = \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{p_1 \dots p_m \dots p_S=0}^{\infty} \delta(n_1 - p_1) \dots V_{kn_m/jp_m} \dots \delta(n_S - p_S) \times \\ &\quad \times \varphi_j(\xi) \psi_{p_1}(u_1) \dots \psi_{p_m}(u_m) \dots \psi_{p_S}(u_S) \end{aligned}$$

($\delta(n)$ равно 1 при $n=0$, 0 при $n \neq 0$), и нужно образовать сумму $H_w = V_{l_1} + \dots + V_{l_S}$.

Собирая все вместе, будем иметь

$$\begin{aligned} H_{\varphi_k}(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_S}(u_S) &= \\ &= (W_k + E_{n_1} + \dots + E_{n_S}) \varphi_k(\xi) \psi_{n_1}(u_1) \dots \psi_{n_S}(u_S) + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{p_1 \dots p_S=0}^{\infty} \sum_{m=1}^S \delta(n_1 - p_1) \dots V_{kn_m/jp_m} \dots \delta(n_S - p_S) \times \\ &\quad \times \varphi_j(\xi) \psi_{p_1}(u_1) \dots \psi_{p_S}(u_S). \end{aligned}$$

В результате легкого вычисления это выражение принимает вид

$$\begin{aligned} H_{\varphi_k}(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \dots u_S) &= \\ &= \left(W_k + \sum_{n=0}^{\infty} M_n E_n \right) \varphi_k(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots}(u_1 \dots u_S) + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n, p=0}^{\infty} M_n V_{kn/jp} \varphi_j(\xi) \Phi_{M_0 M_1 \dots M_{n-1} \dots M_{p+1} \dots}(u_1 \dots u_S) \end{aligned}$$

(для $n = p$ надо заменить $\dots M_n - 1 \dots M_p + 1 \dots$ на $\dots M_n \dots$) и, значит, для ортонормированных функций

$$\begin{aligned} H\varphi_k(\xi)\psi_{M_0M_1}\dots(u_1\dots u_S) &= \\ &= \left(W_k + \sum_{n=0}^{\infty} M_n E_n \right) \varphi_k(\xi) \psi_{M_0M_1}\dots(u_1\dots u_S) + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{m, p=0}^{\infty} \sqrt{M_n(M_p + 1 - \delta(n-p))} V_{kn/jp} \varphi_j(\xi) \times \\ &\quad \times \psi_{M_0M_1\dots M_{n-1}\dots M_{p+1}\dots}(u_1\dots u_S). \end{aligned}$$

Общую волновую функцию $f(\xi, u_1, \dots, u_S)$ из $\bar{\mathfrak{H}}_{\infty}^{(S)}$ можно разложить по этим ортонормированным функциям:

$$f(\xi u_1 \dots u_S) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\substack{M_0 M_1 \dots \\ (M_0 + M_1 + \dots = S)}} a_{kM_0M_1\dots} \varphi_k(\xi) \Psi_{M_0M_1\dots}(u_1 \dots u_S).$$

Следовательно, $\bar{\mathfrak{H}}_{\infty}^{(S)}$ можно представлять себе и как гильбертово пространство последовательностей $a_{kM_0M_1\dots}$, $k=1, 2, \dots, M_0, M_1, \dots = 0, 1, 2, \dots, M_0 + M_1 + \dots = S$, с конечной суммой $\sum_{kM_0M_1\dots} |a_{kM_0M_1\dots}|^2$. В этом случае оператор

$$Ha_{kM_0M_1\dots} = a'_{kM_0M_1\dots}$$

определяется из уравнения

$$\begin{aligned} H \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\substack{M_0 M_1 \dots = 0 \\ (M_0 + M_1 + \dots = S)}} a_{kM_0M_1\dots} \varphi_k(\xi) \Psi_{M_0M_1\dots}(u_1 \dots u_S) &= \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\substack{M_0 M_1 \dots = 0 \\ (M_0 + M_1 + \dots = S)}} a'_{kM_0M_1\dots} \varphi_k(\xi) \Psi_{M_0M_1\dots}(u_1 \dots u_S), \end{aligned}$$

так что

$$\begin{aligned} Ha_{kM_0M_1\dots} &= a'_{kM_0M_1\dots} = \left(W_k + \sum_{n=0}^{\infty} M_n E_n \right) a_k M_0 M_1 \dots + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{m, p=0}^{\infty} \sqrt{M_n(M_p + 1 - \delta(n-p))} \overline{V_{kn/jp}} a_{jm_0M_1\dots M_{n-1}\dots M_{p+1}\dots} \end{aligned}$$

(k, j и n, p обменялись ролями по сравнению с формулой для $\varphi_k(\xi)\psi_{M_0M_1\dots}(u_1\dots u_S)$; вместо $V_{jp|kn}$ мы написали $\overline{V_{kn/jp}}$, учитывая эрмитовость V .)

Перейдем к подготовке перехода к пределу $S \rightarrow +\infty$. Так как M_0 определяется числами M_1, M_2, \dots , согласно соотношению

$M_0 = S - M_1 - M_2 - \dots$, то можно вместо $a_{kM_1M_2\dots}$ писать $a_{kM_1M_2\dots}$. При такой записи индексы оказываются ограниченными условиями $k = 1, 2, \dots, M_1, M_2, \dots = 0, 1, 2, \dots, M_1 + M_2 + \dots \leq S$. Если заметить, что $E_0 = 0$ и ввести обозначения $SV_{ko/jo} = V_{k/j}, \sqrt{S} V_{ko/jn} = V_{k/jn}, \sqrt{S} V_{kn/jo} = \bar{V}_{j/kn}$ ($V_{kn/jp}$ — эрмитова матрица!), то найдем

$$\begin{aligned} \mathbf{H} a_{kM_1M_2\dots} &= a'_{kM_1M_2\dots} = \left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} M_n E_n \right) a_{kM_1M_2\dots} + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} V_{k/j} a_{jM_1M_2\dots} + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{M_n} \sqrt{\frac{S - M_1 - M_2 - \dots + 1}{S}} V_{j/kn} a_{jM_1M_2\dots M_{n-1}\dots} + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{M_n + 1} \sqrt{\frac{S - M_1 - M_2 - \dots}{S}} \bar{V}_{k/jn} a_{jM_1M_2\dots M_{n+1}\dots} + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n,p=1}^{\infty} \sqrt{M_n(M_p + 1)} \bar{V}_{kn/jp} a_{jM_1M_2\dots M_{n-1}\dots M_p + 1\dots}. \end{aligned}$$

Теперь можно устремить $S \rightarrow +\infty$. Коэффициенты $a_{kM_1M_2\dots}$ будут тогда снова определены для всех последовательностей $kM_1M_2\dots$, в которых $k = 1, 2, \dots, M_1, M_2, \dots = 0, 1, 2, \dots$, причем только лишь конечное (но произвольное) число $M_n \neq 0$ (ср. прим. 144) на стр. 201), а из \mathbf{H} получится

$$\begin{aligned} \mathbf{H} a_{kM_1M_2\dots} &= a'_{kM_1M_2\dots} = \left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} M_n E_n \right) a_{kM_1M_2\dots} + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} V_{k/j} a_{jM_1M_2\dots} + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} (V_{j/kn} \sqrt{M_n + 1} a_{jM_1M_2\dots M_{n+1}\dots} + \\ &+ \bar{V}_{k/jn} \sqrt{M_n} a_{jM_1M_2\dots M_{n-1}\dots}) + \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n,p=1}^{\infty} \bar{V}_{kn/jp} \sqrt{M_n(M_p + 1)} a_{jM_1M_2\dots M_{n-1}\dots M_p + 1\dots}. \end{aligned}$$

Сходство с уравнением, полученным на основе электромагнитной теории излучения, теперь очевидно; чтобы сделать оба выражения тождественными, следует лишь положить

$$E_n = h\rho_n, \quad V_{k/j} = 0, \quad V_{k/jn} = w_{jk}^n = \bar{w}_{kj}^n, \quad V_{kn/jp} = 0,$$

Итак, мы видим, что концепция световых квантов оказывается тождественной классической электромагнитной концепции, если:

1. Последняя переписывается в соответствии с общей квантовомеханической схемой.

2. Энергия каждого светового кванта, в соответствии с правилом Эйнштейна, приравнивается \hbar -кратной частоте.

3. Энергия взаимодействия светового кванта с материей определяется правильным образом (ср. приведенное выше выражение для V).

На этом пути блестяще разрешается один из труднейших парадоксов квантовой теории в ее ранней форме — двойственная природа света (электромагнитные волны и дискретные corpusкулы световых квантов)¹⁴⁸⁾. Конечно, трудно найти прямую, наглядную интерпретацию только что вычисленной энергии взаимодействия V света и материи. Это тем более трудно, что ее единственно отличные от нуля матричные элементы $V_{kn/jp}$ (т. е. для которых $n=0$, $p\neq 0$ или $n\neq 0$, $p=0$) зависят от числа всех возможных световых квантов S (они пропорциональны $\frac{1}{\sqrt{S}}$), а ведь окончательно нужно положить $S \rightarrow +\infty$. Тем не менее можно примириться с этим, если учесть, что любое модельное описание является лишь приближением, тогда как точное содержание теории и как раз дается выражением для оператора H .

Возвратимся теперь к нашей первоначальной задаче: определению вероятностей перехода. Согласно временному уравнению Шредингера, изменения в коэффициентах $a_{kM_1M_2\dots} = a_{kM_1M_2\dots}(t)$ определяются из

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} a_{kM_1M_2\dots} = -H a_{kM_1M_2\dots} = -\left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} \hbar \rho_n M_n \right) a_{kM_1M_2\dots} - \\ - \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} w_{kj}^n (\sqrt{M_n+1} a_{jM_1M_2\dots M_n+1\dots} + \sqrt{M_n} a_{jM_1M_2\dots M_n-1\dots}).$$

Так как главное изменение в $a_{kM_1M_2\dots}$ вызывается первым членом этого выражения, то целесообразно выделить его с помощью подстановки

$$a_{kM_1M_2\dots}(t) = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \left(W_k + \sum_{n=1}^{\infty} \hbar \rho_n M_n \right) t} \cdot b_{kM_1M_2\dots}(t).$$

¹⁴⁸⁾ Дальнейшие подробности относительно того, как понималась эта «двойственная природа» и как парадоксально она воспринималась, читатель найдет в литературе того времени. См., например, работы, указанные в прим. 6), стр. 13.

Часто говорилось, что квантовая механика предписывает материю ту же двойственную природу, поскольку дискретные частицы (электроны, протоны)

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} b_{kM_1M_2\dots} &= \\ &= -\frac{2\pi i}{\hbar} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} w_{kj}^n \cdot \left(e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (W_j - W_k + h_p n) t} \sqrt{M_n + 1} b_{jM_1M_2\dots M_n+1\dots} - \right. \\ &\quad \left. - e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (W_j - W_k - h_p n) t} \sqrt{M_n} b_{jM_1M_2\dots M_n-1\dots} \right). \end{aligned}$$

Физический смысл коэффициентов $a_{kM_1M_2\dots}$ и $b_{kM_1M_2\dots}$ можно уяснить себе из способа их введения: при конечном $\bar{M}_0 + \bar{M}_1 + \dots + \bar{M}_2 + \dots = S$ волновая функция $\varphi_{\bar{k}}(\xi) \Psi_{\bar{M}_0 \bar{M}_1 \dots} (u_1 \dots u_S)$ описывала состояние, в котором система S находилась на k -й квантовой орбите и имелось $\bar{M}_0, \bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ световых квантов в состояниях $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots$ соответственно, т. е. \bar{M}_0 световых квантов в состоянии «несуществования», а $\bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ в состояниях, принадлежащих соответствующим собственным колебаниям $\bar{\mathcal{A}}_1, \bar{\mathcal{A}}_2, \dots$. Коэффициенты $a_{kM_1M_2\dots}$, принадлежащие этой волновой функции, имеют тогда вид

$$a_{kM_1M_2\dots} = \delta(k - \bar{k}) \delta(M_1 - \bar{M}_1) \delta(M_2 - \bar{M}_2) \dots$$

(Лишь конечное число множителей отлично от 1, так как равенство $M_n = \bar{M}_n = 0$ имеет лишь конечное число исключений.) Это, конечно, останется справедливым и после перехода к пределу $S \rightarrow +\infty$. В случае произвольного состояния $a_{kM_1M_2\dots}$ системы $S + L$ упомянутая конфигурация (если она измеряется, см. сказанное в III. 3 по поводу невырожденного чисто дискретного спектра) имеет, следовательно, вероятность

$$\begin{aligned} \left| \sum_{kM_1M_2\dots} a_{kM_1M_2\dots} \delta(k - \bar{k}) \delta(M_1 - \bar{M}_1) \delta(M_2 - \bar{M}_2) \dots \right|^2 &= \\ &= |a_{\bar{k}\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}|^2 = |b_{\bar{k}\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}|^2. \end{aligned}$$

В частности, полная вероятность того, что система S находится на k -й квантовой орбите, равна $\theta_{\bar{k}} = \sum_{\bar{M}_1 \bar{M}_2 \dots} |b_{\bar{k}\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}|^2$.

также описываются волновыми функциями и проявляют типично волновые свойства, например дифрагируют на решетке. [Ср. эксперименты D a v i s o n'а — Г е т е р'а, Phys. Rev. 30 (1927), Proc. Nat. Acad. Sci. U. S. A. 14 (1928), а также C. P. T h o m p s o n'а, Proc. Roy. Soc. 117 (1928) и R i p p'а, Ann. Physik 85 (1928).] В противоположность этому, однако, надо подчеркнуть, что квантовая механика выводит обе «природы» из одной единой теории элементарных явлений. Парадокс прежней квантовой теории состоял в том, что для объяснения эксперимента приходилось попеременно привлекать две противоречащих друг другу теории (электромагнитную теорию Максвелла — Герца и теорию световых квантов Эйнштейна).

Пусть первоначально ($t = 0$) атом находился в k -м состоянии и пусть имелось $\bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$ световых квантов в состояниях $\bar{\mathfrak{A}}_1, \bar{\mathfrak{A}}_2, \dots$ т. е.

$$b_{kM_1M_2\dots} = a_{kM_1M_2\dots} = \delta(k - \bar{k}) \delta(M_1 - \bar{M}_1) \delta(M_2 - \bar{M}_2) \dots$$

В силу приведенного выше дифференциального уравнения и как первое приближение (т. е. для настолько коротких промежутков времени t , что правая часть может считаться постоянной) отличными от нуля будут вообще лишь те из $\frac{\partial}{\partial t} b_{kM_1M_2\dots}$, для которых либо набор $M_1, M_2, \dots, M_n + 1, \dots$, либо набор $M_1, M_2, \dots, M_n - 1, \dots$ совпадает с набором $\bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots$: т. е. все $k, \bar{M}_1, \bar{M}_2, \dots, \bar{M}_n \pm 1, \dots$. После интегрирования найдем для них

$$b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n+1\dots} = w_{k\bar{k}}^n \frac{1 - e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (W_{\bar{k}} - W_k - h_{\rho_n}^0) t}}{W_{\bar{k}} - W_k - h_{\rho_n}^0} \sqrt{\bar{M}_n + 1},$$

$$b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n-1\dots} = w_{k\bar{k}}^n \frac{1 - e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} (W_{\bar{k}} - W_k + h_{\rho_n}^0) t}}{W_{\bar{k}} - W_k + h_{\rho_n}^0} \sqrt{\bar{M}_n}.$$

Все прочие $b_{kM_1M_2\dots}$ равны в этом приближении нулю. (За исключением коэффициента $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}$, который в этом приближении, т. е. с точностью до t^2 -членов, должен был бы равняться своему начальному значению 1. Тем не менее тот вывод, что $\frac{\partial}{\partial t} b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots} = 0$, становится сомнительным из-за того, что правая часть нашего дифференциального уравнения содержит в этом случае в нашем приближении бесконечно много членов $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n\pm 1\dots}$, не обращающихся в нуль. Поэтому из малости каждого из этих слагаемых — при малых t — нельзя еще делать вывод о малости их суммы. И действительно, вычисление приближений более высоких порядков показало бы, что отклонение $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}$ от 1 пропорционально t , а не t^2 ¹⁴⁹⁾). Поскольку, однако,

$$\sum_{kM_1M_2\dots} |b_{kM_1M_2\dots}|^2 = \sum_{kM_1M_2\dots} |a_{kM_1M_2\dots}|^2 = 1,$$

так что

$$|b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}|^2 = 1 - \sum_{kM_1M_2\dots \neq k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots} |b_{kM_1M_2\dots}|^2,$$

¹⁴⁹⁾ Точное решение этого дифференциального уравнения было дано Weißkopf'ом и Wigner'ом (Z. Physik 63 (1930)). С помощью этого решения можно убедиться в справедливости сделанных утверждений.

то прямое вычисление коэффициента $b_{\bar{k}\bar{M}_1\bar{M}_2\dots}$ на самом деле не обязательно.)

Из приведенных формул ясно видна качественная природа процесса: коэффициент $b_{\bar{k}\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n+1}$, соответствующий испусканию светового кванта $\bar{\mathfrak{A}}_n$ (с частотой ρ_n), становится тем больше, чем меньше знаменатель $W_{\bar{k}} - W_k - h\rho_n$, т. е. чем ближе частота света ρ_n к «боровской частоте» $\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}$ ¹⁵⁰⁾; аналогичным образом коэффициент $b_{\bar{k}\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n-1\dots}$, соответствующий поглощению, возрастает при приближении ρ_n к $\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}$. Мы видим, таким образом, что боровское соотношение частот выполняется не точно (ведь ρ_n предоставляют в наше распоряжение не все частоты), но все же с подавляюще большой вероятностью — если время t мало, а частоты ρ_n расположены очень густо (как то и будет для большой полости H). Далее, частоту таких процессов увеличивают и матричные элементы w_{kk}^n . Мы вскоре сможем отождествить их с вероятностями переходов.

Из нашей формулы для $b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n\pm 1\dots}$ следует, что

$$\left| b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n+1\dots} \right|^2 = \frac{2}{h^2} (\bar{M}_n + 1) |w_{kk}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\rho_n - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right) t}{\left(\rho_n - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right)^2} \quad 151),$$

$$\left| b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n-1\dots} \right|^2 = \frac{2}{h^2} \bar{M}_n |w_{kk}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\rho_n - \frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right) t}{\left(\rho_n - \frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right)^2} \quad 151),$$

$$\left| b_{k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots} \right|^2 = 0 \text{ для } k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots \neq \bar{k}\bar{M}_1\bar{M}_2\dots, k\bar{M}_1\bar{M}_2\dots\bar{M}_n \pm 1\dots$$

¹⁵⁰⁾ Н. Бор, как известно, установил в 1913 г. фундаментальный принцип (см. ссылку в прим. ⁵⁾ на стр. 12), согласно которому при переходах из стационарного состояния с энергией $W^{(1)}$ в стационарное состояние с энергией $W^{(2)}$ атом испускает свет частоты $\frac{W^{(1)} - W^{(2)}}{h}$ (конечно, $W^{(1)} > W^{(2)}$).

В нашем случае этому соответствует $\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}$.

¹⁵¹⁾ Имеет место

$$|e^{ix} - 1|^2 = (e^{ix} - 1)(\overline{e^{ix} - 1}) = (e^{ix} - 1)(e^{-ix} - 1) =$$

$$= 2 - e^{ix} - e^{-ix} = 2 - 2 \cos x = 2(1 - \cos x).$$

Отсюда получаем для $\theta_k, k \neq \bar{k}$, выражение

$$\theta_k = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{h^2} (\bar{M}_n + 1) |w_{k\bar{k}}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\rho_n - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right) t}{\left(\rho_n - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right)^2} +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{h^2} \bar{M}_n |w_{k\bar{k}}^n|^2 \frac{1 - \cos 2\pi \left(\rho_n - \frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right) t}{\left(\rho_n - \frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right)^2}.$$

(Первая сумма $\sum_{n=1}^{\infty}$ соответствует испусканию, а вторая сумма $\sum_{n=1}^{\infty}$ — поглощению.) Чтобы можно было придать этим θ_k замкнутый вид, надо сделать упрощающие предположения. Именно, будем считать, что, с одной стороны, полость H очень велика (т. е. ее объем $\gamma \rightarrow \infty$), а с другой стороны, будем подсчитывать собственные колебания \bar{A}_n в H статистически. Для этой цели объединим в каждой из приведенных сумм члены, принадлежащие частотам ρ_n , заключенным в интервале между ρ и $\rho + d\rho$ (вместо $w_{k\bar{k}}^n$ мы подставим его значение и предположим, что $d\rho \ll \rho$):

$$\frac{1}{4\pi^2 c^2 h \rho} \left[\sum_{\rho \leq \rho_n < \rho + d\rho} \left| \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{m_v} (P_v^x \bar{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{k\bar{k}} \right|^2 (\bar{M}_n + 1) \right] \times$$

$$\times \frac{1 - \cos 2\pi \left(\rho - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right) t}{\left(\rho - \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h} \right)^2},$$

а затем повторим эту процедуру, но с \bar{M}_n вместо $\bar{M}_n + 1$ и $\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}$ вместо $\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}$. После этого остается еще вычислить квадратные скобки [...].

Заметим теперь, что при обычном способе описания не задают значений M_1, M_2, \dots , но ограничиваются гораздо меньшим, а именно заданием интенсивностей, т. е. заданием энергии излучения $I(\rho) d\rho$, приходящейся на спектральный интервал от ρ до $\rho + d\rho$ и единице

объема. Это означает, что

$$\sum_{\rho \leq \rho_n < \rho + d\rho} h \rho_n \bar{M}_n \approx h \rho \sum_{\rho \leq \rho_n < \rho + d\rho} \bar{M}_n = \nu I(\rho) d\rho,$$

$$\sum_{\rho \leq \rho_n < \rho + d\rho} \bar{M}_n = \frac{\nu I(\rho)}{h\rho} d\rho.$$

Число частот ρ_n , лежащих в интервале $\rho \leq \rho_0 < \rho + d\rho$, равно $\frac{8\pi\nu\rho^2}{c^2} d\rho$, согласно всегда справедливой асимптотической формуле Вейля (ср. ссылку в прим. ¹⁴⁰⁾ на стр. 192) $\frac{8\pi\nu\rho^2}{c^2} d\rho$, и, следовательно,

$$\sum_{\rho \leq \rho_n < \rho + d\rho} (\bar{M}_n + 1) \approx \frac{\nu \left(I(\rho) + \frac{8\pi h\rho^3}{c^3} \right)}{h\rho} d\rho.$$

Итак, для квадратных скобок [...] мы получим в указанных выше двух случаях следующие выражения:

$$w_{k\bar{k}}(\rho) \frac{\nu \left(I(\rho) + \frac{8\pi h\rho^3}{c^3} \right)}{h\rho} d\rho \text{ и } w_{k\bar{k}}(\rho) \frac{\nu I(\rho)}{h\rho} d\rho,$$

если только величина

$$\left| \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{m_v} (P_v^x \bar{A}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{k\bar{k}} \right|^2$$

флуктуирует (достаточно быстро) в интервале $\rho \leq \rho_n < \rho + d\rho$ вокруг некоторого среднего значения, которое мы обозначили через $w_{k\bar{k}}(\rho)$.

Напишем еще $v_{k\bar{k}}$ вместо $\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}$ и $v_{k\bar{k}}$ вместо $\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}$, тогда наши суммы примут вид

$$\theta_k = \frac{\nu}{4\pi^2 c^2 h^2} \int_0^\infty \left\{ \left(I(\rho) + \frac{8\pi h}{c^3} \rho^3 \right) \frac{1 - \cos 2\pi (\rho - v_{k\bar{k}}) t}{(\rho - v_{k\bar{k}})^2} + \right. \\ \left. + I(\rho) \frac{1 - \cos 2\pi (\rho - v_{k\bar{k}}) t}{(\rho - v_{k\bar{k}})^2} \right\} \frac{w_{k\bar{k}}(\rho)}{\rho^2} d\rho.$$

При малых t этот интеграл будет, очевидно, порядка t^2 (потому что такие порядок величины $1 - \cos 2\pi ct$), за исключением лишь того

участка области интегрирования, в котором знаменатель $(\rho - \bar{v}_{kk})^2$ или $(\rho - v_{kk})^2$ мал. Здесь могут возникнуть вклады, большие по сравнению с t^2 , и если это так, то эти вклады и будут представлять собой асимптотические выражения для θ_k . Действительно, окажется, что это так, ибо мы получим вклады порядка t , — их-то и надо нам теперь вычислить.

Так как $v_{kk} = -\bar{v}_{kk} = \frac{W_{\bar{k}} - W_k}{h}$, то при $W_{\bar{k}} > W_k$ малым будет только знаменатель первого члена, а при $W_{\bar{k}} < W_k$ — только знаменатель второго, поэтому при $W_{\bar{k}} > W_k$ мы оставим лишь первый член, а при $W_{\bar{k}} < W_k$ — лишь второй. Кроме того, так как для ρ , лежащего вдали от v_{kk} и \bar{v}_{kk} (обозначим для краткости $\bar{v}_{kk} = \frac{|W_{\bar{k}} - W_k|}{h}$), получаются вклады в интеграл лишь порядка t^2 , то можно заменить подынтегральное выражение его значением при $\rho = \bar{v}_{kk}$, т. е. через

$$\frac{Iw_{k\bar{k}}(\bar{v}_{kk})}{\sqrt[3]{v_{kk}}},$$

где $I = I(\bar{v}_{kk}) + \frac{8\pi h}{c^3} \bar{v}_{kk}^3$ или $I(\bar{v}_{kk})$ соответственно. Следовательно,

$$\theta_k = -\frac{\gamma Iw_{k\bar{k}}(\bar{v}_{kk})}{4\pi^2 c^2 h^2 \sqrt[3]{v_{kk}}} \int_0^\infty \frac{1 - \cos 2\pi(\rho - \bar{v}_{kk})t}{(\rho - \bar{v}_{kk})^2} d\rho.$$

Далее, \int_0^∞ можно заменить на $\int_{-\infty}^\infty$, так как это ведет лишь к дополнительным вкладам порядка t^2 , и ввести еще новую переменную интегрирования $x = 2\pi(\rho - \bar{v}_{kk})t$. Поскольку

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{1 - \cos 2\pi(\rho - \bar{v}_{kk})t}{(\rho - \bar{v}_{kk})^2} d\rho = 2\pi t \int_{-\infty}^\infty \frac{1 - \cos x}{x^2} dx = {}^{152)} = 2\pi^2 t,$$

¹⁵²⁾ Имеем (ср. Courant — Hilbert, стр. 49),

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^\infty \frac{1 - \cos x}{x^2} dx &= 2 \int_0^\infty \frac{1 - \cos x}{x^2} dx = \int_0^\infty \frac{1 - \cos 2y}{y^2} dy = \\ &= 2 \int_0^\infty \frac{\sin^2 y}{y^2} dy = \pi. \end{aligned}$$

то окончательно находим

$$\theta_k = \frac{\gamma I w_{kk} (\bar{\gamma}_{kk})}{2\hbar^2 \sqrt{\frac{2}{kk}}} t,$$

затем доказывается также и то, что θ_k порядка t .

Для вычисления $w_{kk} (\bar{\gamma}_{kk})$ нужно получить для величины

$$\left| \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{m_v} (P_v^x \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kk} \right|^2$$

выражение, свободное от $\bar{\mathcal{A}}_n$. К такому выражению можно прийти, если заменить вектор $\bar{\mathcal{A}}_n$, имея в виду его быстро осциллирующий характер, иррегулярно ориентированным вектором постоянной длины (ввиду его постоянства в пространстве, т. е. независимости от Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z , он является численным вектором, умноженным на матрицу 1). Постоянную длину γ_n можно найти из условия нормировки

$$\int_H \int \int [\bar{\mathcal{A}}_n, \bar{\mathcal{A}}_n] dx dy dz = 4\pi c^2.$$

Поэтому

$$\gamma_n^2 = 4\pi c^2, \quad \gamma_n^2 = \frac{4\pi c^2}{\nu}.$$

На x -компоненту $\bar{\mathcal{A}}_{n,x}$ приходится в среднем $\frac{1}{3}$ скалярного произведения $[\bar{\mathcal{A}}_n, \bar{\mathcal{A}}_n] = \bar{\mathcal{A}}_{n,x}^2 + \bar{\mathcal{A}}_{n,y}^2 + \bar{\mathcal{A}}_{n,z}^2 = \gamma_n^2$, т. е. она равна $\frac{1}{3} \gamma_n^2 = \frac{4\pi c^2}{3\nu}$, и аналогично для остальных компонент $\bar{\mathcal{A}}_{n,y}$ и $\bar{\mathcal{A}}_{n,z}$. Имеем, следовательно,

$$w_{kk}(\rho) = \underset{\rho \leq \rho_n < \rho + d\rho}{\text{Среднее}} \left| \sum_{v=1}^l \frac{e_v}{m_v} (P_v^x \bar{\mathcal{A}}_{n,x}(Q_v^x, Q_v^y, Q_v^z) + \dots)_{kk} \right|^2 \approx \\ \approx \frac{4\pi c^2}{3\nu} \left(\left| \left(\sum_{v=1}^l \frac{e_v}{m_v} P_v^x \right)_{kk} \right|^2 + \dots \right).$$

Так как H_0 , т. е. энергия одной только системы S , равняется кинетической энергии + потенциальная энергия и имеет, следовательно, вид

$$H_0 = \sum_{v=1}^l \frac{1}{2m_v} ((P_v^x)^2 + (P_v^y)^2 + (P_v^z)^2) + V(Q_1^x, Q_1^y, Q_1^z, \dots, Q_l^x, Q_l^y, Q_l^z),$$

то оказывается, что¹⁵³⁾

$$\mathbf{H}_0 Q_v^x - Q_v^x \mathbf{H}_0 = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{1}{m_v} P_v^x,$$

и поскольку \mathbf{H}_0 — диагональная матрица с диагональными элементами W_1, W_2, \dots [$(\mathbf{H}_0)_{kj} = W_k \delta_{kj}$], то отсюда следует для матричных элементов, что

$$(P_v^x)_{k\bar{k}} = \frac{2\pi i m_v}{\hbar} (\mathbf{H}_0 Q_v^x - Q_v^x \mathbf{H}_0)_{k\bar{k}} = \frac{2\pi i m_v}{\hbar} (W_k - W_{\bar{k}}) (Q_v^x)_{k\bar{k}} = \\ = \pm i \cdot 2\pi m_v \overline{(Q_v^x)_{k\bar{k}}}.$$

Таким образом,

$$w_{k\bar{k}}(\rho) = \frac{16}{3} \frac{\pi^3}{\nu} \frac{c^2}{h^2} \overline{v}_{k\bar{k}}^2 \left(\left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^x \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \dots \right).$$

Подстановка в выражение для θ_k дает формулу

$$\theta_k = \frac{8\pi^3}{3h^2} \left(\left| \left(\sum_{v=0}^l e_v Q_v^x \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \dots \right) \cdot It.$$

Полученный результат, положив еще $w_{k\bar{k}} = \left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^x \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \dots$,

можно, очевидно, интерпретировать следующим образом. Атом S в k -м состоянии претерпевает следующие переходы (квантовые скачки):

1. Переход в высшее состояние \bar{k} ($W_{\bar{k}} > W_k$) происходит $\frac{8\pi^3}{3h^2} w_{k\bar{k}} I \left(\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{\hbar} \right)$ раз в секунду, т. е. его частота пропорциональна интенсивности поля излучения соответствующей боровской частоты $\frac{W_{\bar{k}} - W_k}{\hbar}$.

¹⁵³⁾ P_v^x коммутирует со всеми $Q_\mu^x, Q_\mu^y, Q_\mu^z, P_\mu^x, P_\mu^y, P_\mu^z$, за исключением Q_v^x . Именно,

$$P_v^x Q_v^x - Q_v^x P_v^x = \frac{\hbar}{2\pi i} 1.$$

И значит,

$$\mathbf{H}_0 Q_v^x - Q_v^x \mathbf{H}_0 = \frac{1}{2m_v} (P_v^x)^2 Q_v^x - Q_v^x \frac{1}{2m_v} (P_v^x)^2 = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{1}{m_v} P_v^x,$$

ср. прим. ¹⁴³⁾ на стр. 197.

2. Переход в низшее состояние $\bar{k} (W_{\bar{k}} < W_k)$ происходит $\frac{8\pi^3}{2h^2} w_{k\bar{k}} I \left(\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right)$ раз в секунду, т. е. его частота пропорциональна интенсивности поля излучения соответствующей боровской частоты $\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h}$.

3. Кроме этого, происходит еще переход в низшее состояние $\bar{k} (W_{\bar{k}} < W_k)$ с частотой $\frac{64\pi^4}{3hc^3} w_{k\bar{k}} \left(\frac{W_k - W_{\bar{k}}}{h} \right)^3$ раз в секунду, т. е. с частотой, совершенно не зависящей от присутствующего поля излучения.

Переход 1. соответствует процессам поглощения из поля излучения; переход 2. — процессам излучения, индуцированным полем излучения; а переход 3. соответствует процессам спонтанного излучения, которые всегда будут происходить с атомом, пока он не добьется окончательного покоя в своем низшем стационарном состоянии (минимальное $W_{\bar{k}}$!).

Три механизма переходов 1. — 3. были термодинамически найдены Einstein'ом еще до открытия квантовой механики¹⁵⁴⁾, не хватало лишь значений «вероятностей переходов» $w_{k\bar{k}}$. Приведенное выше выражение

$$w_{k\bar{k}} = \left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^x \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^y \right)_{k\bar{k}} \right|^2 + \left| \left(\sum_{v=1}^l e_v Q_v^z \right)_{k\bar{k}} \right|^2,$$

как уже упоминалось, содержитя в первой интерпретации, данной Гейзенбергом. Мы получили его снова (следуя Дираку) из общей теории.

¹⁵⁴⁾ Physik. Z. 18 (1917).

ГЛАВА IV

ДЕДУКТИВНОЕ ПОСТРОЕНИЕ ТЕОРИИ

1. Принципиальное обоснование статистической теории

В главе III нам удалось свести все утверждения квантовой механики к статистической формуле (названной там E_2 .)

$$(E.) \quad Erw(\mathfrak{R}, \varphi) = (R\varphi, \varphi)$$

($Erw(\mathfrak{R}, \varphi)$ является математическим ожиданием величины \mathfrak{R} в состоянии φ , R есть оператор величины \mathfrak{R}). В дальнейшем мы покажем, как сама эта формула может быть выведена из немногих общих качественных предположений, и одновременно мы еще раз проверим правильность всего построения квантовой механики в том виде, в каком оно было развито в III. Однако прежде чем переходить к этому, необходимо сделать следующее замечание.

В состоянии φ величина \mathfrak{R} обладает математическим ожиданием $\rho = (R\varphi, \varphi)$, и, в качестве дисперсии ε^2 , — математическим ожиданием величины $(\mathfrak{R} - \rho)^2$, т. е. $((R - \rho \cdot 1)^2 \varphi, \varphi) = \|R\varphi\|^2 - (R\varphi, \varphi)^2$ (ср. прим. ¹³⁰) на стр. 173, все эти математические ожидания вычисляются на основе E_1 !). Последнее выражение, вообще говоря, больше нуля (и равно нулю только, когда $R\varphi = \rho \cdot \varphi$, ср. III. 3) — уже в одном индивидуальном состоянии φ существует, следовательно, как мы это уже неоднократно устанавливали, только статистика. Но статистический характер может обостриться еще и за счет того, что неизвестно, какое же состояние имеется на самом деле — например, когда в описании участвует несколько состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ с вероятностями w_1, w_2, \dots ($w_1 \geq 0, w_2 \geq 0, \dots, w_1 + w_2 + \dots = 1$) соответственно. Тогда математическим ожиданием величины \mathfrak{R} , в смысле всегда справедливых правил вычисления с вероятностями, будет $\rho' = \sum_n w_n \cdot (R\varphi_n, \varphi_n)$.

Далее, имеется общее соотношение $(R\varphi, \varphi) = \text{Spur}(P_{[\varphi]} \cdot R)$. Действительно, выберем полную ортонормированную систему ψ_1, ψ_2, \dots

так, чтобы $\psi_1 = \varphi$ (и, значит, ψ_2, ψ_3, \dots были ортогональны к φ), тогда

$$P_{[\varphi]} \psi_n = \begin{cases} \varphi & \text{для } n = 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

и, следовательно,

$$\text{Spur}(P_{[\varphi]} \cdot R) = \sum_{m,n} (P_{[\varphi]} \psi_n, \psi_m) (R \psi_m, \psi_n) = \\ = \sum_m (\varphi, \psi_m) (R \psi_m, \varphi) = (R \varphi, \varphi).$$

Поэтому наше $\rho' = \text{Spur} \left(\left\{ \sum_n w_n P_{[\varphi_n]} \right\} \cdot R \right)$. Оператор

$$U = \sum_n w_n P_{[\varphi_n]}$$

будет дефинитным в силу дефинитности всех $P_{[\varphi_n]}$ и условия $w_n \geq 0$, а его шпур будет, так как $\text{Spur} P_{[\varphi_n]} = 1$, равен $\sum_n w_n = 1$. Тем самым этот оператор полностью характеризует только что описанную смесь состояний в смысле ее статистических свойств:

$$\rho' = \text{Spur}(UR).$$

Заметив, что наряду с состояниями нам придется иметь дело также и с этими смесями, перейдем к более общему исследованию.

Забудем всю квантовую механику и будем держаться только следующих положений. Предположим, что дана система $S^{155})$, которая для экспериментатора характеризуется заданием всех эффективно

¹⁵⁵⁾ Важно подчеркнуть разницу между понятиями просто системы и системы в некотором состоянии. Система, например, водородный атом, т. е. электрон и протон с известными действующими между ними силами, формально будет описана, если указать, что конфигурационное пространство имеет шесть измерений, что координаты — это q_1, \dots, q_6 , импульсы — p_1, \dots, p_6 , а функция Гамильтона равна

$$H(q_1 \dots q_6 p_1 \dots p_6) = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m_e} + \frac{p_4^2 + p_5^2 + p_6^2}{2m_p} + \\ + \frac{e^2}{V(q_1 - q_4)^2 + (q_2 - q_5)^2 + (q_3 - q_6)^2}.$$

Состояние же фиксируется лишь при указании дальнейших данных: в классической механике с помощью задания численных значений $q_1^0, \dots, q_6^0, p_1^0, \dots, p_6^0$ координат и импульсов $q_1, \dots, q_6, p_1, \dots, p_6$, а в квантовой механике — с помощью волновой функции $\varphi(q_1 \dots q_6)$. В большем числе данных, чем эти, никогда не возникает потребности: если известны система + состояние, то теория дает однозначную вычислительную процедуру для ответа на любой вопрос.

измеримых в ней величин и их взаимных функциональных зависимостей. Под величиной подразумевается, собственно, наставление, как ее измерять, т. е. как найти или же вычислить ее значение из расположения стрелок измерительных приборов. Если \mathfrak{R} — какая-нибудь величина, а $f(x)$ — произвольная функция, тогда величину $f(\mathfrak{R})$ следует определять так: чтобы измерить $f(\mathfrak{R})$, измерь \mathfrak{R} , найди при этом (для \mathfrak{R}) значение a , тогда значением $f(\mathfrak{R})$ будет $f(a)$. Как видим, все величины $f(\mathfrak{R})$ (\mathfrak{R} фиксировано, $f(x)$ — произвольная функция) измеримы одновременно одна с другой, а также с величиной \mathfrak{R} : это первый пример одновременно измеримых величин. Вообще же, назовем две (или больше) величины $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ одновременно измеримыми, если существует установка, которая измеряет одновременно обе величины в одной и той же системе, — при этом, конечно, их соответственные значения вычисляются по-разному из показаний приборов. (В классической механике, как известно, все величины одновременно измеримы, а в квантовой механике, как мы видели в III. 3, это не так.) Для таких величин и какой-нибудь функции двух переменных $f(x, y)$ можно определить и величину $f(\mathfrak{R}, \mathfrak{S})$: она будет измерена, если одновременно измерить $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$, и если для них будут найдены значения a, b , то значением $f(\mathfrak{R}, \mathfrak{S})$ будет $f(a, b)$. Надо, однако, ясно представлять себе, что совершенно бессмысленно желать построить $f(\mathfrak{R}, \mathfrak{S})$, когда $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ не измеримы одновременно: ведь тогда невозможно указать надлежащую измерительную процедуру.

Но исследование физических величин на одном-единственном объекте S не является единственным, что мы можем делать — особенно тогда, когда возникает сомнение относительно одновременной измеримости различных величин. В таких случаях можно рассматривать и большие статистические ансамбли, состоящие из многих систем S_1, \dots, S_N (т. е. из N экземпляров системы S , N велико)¹⁵⁶⁾. В таком ансамбле $[S_1, \dots, S_N]$ измеряется, естественно, не «значение» некоторой величины \mathfrak{R} , но распределение ее значений, т. е. для каждого интервала $a' < a \leq a''$ (a', a'' заданы, $a' \leq a''$) число тех из систем S_1, \dots, S_N , для которых значение \mathfrak{R} лежит внутри него. N -я часть этого числа является функцией распределения $w(a', a'') = w(a'') - w(a')$ ¹⁵⁷⁾. Большое преимущество рассмотрения таких ансамблей состоит в следующем:

¹⁵⁶⁾ Такие ансамбли, называемые коллективами, вообще необходимы, чтобы можно было обосновать теорию вероятностей как науку о частотностях. Они были введены R. v. Mises'ом, который осознал их значение для теории вероятностей и осуществил их надлежащее построение (ср., например, его книгу: Wahrscheinlichkeit, Statistik und Ihre Wahrheit, Berlin, 1928).

¹⁵⁷⁾ $w(a')$ является вероятностью того, что $a \leq a'$, т. е. относится к интервалу $-\infty, a'$. Как видно, функция $w(a)$ или же, как мы будем ее называть, чтобы подчеркнуть ее зависимость от \mathfrak{R} , $w_{\mathfrak{R}}(a)$ обладает следующими свойствами: При $a \rightarrow -\infty w_{\mathfrak{R}}(a) \rightarrow 0$; при $a \rightarrow +\infty w_{\mathfrak{R}}(a) \rightarrow 1$; при

1. Даже в том случае, когда измерение какой-нибудь величины \mathfrak{A} сильно изменило бы измеряемую систему S (в квантовой механике дело обстоит именно так, и в III. 4 мы видели, что в физике элементарных процессов это принципиально должно быть так, ибо воздействие измерения имеет тот же порядок величины, что и система или же ее наблюдаемая часть), статистический снимок распределения вероятности величины \mathfrak{A} в ансамбле $[S_1, \dots, S_N]$ изменится при таком измерении сколь угодно мало, если только N достаточно велико.

2. Даже если две (или больше) величины \mathfrak{A} , \mathfrak{B} не являются одновременно измеримыми в единственной системе S , их распределения вероятностей в одном и том же ансамбле $[S_1, \dots, S_N]$ можно получить с произвольно большой точностью, если только N достаточно велико.

Именно, в случае ансамбля, состоящего из N элементов, достаточно собрать статистические показания о распределении значений величины \mathfrak{A} не со всех N элементов S_1, \dots, S_N , а лишь с некоторой подсистемы из M ($\leq N$) элементов, скажем $[S_1, \dots, S_M]$, если только M, N оба велики, причем M можно сделать совсем малым по сравнению с N ¹⁵⁸⁾. Тогда при измерении будет вообще подвергнута изменению лишь $\frac{M}{N}$ -я часть ансамбля, т. е. сколь угодно малая, если $\frac{M}{N}$ выбрано достаточно малым, что при достаточно большом N возможно даже для больших M , — в соответствии с утверждением **1**. Чтобы измерить одновременно две (или больше) величины \mathfrak{A} , \mathfrak{B} , нам потребуются две подсистемы, скажем $[S_1, \dots, S_M]$ и $[S_{M+1}, \dots, S_{2M}]$ ($2M \leq N$), так чтобы первая была применена для снимка статистики \mathfrak{A} , а вторая — для \mathfrak{B} . Тогда оба измерения не помешают одно другому, — хотя они и производятся на одном и том же ансамбле $[S_1, \dots, S_N]$, — и даже изменят ансамбль лишь на произвольно малую величину, если $\frac{2M}{N}$ достаточно мало, что возможно и для очень больших M , если только N достаточно велико, в соответствии с утверждением **2**.

$a \geq a_0$, $a \rightarrow a_0 w_{\mathfrak{A}}(a) \rightarrow w_{\mathfrak{A}}(a_0)$; при $a' \leq a''$ $w_{\mathfrak{A}}(a') \leq w_{\mathfrak{A}}(a'')$. (В квантовой механике $w_{\mathfrak{A}}(a) = \|E(a)\varphi\|^2 = (E(a)\varphi, \varphi)$, где $E(\lambda)$ означает разложение единицы, относящееся к R .)

Если $w_{\mathfrak{A}}(a)$ дифференцируема, то вместо нее можно ввести хорошо известную «плотность вероятности» $\frac{d}{da} w_{\mathfrak{A}}(a)$; если же $w_{\mathfrak{A}}(a)$ в точке $a = a_0$ разрывна (естественно, слева), то точка $a = a_0$ обладает «дискретной вероятностью» $w_{\mathfrak{A}}(a_0) - w_{\mathfrak{A}}(a_0 - 0)$. Исходным же понятием $w_{\mathfrak{A}}(a)$ можно пользоваться всегда; ср. ссылку в прим. ¹⁵⁶⁾ на стр. 223.

¹⁵⁸⁾ Это вытекает из так называемого закона больших чисел, теоремы Бернуlli.

Как видим, привлечение статистических ансамблей, т. е. теоретико-вероятностных методов, обусловлено возможностью того, что измерение окажет влияние на одну отдельную систему, и возможностью неодновременной измеримости нескольких величин. Общая теория должна учитывать эти обстоятельства, появление которых для элементарных процессов всегда подозревалось¹⁵⁹⁾, а сегодня, как показывает подробное обсуждение положения вещей (ср. III. 4), стало несомненным. Статистические ансамбли опять устраниют эти трудности и делают тем самым снова возможным объективное описание (описание, которое не зависит от случая, равно как от того, измеряется ли в данном состоянии та или другая из двух неодновременно измеримых величин).

Для таких ансамблей не удивительно, что физическая величина \mathfrak{A} не имеет точно определенного значения, т. е. что распределение ее значений не состоит из единственного значения a_0 ¹⁶⁰⁾, но допускает многие значения или интервалы значений, так что дисперсия положительна¹⁶⁰⁾. Все же для такого поведения мыслимы два различных основания:

I. Отдельные системы S_1, \dots, S_N нашего ансамбля могут находиться в различных состояниях, так что ансамбль $[S_1, \dots, S_N]$ определяется их относительными частотами. То, что мы не получаем здесь точно определенных значений для физических величин, обусловлено нашим незнанием: ведь мы же не знаем, в каком состоянии мы измеряем, а потому и не можем сказать, что при этом получится.

¹⁵⁹⁾ Так, например, главной трудностью в определении электрического поля считалось то, что необходимое для этого «пробное тело» не может быть меньше электрона.

¹⁶⁰⁾ Точно определенное значение соответствует функции распределения $w_{\mathfrak{A}}(a)$ вида

$$w_{\mathfrak{A}}(a) = \begin{cases} 1 & \text{для } a \geq a, \\ 0 & \text{для } a < a. \end{cases}$$

В этом и только в этом случае дисперсия ϵ^2 равна нулю. Обычно же среднее значение ρ и дисперсия ϵ^2 вычисляются следующим образом (интегралы Стильеса!):

$$\rho = \int_{-\infty}^{+\infty} a dw_{\mathfrak{A}}(a),$$

$$\begin{aligned} \epsilon^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} (a - \rho)^2 dw_{\mathfrak{A}}(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 dw_{\mathfrak{A}}(a) - 2\rho \int_{-\infty}^{+\infty} a dw_{\mathfrak{A}}(a) + \rho^2 = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 dw_{\mathfrak{A}}(a) - \rho^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} a^2 dw_{\mathfrak{A}}(a) - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} a dw_{\mathfrak{A}}(a) \right)^2 \end{aligned}$$

(ср. III. 4, прим. ¹³⁰⁾ на стр. 173).

II. Все отдельные системы S_1, \dots, S_N находятся в одном и том же состоянии, но законы природы не каузальны. Тогда причиной дисперсий будет уже не наше незнание, а сама природа, которая не считается с «принципом достаточного основания».

Случай **I.** общеизвестен, важным же и новым является, напротив, случай **II.** Конечно, сначала мы будем относиться скептически к возможности его осуществления, но затем найдем объективный критерий, который позволит отличать случаи, когда он имеет место, от случаев, когда его нет. На первый взгляд кажется, что существуют серьезные возражения против возможности понять его и придать ему точный смысл. Мы полагаем, что эти возражения не имеют основания и что случай **II.** является единственным выходом из известных трудностей (например, в квантовой механике). Перейдем поэтому к обсуждению принципиальных трудностей случая **II.**

Против **II.** можно возразить, что природа вообще не может нарушить «принцип достаточного основания», т. е. причинность, так как здесь скорее идет речь просто об определении тождественности. Иными словами, теорема о том, что два тождественных объекта S_1, S_2 , — т. е. два экземпляра системы S , находящиеся в одном и том же состоянии, — будут вести себя одинаково при всех мыслимых воздействиях, верна, поскольку она ничего не говорит. Ведь если бы системы S_1, S_2 вели себя по-разному при одном и том же воздействии (например, если бы они давали разные значения некоторой величины \mathfrak{R} при ее измерении), то их нельзя было бы назвать одинаковыми. Таким образом, в ансамбле $[S_1, \dots, S_N]$, имеющем дисперсию по отношению к величине \mathfrak{R} , отдельные системы S_1, \dots, S_N , по определению, не могут все находиться в одном и том же состоянии. (Применительно к квантовой механике это означало бы: поскольку при измерении одной и той же величины \mathfrak{R} на нескольких системах, которые все пребывают в состоянии, описываемом волновой функцией φ , получаются разные значения, если φ не является собственной функцией оператора R величины \mathfrak{R} ¹⁶¹⁾, то эти системы не одинаковы, т. е. описание с помощью волновых функций не является полным. Поэтому должны были бы существовать другие характеристики, упомянутые в III.2 «скрытые параметры». Вскоре мы увидим, что это предположение не проходит без дальнейших осложнений.) Следовательно, для большого статистического ансамбля, до тех пор пока хоть одна величина \mathfrak{R} продолжает иметь в нем дисперсию, должна существовать возможность разбиения его на многие, различным образом построенные части (в соответствии с раз-

¹⁶¹⁾ Речь идет о независимых измерениях на нескольких системах: последовательные измерения на одной и той же системе всегда давали бы одинаковые значения (ср. III.3).

личными состояниями его элементов). Это тем более правдоподобно, что на первый взгляд кажется, что фактически существует простой способ подобного разбиения: именно, ансамбль можно разбить в соответствии с различными значениями, принимаемыми в нем величиной \mathfrak{N} . По-настоящему однородный ансамбль был бы получен только после подразделения или разбиения по отношению ко всем имеющимся величинам $\mathfrak{N}, \mathfrak{S}, \mathfrak{T}, \dots$. В конечном итоге ни одна из этих величин не имела бы дисперсии ни в одном из подансамблей.

Утверждения, содержащиеся в последних фразах, ошибочны прежде всего потому, что не учитывают, что измерение изменяет измеряемую систему. Если величина \mathfrak{N} (принимающая ради простоты лишь два значения a_1, a_2) измеряется во всех объектах S_1, \dots, S_N и принимает значение, скажем, a_1 на системах S'_1, \dots, S'_{N_1} , а значение a_2 — на системах $S''_1, \dots, S''_{N-N_1}$, то после этого она не будет иметь дисперсии ни в ансамбле $[S'_1, \dots, S'_{N_1}]$, ни в ансамбле $[S''_1, \dots, S''_{N-N_1}]$ (там она всегда равна a_1 или соответственно a_2). Тем не менее это не будет простым разбиением ансамбля $[S_1, \dots, S_N]$ на две указанные части, так как отдельные системы были изменены при \mathfrak{N} -измерении. Правда, согласно 1., у нас имеется метод нахождения распределения значений величины \mathfrak{N} таким образом, чтобы ансамбль $[S_1, \dots, S_N]$; изменился лишь незначительно (для этого надо измерять на S_1, \dots, S_M ,

M велико, $\frac{M}{N}$ мало), однако этот прием не приводит ни к какому разбиению, поскольку для большинства систем S_1, \dots, S_N (а именно для систем S_{M+1}, \dots, S_N) он не позволяет ничего сказать о том, какое значение имеет величина \mathfrak{N} в каждой отдельной системе из их числа. Теперь мы убеждаемся, что указанный выше метод построения совершенно однородной системы не приводит к цели. Действительно, измерим еще другую величину \mathfrak{S} (также принимающую лишь два значения b_1, b_2) в подансамблях $[S'_1, \dots, S'_{N_1}]$ и $[S''_1, \dots, S''_{N-N_1}]$. Пусть в системах $S'''_1, \dots, S'''_{N_1}$ и $S^V_1, \dots, S^V_{N_{12}}$ найдено значение b_1 , а в системах $S^{IV}_1, \dots, S^{IV}_{N_1-N_{11}}$ и $S^{VI}_1, \dots, S^{VI}_{N-N_1-N_{12}}$ — значение b_2 . Тогда в ансамблях $[S'''_1, \dots, S'''_{N_1}], [S^V_1, \dots, S^V_{N_{12}}], [S^V_1, \dots, S^V_{N_{12}}], [S^{VI}_1, \dots, S^{VI}_{N-N_1-N_{12}}]$ величина \mathfrak{S} больше не имеет дисперсии (ее значения будут равны соответственно b_1, b_2, b_1, b_2). Однако несмотря на то, что первые два ансамбля являются частями ансамбля $[S'_1, \dots, S'_{N_1}]$, а два последних ансамбля — частями ансамбля $[S''_1, \dots, S''_{N-N_1}]$, в которых величина \mathfrak{N} не имела дисперсии, в каждом из этих новых четырех ансамблей величина \mathfrak{N} может иметь дисперсию, так как \mathfrak{S} -измерение изменило отдельные системы (из которых состоят ансамбли)! Это значит, что мы не продвигаемся вперед;

каждый новый шаг разрушает результат предшествующего¹⁶²⁾ и никакое повторение последовательных измерений не сможет привнести причинный порядок в эту путаницу, ибо атомные явления лежат на краю физического мира, где любое измерение вносит изменение того же порядка, что и сам измеряемый объект, так что последний изменяется существенным образом, в основном из-за соотношений неопределенности.

Таким образом, при известных обстоятельствах не существует метода, с помощью которого можно было бы разлагать дальше ансамбли с дисперсией (без изменения их элементов) или даже пройтись до вообще не обладающих дисперсией однородных ансамблей, которые мы должны представлять себе состоящими из причинно определенных, тождественных между собой отдельных объектов. Несмотря на это, можно было бы попытаться поддержать фиктивное представление о том, что всякий ансамбль с дисперсией можно разбить на две (или больше) отличные друг от друга и от всего ансамбля части; и даже без изменения его элементов, т. е. так, что смешивание обоих ансамблей разбиения снова давало бы исходный ансамбль. Как видим, попытка интерпретировать причинность как определение тождественности приводит ввиду этого к реальному вопросу, на который можно и должно ответить, возможно в отрицательном смысле. Именно: возможно ли на самом деле получить всякий ансамбль $[S_1, \dots, S_N]$, в котором имеется величина \mathfrak{N} с дисперсией, в виде смеси двух (или большего числа) ансамблей, отличных друг от друга, а также от заданного ансамбля? (Случай, когда число ансамблей больше двух, скажем, $n=3, 4, \dots$ приводится к случаю $n=2$, если рассматривать первый из ансамблей и смесь $n-1$ остальных.)

Если бы, скажем, $[S_1, \dots, S_N]$ был смесью двух ансамблей $[S'_1, \dots, S'_P]$ и $[S''_1, \dots, S''_Q]$, то вероятностную функцию $w_{\mathfrak{N}}(a)$ любой величины \mathfrak{N} (см. прим. 157) на стр. 223) можно было бы выразить через вероятностные функции $w'_{\mathfrak{N}}(a)$, $w''_{\mathfrak{N}}(a)$ последних двух ансамблей:

$$(M_1) \quad w_{\mathfrak{N}}(a) = \alpha w'_{\mathfrak{N}}(a) + \beta w''_{\mathfrak{N}}(a), \quad \alpha > 0, \quad \beta > 0, \quad \alpha + \beta = 1.$$

Здесь $\alpha = \frac{P}{N}$ и $\beta = \frac{Q}{N}$ ($N = P + Q$) не зависят от \mathfrak{N} . Итак, в конечном счете мы наталкиваемся на математический вопрос: пусть в каком-нибудь ансамбле имеется величина \mathfrak{N} , обладающая дисперсией

¹⁶²⁾ Посмотрим, например, что получится, если за \mathfrak{N} , \mathfrak{S} взять не измеримые одновременно (из-за соотношений неопределенности) величины q (декартову координату) и p (импульс). Если в каком-нибудь ансамбле дисперсия q очень мала, то p -измерение с точностью (т. е. с дисперсией) ϵ приводит к дисперсии в q , по меньшей мере равной $\frac{\hbar}{4\pi\epsilon}$ (ср. III. 4), т. е. все разрушает.

с вероятностной функцией $w_{\mathfrak{R}}(a)$ (относительно соответствующего свойства функции $w_{\mathfrak{R}}(a)$ см. прим. ¹⁶⁰) на стр. 225), существуют ли тогда два других ансамбля с вероятностными функциями $w'_{\mathfrak{R}}(a)$, соответственно $w''_{\mathfrak{R}}(a)$, такие, что утверждение M_1 , имеет место для всех \mathfrak{R} ? Этот же вопрос можно сформулировать еще несколько иначе, если характеризовать ансамбль не вероятностными функциями $w_{\mathfrak{R}}(a)$ величин \mathfrak{R} , а математическими ожиданиями

$$\text{Erw}(\mathfrak{R}) = \int_{-\infty}^{+\infty} a dw_{\mathfrak{R}}(a).$$

Наш вопрос звучит тогда так: В ансамбле нет дисперсии, если в нем для каждой величины \mathfrak{R} математическое ожидание

$$\text{Erw}([\mathfrak{R} - \text{Erw}(\mathfrak{R})]^2) = \text{Erw}(\mathfrak{R}^2) - [\text{Erw}(\mathfrak{R})]^2$$

равно нулю (ср. прим. ¹⁶⁰) на стр. 225), т. е. если

$$(Str_1.) \quad \text{Erw}(\mathfrak{R}^2) = [\text{Erw}(\mathfrak{R})]^2.$$

Всегда ли возможно в том случае, когда это не так, найти два других ансамбля с $\text{Erw}'(\mathfrak{R})$, $\text{Erw}''(\mathfrak{R})$

$$(\text{Erw}(\mathfrak{R}) \not\equiv \text{Erw}'(\mathfrak{R}) \not\equiv \text{Erw}''(\mathfrak{R}))$$

такие, чтобы выполнялось условие

$$(M_2.) \quad \text{Erw}(\mathfrak{R}) = \alpha \text{Erw}'(\mathfrak{R}) + \beta \text{Erw}''(\mathfrak{R}), \quad \alpha > 0, \beta > 0,$$

$$\alpha + \beta = 1,$$

где α, β не зависят от \mathfrak{R} ? (Заметим, что в случае единственной заданной величины \mathfrak{R} число $\text{Erw}(\mathfrak{R})$ не может быть заменителем функции $w_{\mathfrak{R}}(a)$; напротив, знание всех $\text{Erw}(\mathfrak{R})$ эквивалентно знанию всех $w_{\mathfrak{R}}(a)$. Действительно, если $f_a(x)$ определить равенством

$$f_a(x) = \begin{cases} 1 & \text{для } x \leq a, \\ 0 & \text{для } x > a, \end{cases}, \quad \text{то будем иметь } w_{\mathfrak{R}}(a) = \text{Erw}(f_a(\mathfrak{R})).$$

При математическом рассмотрении этого вопроса целесообразнее иметь дело не с ансамблями $[S_1, \dots, S_N]$, а с соответствующими ожиданиями $\text{Erw}(\mathfrak{R})$. Каждому ансамблю соответствует такая функция, которая определена в S для всех физических величин \mathfrak{R} и имеет значениями вещественные числа и которая, наоборот, полностью характеризует все статистические свойства ансамбля. (Ср. сказанное выше о связи между $\text{Erw}(\mathfrak{R})$ и $w_{\mathfrak{R}}(a)$.) Конечно, еще надо установить, какими свойствами должна обладать функция от \mathfrak{R} , чтобы она представляла собой $\text{Erw}(\mathfrak{R})$, по некоторому надлежащим образом выбран-

ному ансамблю. Но как только это будет выполнено, мы можем дать определение:

а) Функция от \mathfrak{N} , являющаяся математическим ожиданием $Erw(\mathfrak{N})$, называется бездисперсной, если она удовлетворяет условию $Str_{1..}$.

б) Функция от \mathfrak{N} , являющаяся математическим ожиданием $Erw(\mathfrak{N})$, называется однородной или чистой, если для нее из M_2 , следует, что

$$Erw(\mathfrak{N}) \equiv Erw(\mathfrak{N}') \equiv Erw(\mathfrak{N}'').$$

То, что всякая бездисперсная функция $Erw(\mathfrak{N})$ является чистой, ясно просто по смыслу и вскоре будет доказано. Наш же вопрос звучит так: является ли любая чистая функция $Erw(\mathfrak{N})$ бездисперсной?

Ясно, что любая функция $Erw(\mathfrak{N})$ должна обладать следующими свойствами:

A. Если величина \mathfrak{N} тождественно равна 1 (т. е. если правилом ее измерения является: ничего не надо измерять, так как \mathfrak{N} всегда имеет значение 1), то $Erw(\mathfrak{N}) = 1$.

B. Для любой величины \mathfrak{N} и для любого вещественного числа a имеет место равенство $Erw(a\mathfrak{N}) = a Erw(\mathfrak{N})$ ¹⁶³⁾.

C. Если по своему смыслу величина \mathfrak{N} никогда не бывает отрицательной, если она, например, является квадратом¹⁶³⁾ некоторой другой величины \mathfrak{S} , то и $Erw(\mathfrak{N}) \geq 0$.

D. Если величины $\mathfrak{N}, \mathfrak{S}, \dots$ одновременно измеримы, то должно быть $Erw(\mathfrak{N} + \mathfrak{S} + \dots) = Erw(\mathfrak{N}) + Erw(\mathfrak{S}) + \dots$ ¹⁶³⁾. (Для неодновременно измеримых величин $\mathfrak{N}, \mathfrak{S}, \dots$ величина $\mathfrak{N} + \mathfrak{S} + \dots$ не определена, ср. выше.)

Все это непосредственно вытекает из определений рассматриваемых величин (т. е. из предписаний для их измерения), а также из определения математического ожидания как арифметического среднего всех результатов измерений по достаточно большому статистическому ансамблю. В отношении **D**. следует заметить, что его справедливость основана на той теореме из теории вероятностей, согласно которой математическое ожидание суммы всегда равно сумме математических ожиданий отдельных слагаемых, независимо от того, существует между ними вероятностная зависимость или нет (в противоположность, например, математическому ожиданию произведения). Естественно, что мы сформулировали **D**. лишь для одновременно измеримых величин $\mathfrak{N}, \mathfrak{S}, \dots$ — ведь в противном случае величина $\mathfrak{N} + \mathfrak{S} + \dots$ не имеет смысла.

Но в квантовой механике имеется еще одна, выходящая за пределы обсуждавшихся до сих пор, вычислительная операция: именно,

¹⁶³⁾ Выражения $a\mathfrak{N}, \mathfrak{S}^2, \mathfrak{N} + \mathfrak{S} + \dots$ означают: величины $\mathfrak{N}, \mathfrak{S}, \dots$ подставляются, в смысле данного выше общего определения, вместо x, y, \dots в функции $f(x) = ax, f(x) = x^2, f(x, y, \dots) = x + y + \dots$ соответственно.

сложение двух произвольных, не обязательно одновременно неизмеримых, величин. Эта операция основывается на том, что сумма $R + S$ двух эрмитовых операторов R и S опять является эрмитовым оператором, даже и тогда, когда R и S неперестановочны, в то время как произведение RS , например, оказывается эрмитовым лишь в случае коммутативности (ср. II. 5). Математические ожидания по любому состоянию φ складываются: $(R\varphi, \varphi) + (S\varphi, \varphi) = ((R + S)\varphi, \varphi)$. (Ср. E_2 из III. 1). То же справедливо и для многих слагаемых. Мы отметим этот факт в нашем общем, пока еще не специализированном на случай квантовой механики, подходе:

E. Пусть $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ — произвольные величины, тогда существует новая величина $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ (не зависящая от выбора функции $\text{Erw}(\mathfrak{R})$) такая, что

$$\text{Erw}(\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots) = \text{Erw}(\mathfrak{R}) + \text{Erw}(\mathfrak{S}) + \dots$$

Если $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ одновременно измеримы, то эта $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ должна, согласно **D.**, быть обычной суммой. В общем же случае эта величина лишь неявно определяется утверждением **E.**, и мы едва ли можем из измерительных предписаний для $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ составить измерительное предписание для $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ ¹⁶⁴⁾.

К сказанному выше добавим еще: мы хотим ввести в рассмотрение не только функции $\text{Erw}(\mathfrak{R})$, представляющие собой математические ожидания, но также и такие функции, которые выражают собой относительные математические ожидания, т. е. мы опускаем условие нормировки **A.**. Если $\text{Erw}(1)$ (что, согласно **C.**, $\geqslant 0$) конечно и $\neq 0$, то это несущественно, так как для $\frac{\text{Erw}(\mathfrak{R})}{\text{Erw}(1)}$ все остается по-старому. Случай $\text{Erw}(1) = \infty$ соответствует, однако, существенно отличной возможности, ради которой мы и делаем это обобщение. Ее можно

¹⁶⁴⁾ Так, например, в гейзенберговой теории оператор энергии электрона, движущегося в потенциальном силовом поле $V(x, y, z)$,

$$H_0 = \frac{(P^x)^2 + (P^y)^2 + (P^z)^2}{2m} + V(Q^x, Q^y, Q^z)$$

(ср., например, III. 6) является суммой двух неперестановочных операторов $R = \frac{(P^x)^2 + (P^y)^2 + (P^z)^2}{2m}$ и $S = V(Q^x, Q^y, Q^z)$. Тогда как измерение величины \mathfrak{R} , соответствующей оператору R , является измерением импульса, а измерение величины \mathfrak{S} , соответствующей оператору S , — измерением координаты, величина $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$, соответствующая оператору $H_0 = R + S$, измеряется совершенно по-иному: например, с помощью измерения частоты спектральных линий, испускаемых этим (связанным) электроном, поскольку эти частоты определяют (на основании условия частот Бора) энергетические уровни, т. е. значения величины $\mathfrak{R} + \mathfrak{S}$. Тем не менее при любых обстоятельствах

$$\text{Erw}(\mathfrak{R} + \mathfrak{S}) = \text{Erw}(\mathfrak{R}) + \text{Erw}(\mathfrak{S}).$$

лучше всего проиллюстрировать на одном простом примере. Именно, существуют случаи, когда лучше оперировать с относительными вероятностями, а не с истинными, в особенности с бесконечной полной относительной вероятностью (выражение $Erw(1)$ представляет ведь собой полную вероятность); подобным случаем является, например, следующий. Пусть рассматриваемой системой будет частица, движущаяся в одном измерении, и пусть ее статистическое распределение будет таким, что она находится с равной вероятностью всюду на бесконечной прямой. Тогда вероятность любого конечного интервала этой прямой будет равна нулю, но равновероятность всех положений на этой прямой выражается не этим обстоятельством, а тем, что отношение вероятностей двух конечных интервалов равно отношению их длин. Так как $\frac{0}{0}$ не имеет смысла, то это можно понять, лишь приписав длинам смысл относительных вероятностей, но тогда полная относительная вероятность будет равна, конечно, ∞ .

Учитывая все сказанное до сих пор, мы приходим к следующей, окончательной форме наших условий (A' . соответствует C , а B' . соответствует B , D , E):

A' . Если величина \mathfrak{R} по своей природе никогда не отрицательна, если она, например, является квадратом некоторой другой величины \mathfrak{S} , то $Erw(\mathfrak{R}) \geq 0$.

B' . Если $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ — произвольные величины и если a, b, \dots — вещественные числа, то $Erw(a\mathfrak{R} + b\mathfrak{S} + \dots) = a Erw(\mathfrak{R}) + b Erw(\mathfrak{S}) + \dots$

Подчеркнем еще:

1. Поскольку мы рассматриваем относительные математические ожидания, то функции $Erw(\mathfrak{R})$ и $c Erw(\mathfrak{R})$ ($c > 0$ — константа!) надо считать не существенно различными.

2. Функция $Erw(\mathfrak{R}) = 0$ (для всех \mathfrak{R}) не выражает никакого высказывания, а потому должна быть исключена.

3. Мы имеем дело с абсолютными, т. е. с правильно нормированными математическими ожиданиями, если $Erw(1) = 1$. Согласно A' , выражение $Erw(1)$, во всяком случае, ≥ 0 , и если

только оно конечно и $\neq 0$, то **1.** с $c = \frac{1}{Erw(1)}$ возвращает

нас к правильной нормировке. При $Erw(1) = 0$, как будет показано, имеет место **2.**, а потому этот случай исключается. Если $Erw(1) = \infty$, то мы имеем дело с существенно ненормируемой (т. е. относительной) статистикой.

Нам остается теперь возвратиться к нашим определениям **α** , **β** . Имея в виду **1.**, условие **M_2** . можно заменить следующим более простым условием:

$$(M_3)$$

$$Erw(\mathfrak{R}) \equiv Erw'(\mathfrak{R}) + Erw''(\mathfrak{R}).$$

Следует иметь в виду, что и при выводе Str_1 . предполагалось равенство $\text{Erw}(1) = 1$. В случае $\text{Erw}(1) = \infty$ нельзя дать определение свойству отсутствия дисперсии, так как это свойство означает, что $\text{Erw}((\mathfrak{R} - \rho)^2) = 0$, где ρ — абсолютное математическое ожидание величины \mathfrak{R} , т. е. $\frac{\text{Erw}(R)}{\text{Erw}(1)}$, каковое отношение не имеет смысла, так как равно $\frac{\infty}{\infty}$ ¹⁶⁵⁾. Итак $\alpha), \beta)$ гласят теперь:

$\alpha')$ Функция от \mathfrak{R} , являющаяся математическим ожиданием $\text{Erw}(\mathfrak{R})$, называется бездисперсной, если $\text{Erw}(1) \neq 0$ и конечно, так что можно считать, согласно $I.$, что $\text{Erw}(1) = 1$. Характеристичным является тогда Str_1 .

$\beta')$ Функция от \mathfrak{R} , являющаяся математическим ожиданием $\text{Erw}(\mathfrak{R})$, называется однородной или чистой, если для нее условие M_3 . влечет за собой соотношения

$$\text{Erw}'(\mathfrak{R}) = c' \text{Erw}(\mathfrak{R}), \quad \text{Erw}''(\mathfrak{R}) = c'' \text{Erw}(\mathfrak{R})$$

(c', c'' — константы, конечно $c' + c'' = 1$, и в силу A' . и $I.$, $2.$, $c' > 0, c'' > 0$).

Принимая за основу A' , B' . и $\alpha'), \beta')$, мы будем в состоянии принудительно разрешить вопрос о причинности, если только нам будут известны физические величины $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ в S , а также существующие между ними функциональные связи. Это приведет нас в последующих параграфах к соотношениям квантовой механики.

В заключение этого параграфа сделаем еще два замечания.

Сначала замечание, относящееся к случаю $\text{Erw}(1) = 0$. Тогда из B' . следует, что $\text{Erw}(c) = 0$, а потому, если только какая-нибудь величина \mathfrak{R} всегда $\geqslant c', \leqslant c''$, будут, согласно A' , иметь место соотношения $\text{Erw}(c'' - \mathfrak{R}) \geqslant 0, \text{Erw}(\mathfrak{R} - c') \geqslant 0$, так что, согласно B' ., будем иметь $\text{Erw}(c') \leqslant \text{Erw}(\mathfrak{R}) \leqslant \text{Erw}(c'')$, т. е. $\text{Erw}(\mathfrak{R}) = 0$. Пусть теперь \mathfrak{R} произвольно и $f_1(x), f_2(x), \dots$ — некая последовательность ограниченных функций, для которой

$$f_1(x) + f_2(x) + \dots = x$$

(например, $f_1(x) = \frac{\sin x}{x}, f_n(x) = \frac{\sin nx}{nx} - \frac{\sin(n-1)x}{(n-1)x}$ при $n = 2, 3, \dots$). Тогда $\text{Erw}(f_n(\mathfrak{R})) = 0$ для $n = 1, 2, \dots$, так что, согласно B' ., будет также $\text{Erw}(\mathfrak{R}) = 0$. Следовательно, в соответствии с ранее сделанными утверждениями, случай $\text{Erw}(1) = 0$, согласно $2.$, должен быть исключен.

Во-вторых, отметим следующее замечательное обстоятельство. Согласно Str_1 . для отсутствия дисперсии характеристично условие $\text{Erw}(\mathfrak{R}^2) = [\text{Erw}(\mathfrak{R})]^2$, хотя в этом случае $\text{Erw}(\mathfrak{R})$ равно попросту значению величины \mathfrak{R} , а значит, $\text{Erw}(f(\mathfrak{R}))$ есть значение величины $f(\mathfrak{R})$,

¹⁶⁵⁾ В случае бездисперсных ансамблей, однако, нет оснований не вводить истинные математические ожидания.

так что должно быть

$$(Str_2.) \quad Erw(f(\mathfrak{R})) = f(Erw(\mathfrak{R}))$$

для любой функции $f(x)$. Значит, $Str_1.$ является частным случаем $Str_2.$: $f(x) = x^2$. Но каким же образом это условие может быть достаточным? Ответ гласит: если $Str_2.$ выполняется для $f(x) = x^2$, то оно будет справедливо и для всех $f(x)$. Можно было бы даже x^2 заменить любой другой непрерывной и выпуклой функцией от x (т. е. функцией, обладающей свойством: $f\left(\frac{x+y}{2}\right) < \frac{f(x)+f(y)}{2}$ при любых $x \neq y$). На доказательстве мы не будем останавливаться.

2. Доказательство статистических формул

Как мы знаем, физическим величинам квантовомеханической системы однозначно сопоставлены гипермаксимальные эрмитовы операторы (ср., например, дискуссию в III. 5). Целесообразно сделать допущение, что это соответствие взаимно однозначно, т. е. что каждому гипермаксимальному эрмитову оператору соответствует на самом деле некоторая физическая величина. (Частные применения этого допущения делались также в III. 3.) Тогда будут справедливы следующие правила (ср. $F.$, $L.$ в III. 5, а также сказанное в конце IV. 1):

I. Если величине \mathfrak{R} соответствует оператор R , то величине $f(\mathfrak{R})$ будет соответствовать оператор $f(R)$.

II. Если величинам $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ соответствуют операторы R, S, \dots , то величине $\mathfrak{R} + \mathfrak{S} + \dots$ будет соответствовать оператор $R + S + \dots$ (Одновременная измеримость величин $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ при этом не предполагается. Ср., что говорилось по этому поводу выше.)

A', B', α', β') и *I.*, *II.* образуют математический базис нашего анализа.

Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — полная ортонормированная система функций. Вместо оператора R мы будем рассматривать матрицу $a_{\mu\nu} = (R\varphi_\mu, \varphi_\nu)$. Построим еще следующие эрмитовы операторы, матрицы которых имеют вид

$$e_{\mu\nu}^{(n)} = \begin{cases} 1, & \text{если } \mu = \nu = n, \\ 0, & \text{в остальных случаях} \end{cases},$$

$$f_{\mu\nu}^{(mn)} = \begin{cases} 1, & \text{если } \mu = m, \nu = n, \\ 1, & \text{если } \mu = n, \nu = m, \\ 0, & \text{в остальных случаях} \end{cases},$$

$$g_{\mu\nu}^{(mn)} = \begin{cases} i, & \text{если } \mu = m, \nu = n, \\ -i, & \text{если } \mu = n, \nu = m, \\ 0, & \text{в остальных случаях} \end{cases}.$$

Эти операторы можно записать как $P_{[\varphi_n]}$, $P_{\left[\frac{\varphi_m + \varphi_n}{\sqrt{2}}\right]} - P_{\left[\frac{\varphi_m - \varphi_n}{\sqrt{2}}\right]}$, $P_{\left[\frac{\varphi_m + i\varphi_n}{\sqrt{2}}\right]} - P_{\left[\frac{\varphi_m - i\varphi_n}{\sqrt{2}}\right]}$. Пусть им соответствуют величины $\mathbf{U}^{(n)}$, $\mathfrak{B}^{(m, n)}$, $\mathfrak{W}^{(m, n)}$. Очевидно (так как $a_{nm} = \bar{a}_{mn}$), что

$$a_{\mu\nu} = \sum_n a_{nn} e_{\mu\nu}^{(n)} + \sum_{mn} \operatorname{Re} a_{mn} f_{\mu\nu}^{(mn)} + \sum_{mn} \operatorname{Im} a_{mn} g_{\mu\nu}^{(mn)},$$

и потому

$$\mathfrak{R} = \sum_n a_{nn} \mathbf{U}^{(n)} + \sum_{mn} \operatorname{Re} a_{mn} \mathfrak{B}^{(mn)} + \sum_{mn} \operatorname{Im} a_{mn} \mathfrak{W}^{(mn)},$$

а значит, в силу P . и B' .

$$\begin{aligned} \operatorname{Erw}(\mathfrak{R}) &= \sum_n a_{nn} \operatorname{Erw}(\mathbf{U}^{(n)}) + \sum_{mn} \operatorname{Re} a_{mn} \operatorname{Erw}(\mathfrak{B}^{(mn)}) + \\ &\quad + \sum_{mn} \operatorname{Im} a_{mn} \operatorname{Erw}(\mathfrak{W}^{(mn)}). \end{aligned}$$

Поэтому, если положим

$$\left. \begin{array}{l} u_{nn} = \operatorname{Erw}(\mathbf{U}^{(n)}), \\ u_{mn} = \frac{1}{2} \operatorname{Erw}(\mathfrak{B}^{(mn)}) + \frac{i}{2} \operatorname{Erw}(\mathfrak{W}^{(mn)}), \\ u_{nm} = \frac{1}{2} \operatorname{Erw}(\mathfrak{B}^{(mn)}) - \frac{i}{2} \operatorname{Erw}(\mathfrak{W}^{(mn)}) \end{array} \right\} \quad (m < n),$$

то будем иметь

$$\operatorname{Erw}(\mathfrak{R}) = \sum_{mn} u_{nm} a_{mn}.$$

Так как $u_{nm} = \bar{u}_{mn}$, то можно определить эрмитов оператор U условием $(U\varphi_m, \varphi_n) = u_{mn}$ ¹⁶⁶), после чего в правой части окажется

166) То есть

$$U\varphi_m = \sum_n u_{mn} \varphi_n.$$

для чего, разумеется, необходима конечность $\sum_n |u_{mn}|^2$. В ней можно убедиться, например, так: Если $\sum_n |x_n|^2 = 1$, то оператор $R = P_{[\varphi]}$ имеет матрицу $\bar{x}_\mu x$, для $\varphi = \sum_n x_n \varphi_n$ и соответствующая этому оператору величина \mathfrak{R} будет иметь математическое ожидание $\sum_{mn} u_{mn} \bar{x}_m x_n$. Так как $P_{[\varphi]} = P_{[\varphi]}^2$,

$\text{Spur}(UR)$ (ср. II. 11). Таким образом, окончательная формула гласит:

$$(Sp.) \quad \text{Erw}(\mathfrak{R}) = \text{Spur}(UR),$$

где U — не зависящий от R эрмитов оператор¹⁶⁷⁾, определяемый, следовательно, лишь самим ансамблем.

В силу II. соотношение $Sp.$ удовлетворяет условию B' , при любом выборе оператора U . Поэтому нам остается лишь установить, какие ограничения накладываются на U условием A' .

Если $\|\varphi\| = 1$, но в остальных отношениях φ произвольно, то величина \mathfrak{R} , соответствующая оператору $P_{[\varphi]}$ будет благодаря $P_{[\varphi]}^2 = P_{[\varphi]}$ и I. обладать свойством $\mathfrak{R}^2 = \mathfrak{R}$, так что согласно A' , будет $\text{Erw}(\mathfrak{R}) \geqq 0$. Таким образом, $\text{Spur}(UP_{[\varphi]}) = (U\varphi, \varphi) \geqq 0$. Если f

$1 - P_{[\varphi]} = (1 - P_{[\varphi]})^2$, то это математическое ожидание будет $\geqq 0$, $\leqq \text{Erw}(1)$ и, значит, — по крайней мере, для нормированных $\text{Erw}(\mathfrak{R})$, $\geqq 0$, $\leqq 1$. Если $x_{N+1} = x_{N+2} = \dots = 0$, то это означает, что N -мерная эрмитова форма $\sum_{m,n=1}^N u_{mn} \bar{x}_m x_n$ при $\sum_{n=1}^N |x_n|^2 = 1$ имеет значения $\geqq 0$, $\leqq 1$, т. е. собственные значения матрицы $u_{\mu\nu}$, $\mu, \nu = 1, \dots, N$ будут $\geqq 0$, $\leqq 1$. Поэтому длины векторов $y_m = \sum_{n=1}^N u_{mn} \bar{x}_n$ будут всегда \leqq длин векторов x_m . Положим

$x_m = \begin{cases} 1 & \text{для } m = \bar{m}, \\ 0 & \text{для } m \neq \bar{m} \end{cases}$, тогда $y_m = u_{m\bar{m}}$, так что

$$\sum_{m=1}^N |x_m|^2 \geqq \sum_{m=1}^N |y_m|^2, \quad 1 \geqq \sum_{m=1}^N |u_{m\bar{m}}|^2.$$

Поскольку это справедливо при любом N , то будет также $\sum_n |u_{mn}|^2 \leqq 1$.

¹⁶⁷⁾ Все рассмотрение, строго говоря, обосновано лишь в том случае, когда все функции $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ принадлежат области определения оператора R . Хотя, конечно, для любого R можно найти такую полную ортонормированную систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (ср. II. 11), но если R имеет смысл не везде, то эта система будет зависеть от R . Собственно говоря, каждой полной ортонормированной системе функций $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ соответствует, таким образом, свой, зависящий от нее оператор U такой, что равенство

$$\text{Erw}(\mathfrak{R}) = \text{Spur}(UR)$$

имеет место лишь для тех R , к области определения которых принадлежат $\varphi_1, \varphi_2, \dots$

Между тем все эти операторы U равны друг другу. Действительно, пусть U', U'' — два таких оператора. Тогда наше равенство будет справедливо для них обоих, если только R везде имеет смысл. Иными словами, тогда $\text{Spur}(U'R) = \text{Spur}(U''R)$. Полагая $R = P_{[\varphi]}$, найдем $(U'\varphi, \varphi) = (U''\varphi, \varphi)$, $((U' - U'')\varphi, \varphi) = 0$. Так как это соотношение справедливо для всех φ с $\|\varphi\| = 1$, а тем самым и для всех элементов пространства Гильберта, то должно быть также и $U - U' = 0$, т. е. $U = U'$.

произвольно, то при условии $f \neq 0$ функция $\varphi = \frac{1}{\|f\|} \cdot f$ будет допустимой, и тогда $(U\varphi, \varphi) = \frac{1}{\|f\|^2} (Uf, f)$, так что снова $(Uf, f) \geq 0$; при условии же $f = 0$ это соотношение выполняется автоматически. Таким образом, оператор U дефинитен. Но свойство дефинитности U , следующее, как мы убедились, из A' , является и достаточным, чтобы A' было справедливым.

Действительно, A' означает лишь, что всегда должно быть $\operatorname{Erw}(\mathfrak{S}^2) \geq 0$ и ничего больше. Потому что, если величина \mathfrak{R} принимает лишь неотрицательные значения, то для $f(x) = |x|$ будет $f(\mathfrak{R}) = \mathfrak{R}$, и так как для $g(x) = \sqrt{|x|}$ тождественно выполняется $(g(x))^2 = f(x)$, то $(g(\mathfrak{R}))^2 = f(\mathfrak{R})$, $\mathfrak{R} = \mathfrak{S}^2$, где $\mathfrak{S} = g(\mathfrak{R})$ ¹⁶⁸.

Если величине \mathfrak{S} соответствует оператор S , то должно быть также $\operatorname{Spur}(US^2) \geq 0$. Так как оператор S^2 дефинитен

$$((S^2f, f) = (Sf, Sf) \geq 0),$$

то, написав A, B вместо U, S^2 , видим, что речь идет о доказательстве теоремы: если операторы A и B эрмитовы и дефинитны, то имеет место соотношение $\operatorname{Spur}(AB) \geq 0$. Но она была доказана в II. 11 с помощью общей теоремы о дефинитных операторах (ср. прим. ¹¹⁴) на стр. 140)¹⁶⁹.

¹⁶⁸) Непосредственная подстановка $\mathfrak{S} = \sqrt{\mathfrak{R}}$, т. е. $\mathfrak{S} = h(\mathfrak{R})$, $h(x) = \sqrt{x}$, не проходит, так как мы рассматриваем лишь вещественно-значные функции, определенные для всех вещественных x , а функция \sqrt{x} не является такой, поскольку для отрицательных x она мнимая.

¹⁶⁹) Удается провести простое непосредственное доказательство. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — полная ортонормированная система функций, $a_{\mu, \nu} = (A\varphi_\mu, \varphi_\nu)$,

$b_{\mu, \nu} = (B\varphi_\mu, \varphi_\nu)$, $\operatorname{Spur}(AB) = \sum_{\mu, \nu} a_{\mu, \nu} b_{\nu, \mu}$. Он ≥ 0 , если все $\sum_{\mu, \nu=1}^N a_{\mu, \nu} b_{\nu, \mu} \geq 0$. Пусть

$f = \sum_{\mu=1}^N x_\mu \varphi_\mu$, тогда $(Af, f) = \sum_{\mu, \nu=1}^N a_{\mu, \nu} x_\mu \bar{x}_\nu \geq 0$, $(Bf, f) = \sum_{\mu, \nu=1}^N b_{\mu, \nu} x_\mu \bar{x}_\nu \geq 0$,

так что конечные матрицы $a_{\mu, \nu}, b_{\mu, \nu}$ ($\mu, \nu = 1, \dots, N$) также дефинитны. Как

свойство дефинитности, так и величина суммы $\sum_{\mu, \nu=1}^N a_{\mu, \nu} b_{\nu, \mu}$ являются инва-

риантами ортогональных преобразований в N -мерном пространстве. Так как матрица $b_{\mu, \nu}$ эрмитова, то (в N -мерном пространстве!) ее можно привести с помощью ортогонального преобразования к диагональному виду. Поэтому ее можно считать диагональной, т. е. $b_{\mu, \nu} = 0$ при $\mu \neq \nu$. Таким образом,

$\sum_{\mu, \nu=1}^N a_{\mu, \nu} b_{\nu, \mu} = \sum_{\mu=1}^N a_{\mu, \mu} b_{\mu, \mu}$. Но, в силу дефинитности, $a_{\mu, \mu} \geq 0$, $b_{\mu, \mu} \geq 0$.
 (полагаем $x_\nu \left\{ \begin{array}{l} = 1 \text{ при } \nu = \mu, \\ = 0 \text{ при } \nu \neq \mu \end{array} \right| \right)$, и значит, наша сумма действительно ≥ 0 .

Тем самым мы полностью задали функции $\text{Erw}(\mathfrak{N})$: они соответствуют дефинитным эрмитовым операторам U , причем связь между ними дается соотношением $Sp.$. Оператор U будем называть статистическим оператором рассматриваемого ансамбля.

Вернемся теперь еще раз к замечаниям 1., 2., 3. из IV. I. Они будут утверждать:

1. С точки зрения относительных вероятностей и математических ожиданий операторы U и cU не различаются между собой существенно ($c > 0$ — константа).

2. $U = 0$ не приводит ни к каким утверждениям, а потому должно быть исключено.

3. Абсолютные (т. е. правильно нормированные) вероятности и математические ожидания получаются в случае, когда $\text{Spur } U = 1$. Коль скоро $\text{Spur } U$ конечен, оператор U можно нормировать,

согласно 1., умножив его на $c = \frac{1}{\text{Spur } U}$. (В силу дефинитности U , имеем $\text{Spur } U \geq 0$, причем даже $\text{Spur } U > 0$, так как из $\text{Spur } U = 0$ вытекает, как было показано в общем виде в конце IV. 1, но в нашем случае получается также из II. 11, что $U = 0$, т. е. случай, исключенный согласно 2..) Только для бесконечного $\text{Spur } U$ мы сталкиваемся с существенно относительными вероятностями и математическими ожиданиями.

Наконец, надо еще исследовать $\alpha), \beta)$ из IV. 1, т. е. найти среди операторов U те, которые отвечают бездисперсным и однородным ансамблям.

Сначала бездисперсность. В этом случае U можно считать правильно нормированным (ср. IV. 1), причем должно выполняться требование $\text{Erw}(\mathfrak{N}^2) = [\text{Erw}(\mathfrak{N})]^2$, т. е. $\text{Spur}(UR^2) = [\text{Spur}(UR)]^2$. Положив $R = P_{[\varphi]}$, имеем $R^2 = R = P_{[\varphi]}$, $\text{Spur}(UP_{[\varphi]}) = (U\varphi, \varphi)$, так что должно быть $(U\varphi, \varphi) = (U\varphi, \varphi)^2$, т. е. $(U\varphi, \varphi) = 0$ или 1. Пусть $\|\varphi'\| = 1$, $\|\varphi''\| = 1$, тогда функцию φ можно изменять непрерывным образом так, что она начинается с φ' и в конце равна φ'' , причем все время $\|\varphi\| = 1$ ¹⁷⁰⁾. При этом $(U\varphi, \varphi)$ тоже изменяется непрерывно, и так как это выражение равно или 0 или 1, то оно постоянно. Таким образом $(U\varphi', \varphi') = (U\varphi'', \varphi'')$. Это означает, что $(U\varphi, \varphi)$ всегда равно либо 0, либо 1, откуда сейчас же получаем $U = 0$ или $U = 1$. Случай $U = 0$ исключен согласно 2., а случай $U = 1$ ненормируем.

¹⁷⁰⁾ Для $\varphi' = \varphi''$ это очевидно. Пусть поэтому $\varphi' \neq \varphi''$. «Ортогонализация» функций φ' , φ'' (ср. II. 2) приводит к некоторой функции φ_1 с $\|\varphi_1\| = 1$, которая ортогональна к φ' , так что φ'' является линейной комбинацией φ' , φ_1 . Итак, $\varphi'' = a\varphi' + b\varphi_1$, $\|\varphi''\|^2 = |a|^2 + |b|^2 = 1$. Пусть, скажем, $|a| = \cos \theta$, $|b| = \sin \theta$, так что $a = e^{i\alpha} \cos \theta$, $b = e^{i\beta} \sin \theta$. Тогда $a^{(x)} = e^{ix\alpha} \cos x\theta$, $b^{(x)} = e^{ix\beta} \sin x\theta$ также удовлетворяют условию $|a^{(x)}|^2 + |b^{(x)}|^2 = 1$. Положив $\varphi^{(x)} = a^{(x)}\varphi' + b^{(x)}\varphi_1$, будем иметь $\|\varphi^{(x)}\| = 1$. При этом $\varphi^{(x)}$ непрерывно изменяется от $\varphi'(x=0)$ до $\varphi''(x=1)$.

(Supr $U =$ числу измерений пространства $= \infty$) и, как легко видеть непосредственно, не бездисперсен. Таким образом, не существует ансамблей без дисперсии.

Перейдем теперь к однородным ансамблям. Согласно §) и S. оператор U будет чистым, если из

$$U = V + W$$

(V, W — дефинитные эрмитовы операторы, как и U) следует, что $V = c'U$, $W = c''U^{171}$). Мы утверждаем, что это свойство имеет место тогда и только тогда, когда $U = P_{[\varphi]}(\|\varphi\| = 1)$.

Предположим сначала, что U обладает указанным свойством. Так как $U \neq 0$, то существует f_0 , для которого $Uf_0 \neq 0$, а значит, $f_0 \neq 0$ и, следовательно, $\langle Uf_0, f_0 \rangle > 0$ (ср. II. 5, теорема 19.). Построим два эрмитовых оператора

$$Vf = \frac{\langle f, Uf_0 \rangle}{\langle Uf_0, f_0 \rangle} \cdot Uf_0, \quad Wf = Uf - \frac{\langle f, Uf_0 \rangle}{\langle Uf_0, f_0 \rangle} \cdot Uf_0,$$

тогда

$$\langle Vf, f \rangle = \frac{|\langle f, Uf_0 \rangle|^2}{\langle Uf_0, f_0 \rangle} \geq 0,$$

$$\langle Wf, f \rangle = \frac{\langle Uf, f \rangle \langle Uf_0, f_0 \rangle - |\langle f, Uf_0 \rangle|^2}{\langle Uf_0, f_0 \rangle} \geq 0$$

(ср. II. 5, теорема 19.), т. е. операторы V, W дефинитны, причем, очевидно, $U = V + W$. Поэтому $V = c'U$, и так как $Vf_0 = Uf_0 \neq 0$, то $c' = 1$, т. е. $U = V$. Пусть теперь $\varphi = \frac{1}{\|Uf_0\|} \cdot Uf_0 (\|\varphi\| = 1)$ и $c = \frac{\|Uf_0\|^2}{\langle Uf_0, f_0 \rangle} (c > 0)$, тогда $Uf = Vf = c(f, \varphi)\varphi = cP_{[\varphi]}f$, т. е. $U = cP_{[\varphi]}$ и, согласно I., U в существенном совпадает с $P_{[\varphi]}$.

Пусть теперь, обратно, $U = P_{[\varphi]} (\|\varphi\| = 1)$. Если $U = V + W$, где V, W — дефинитные операторы, то аргументация ведется следующим образом. Из $Uf = 0$ следует, что

$$0 \leq (Vf, f) \leq (Vf, f) + (Wf, f) = (Uf, f) = 0, \quad (Vf, f) = 0$$

и, значит, $Vf = 0$ (ср. выше). Но из $(f, \varphi) = 0$ следует, что $Uf = P_{[\varphi]}f = 0$, а тем самым и $Vf = 0$. Поэтому, каково бы ни было g , всегда $(f, Vg) = (Vf, g) = 0$. Таким образом, всё, что ортогонально к φ , ортогонально также и к Vg , ввиду чего $Vg = c_g \cdot \varphi$ (c_g — число, зависящее от g), но нам нужен лишь случай $g = \varphi$, т. е. $V\varphi = c' \cdot \varphi$. Любой элемент f имеет вид $(f, \varphi) \cdot \varphi + f'$, где f' ортогонален к φ , так что

$$Vf = (f, \varphi) \cdot V\varphi + Vf' = (f, \varphi) \cdot c'\varphi = c'P_{[\varphi]}f = c'Uf.$$

¹⁷¹⁾ Из-за условия 2. следовало бы, собственно говоря, потребовать, чтобы $V \neq 0$, $W \neq 0$. Случай же $V = 0$ или $W = 0$ здесь содержится, если положить $c' = 0$, $c'' = 1$ или $c' = 1$, $c'' = 0$.

Поэтому $V = c'U$, $W = U - V = (1 - c')U$, чем и завершается доказательство.

Однородные ансамбли соответствуют, таким образом, операторам $U = P_{[\varphi]}$, $\|\varphi\| = 1$, причем соотношение $Sp.$ переходит в формулу E_2 . из III. 1:

$$(E_2.) \quad Erw(\mathfrak{N}) = Spur(P_{[\varphi]}R) = (R\varphi, \varphi).$$

Заметим, что $Erw(1) = Spur(P_{[\varphi]}) = 1$ (ввиду того, что $P_{[\varphi]}$ соответствует одномерному $[\varphi]$, или же согласно $E_2.$), т. е. рассматриваемая форма оператора U правильно нормирована. Выясним еще, наконец, при каких условиях $P_{[\varphi]}$ и $P_{[\psi]}$ обладают одной и той же статистикой, т. е. при каких условиях $P_{[\varphi]} = cP_{[\psi]}$ ($c > 0$ — константа, ср. I.). Так как $Spur(P_{[\varphi]}) = Spur(P_{[\psi]})$, то $c = 1$, так что $P_{[\varphi]} = P_{[\psi]}$, $[\varphi] = [\psi]$, и $\varphi = a\psi$, а из $\|\varphi\| = \|\psi\| = 1$ следует для константы a , что $|a| = 1$; очевидно, это условие также достаточно.

Резюмируя, можно сказать: ансамблей без дисперсии не существует. Однородные же ансамбли существуют, причем они соответствуют операторам $U = P_{[\varphi]}$, $\|\varphi\| = 1$ и только этим операторам. Для таких U соотношение $Sp.$ переходит в $E_2.$; нормировка в этом случае правильна, и U не изменяется при замене φ на $a\varphi$ (a — константа, $|a| = 1$), при любом же другом изменении φ оператор U изменяется существенным образом (см. I.). Таким образом, однородные ансамбли соответствуют состояниям квантовой механики, как эти последние были охарактеризованы выше: с помощью элементов фарнбергера пространства с $\|\varphi\| = 1$, причем постоянный множитель абсолютной величины 1 не играл роли (ср., например, III. 2), а статистические утверждения выводились из E_2 .¹⁷²⁾.

Все это мы вывели из чисто качественных условий $A'.$, $B'.$, α), β), I., II..

Таким образом, в рамках наших условий мы пришли к решению, и притом направленному против причинности: в самом деле, все ансамбли обладают дисперсией, даже и однородные.

Остается еще обсудить поднятый в III. 2 вопрос о «скрытых параметрах», т. е. вопрос о том, не вызвана ли дисперсия однородных ансамблей, описываемых волновыми функциями φ (т. е. соотношением $E_2.$) тем, что эти ансамбли не являются истинными состояниями, но лишь смесями многих состояний, в то время как для описания истинных состояний, помимо задания волновой функции φ ,

¹⁷²⁾ Дедукция двух последних параграфов, приводящая к однородным ансамблям, была указана автором Gött. Nachr., 1927. Существование однородных ансамблей, а также их связь с общими ансамблями были обнаружены независимо H. Weyl'ем, Z. Physik 46 (1927) и автором в указанной выше работе. Один частный случай более общих ансамблей (а именно, случай двух связанных систем, ср. дискуссию в VI. 2) был рассмотрен ранее Ландау, Z. Physik 45 (1927).

было бы необходимо задать еще и другие характеристики (они и являются «скрытыми параметрами»), которые все вместе описывают всё причинным образом, т. е. приводят к ансамблям без дисперсии. Статистика однородного ансамбля ($U = P_{[\varphi]}, \|\varphi\| = 1$) возникала бы тогда в результате усреднения по всем настоящим состояниям, из которых состоит ансамбль; иными словами, в результате усреднения по той области значений «скрытых параметров», которая реализуется в этих состояниях. Но это невозможно по двум причинам: Во-первых, потому, что тогда рассматриваемый однородный ансамбль можно было бы представить в виде смеси двух различных ансамблей¹⁷³⁾, вопреки его определению. Во-вторых, потому, что ансамблей без дисперсии, которые должны были бы соответствовать «истинным» состояниям (т. е. которые состояли бы исключительно из систем, находящихся в одном и том же «истинном» состоянии), вообще не существует. Заметим, что нам вовсе нет надобности вдаваться здесь более подробно в детали механизма «скрытых параметров»: твердо установленные результаты квантовой механики никоим образом нельзя будет получить с их помощью. Ведь если бы наряду с волновой функцией должны были бы существовать еще и другие фиксирующие состояние параметры («скрытые параметры»), то было бы даже исключено, чтобы те же самые физические величины стояли в тех же самых отношениях друг к другу (т. е. чтобы выполнялись I., II.).

Не помогло бы также предположение о том, что помимо известных изображаемых в квантовой механике с помощью операторов физических величин, существуют еще другие величины, до сих пор неизвестные. В самом деле, ведь тогда даже для известных физических величин оказались бы неверными соотношения, взятые из квантовой механики (т. е. I., II.). Таким образом, дело здесь совсем не в вопросе интерпретации квантовой механики (как нередко считалось). Напротив, квантовая механика должна была бы оказаться объективно ошибочной, чтобы стало возможным другое описание элементарных процессов, отличное от статистического.

Стоит упомянуть еще следующее обстоятельство. Соотношения неопределенности имеют на первый взгляд некоторое сходство с основными постулатами теории относительности. Именно, там утверждается, что принципиально невозможно установить одновременность двух событий, происходящих в точках, разделенных расстоянием r ,

¹⁷³⁾ Если «скрытые параметры», совокупность которых мы обозначим через π , принимают лишь дискретные значения $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_n$ ($n > 1$), то два ансамбля, смесь которых является исходным ансамблем, могут быть получены так: отнесем к первому ансамблю те системы, для которых $\pi = \pi_1$, а ко второму ансамблю те системы, для которых $\pi \neq \pi_1$. Если же π изменяется непрерывно в области Π , то выделим подобласть Π' области Π и отнесем систему к первому ансамблю, если для нее π принадлежит к Π' , и ко второму ансамблю, если для нее π не принадлежит к Π' .

с точностью, превосходящей интервал времени длительностью $\frac{r}{c}$ (c — скорость света), в то время как, согласно соотношениям неопределенности, принципиально невозможно указать положение материальной точки в фазовом пространстве с точностью, превосходящей область объема $\left(\frac{\hbar}{4\pi}\right)^3$ ¹⁷⁴⁾. Несмотря на это, существует фундаментальное различие. Теория относительности отрицает возможность объективного, точного измерения одновременности, но, несмотря на это, введением галилеевой системы отсчета можно наложить на мир координатную систему, которая позволит произвести определение одновременности, вполне согласующееся с нашими нормальными представлениями по этому поводу. Этому определению одновременности нельзя приписать объективного смысла только потому, что такую систему координат можно выбирать бесконечно многими различными способами, в силу чего получается бесконечно много различных, одинаково хороших, определений. Иными словами, в силу невозможности измерения, существует бесконечная многозначность в возможных теоретических определениях. По-другому обстоит дело в квантовой механике: там вообще невозможно описывать систему, характеризуемую волновой функцией φ , точкой в фазовом пространстве, невозможно даже в том случае, когда вводятся новые (гипотетические, ненаблюдаемые) координаты, «скрытые параметры», поскольку это привело бы к ансамблям без дисперсии. Иными словами, не только измерение невозможно, но невозможно и никакое разумное теоретическое определение (т. е. такое определение, которое хотя и не могло бы быть эмпирически доказано, как в случае теории относительности, но во всяком случае не могло бы быть и эмпирически опровергнуто). Таким образом, принципиальная невозможность измерений основывается на том, что в одних случаях имеется бесконечно много, а в других случаях не имеется вовсе конструктивных определений спорных понятий, которые не противоречили бы непосредственному опыту (или же общим допущениям теории).

¹⁷⁴⁾ Это фазовое пространство шестимерно. Его шестью координатами являются три декартовы координаты точки q_1, q_2, q_3 и три соответствующих импульса p_1, p_2, p_3 . Согласно III. 4, соответствующие дисперсии $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \eta_1, \eta_2, \eta_3$ удовлетворяют соотношениям

$$\epsilon_1 \eta_1 \geq \frac{\hbar}{4\pi}, \quad \epsilon_2 \eta_2 \geq \frac{\hbar}{4\pi}, \quad \epsilon_3 \eta_3 \geq \frac{\hbar}{4\pi},$$

т. е.

$$\epsilon_1 \epsilon_2 \epsilon_3 \eta_1 \eta_2 \eta_3 \geq \left(\frac{\hbar}{4\pi}\right)^3,$$

и в пределах этого объема положение в фазовом пространстве классической механики никогда не определено.

Резюмируя, можно охарактеризовать положение причинности в современной физике следующим образом. В макромире не существует опыта, который поддержал бы ее. Более того, такой опыт невозможен, так как видимый причинный порядок макромира (т. е. для объектов, воспринимаемых невооруженным глазом) не имеет, конечно, другой причины, кроме «закона больших чисел», совершенно независимо от того, являются управляющие элементарными процессами (т. е. настоящие) законы природы причинными или нет¹⁷⁵⁾. То, что макроскопически тождественные объекты ведут себя макроскопически одинаково, имеет мало общего с причинностью: ведь в действительности эти объекты не тождественны, поскольку соответствующие координаты, определяющие состояния образующих их атомов, почти никогда не совпадают. Макроскопическое рассмотрение усредняет по этим координатам (здесь это — «скрытые параметры»), но так как их число очень велико (примерно 10^{25} на 1 г материи), то это усреднение, в соответствии с известными теоремами теории вероятностей, ведет к чрезвычайно сильному уменьшению всех дисперсий. (Вообще говоря, конечно. В особых же случаях, например в броуновском движении, в нестабильных состояниях и пр., эта кажущаяся макроскопическая причинность уже не имеет места.) Вопрос о причинности оказалось возможным проверить как следует лишь при изучении атомных явлений, самых элементарных процессов, но здесь, на современном этапе наших знаний, все говорит против. Действительно, единственная имеющаяся в нашем распоряжении формальная теория, упорядочивающая и обобщающая, в известной степени удовлетворительно, наш опыт, т. е. квантовая механика, находится с причинностью в непреложном логическом противоречии. Конечно, было бы преувеличением утверждать, что тем самым с причинностью покончено: несомненно, что квантовая механика в ее нынешнем состоянии остается еще неполной, и могло бы даже оказаться, что она ошибочна, хотя последнее и представляется совершенно невероятным в свете ошеломляющих возможностей, предоставляемых ею для понимания общих проблем и для численного расчета конкретных. Хотя квантовая механика находится в блестящем соответствии с опытом и хотя она приоткрыла нам завесу над одной качественно новой стороной мира, тем не менее ни об одной теории никогда нельзя сказать, что она доказана опытом, но лишь что она дает для него лучшее из известных объяснений. Учитывая все эти предосторожности, можно все же сказать: в настоящее время не существует ни повода, ни извинения для разговоров о причинности в природе. Действительно, нет опыта, который поддерживал бы наличие причинности, поскольку макроскопические опыты для этой цели принципиально

175) Ср. необычайно ясное рассуждение Schödinger'a по этому поводу: Naturwiss. 17, Heft 37 (1929).

непригодны, а единственная известная теория, которая совместна с совокупностью наших опытных знаний относительно элементарных процессов — квантовая механика — ей противоречит.

Речь идет здесь, разумеется, об исстари укоренившемся способе рассмотрения, присущем всем людям, но никоим образом не о логической необходимости (что, между прочим, видно хотя бы из того, что статистическую теорию вообще удалось построить), и тот, кто подходит к предмету без предвзятого мнения, не имеет никакого основания упорствовать в таком способе рассмотрения. Обосновано ли при таких обстоятельствах жертвовать ради него разумной физической теорией?

3. Выводы из экспериментов

Последний параграф учит нас, что самый общий статистический ансамбль, совместный с нашими основными качественными предположениями, характеризуется, согласно закону $Sp.$, некоторым дефинитным оператором U . Ансамбли частного вида, названные нами однородными, характеризуются операторами $U = P_{[\varphi]} (\|\varphi\| = 1)$. Поскольку эти ансамбли являются истинными (далее неразложимыми) состояниями системы S , то мы их будем называть также состояниями (именно, $U = P_{[\varphi]}$ назовем состоянием φ).

Если спектр U чисто дискретен, скажем, с собственными значениями w_1, w_2, \dots и с собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (которые образуют полную ортонормированную систему), то будем иметь (ср. II. 8)

$$U = \sum_n w_n P_{[\varphi_n]}.$$

В силу дефинитности U все $w_n \geq 0$ [действительно, $U\varphi_n = w_n\varphi_n$, так что $(U\varphi_n, \varphi_n) = w_n$, и значит, $w_n \geq 0$], причем $\sum_n w_n = \sum_n (U\varphi_n, \varphi_n) = Sp_U U$ (ср. также начало IV. 1), так что $\sum_n w_n = 1$, если U правильно нормирован. Тем самым можно, согласно сказанному в начале IV. 1, понимать U как смесь состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ с соответствующими относительными весами w_1, w_2, \dots — если U правильно нормирован, то эти веса правильны и абсолютно.

Но правильно нормированный оператор U , т. е. такой, что $Sp_U U = 1$, будет, согласно II. 11 (ср., в частности, прим. ¹¹⁵, стр. 143), вполне непрерывным и, значит, будет обладать чисто дискретным спектром. То же самое, конечно, справедливо и в случае конечного $Sp_U U$. (Случай бесконечного $Sp_U U$ можно рассматривать как предельный случай, на чем мы не будем останавливаться.) Таким образом, в действительно интересном случае рассматриваемый ансамбль представим в виде смеси состояний, которые мы, кроме того, выбирали попарно ортогональными. Поэтому мы будем общие

ансамбли (в противоположность однородным, т. е. состояниям) называть смесями.

Если все собственные значения оператора U просты, т. е. все w_1, w_2, \dots отличны друг от друга, то, как мы знаем, система $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ определяется однозначно с точностью до постоянных множителей модуля 1, а значит, соответствующие состояния (и операторы $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$) — полностью. Равным образом однозначно определяются и веса w_1, w_2, \dots , разумеется, если не принимать во внимание их порядок. Таким образом, в этом случае можно однозначно указать, из каких (попарно ортогональных) состояний построена смесь U . Существенно по-иному обстоит дело, если U обладает также и кратными собственными значениями («вырождения»). В II.8 мы обсуждали подробно, как могут быть выбраны $\varphi_1, \varphi_2, \dots$: это можно сделать бесконечно многими, существенно различными способами (тогда как w_1, w_2, \dots все еще могут быть определены однозначно). Следует выписать те из w_1, w_2, \dots , которые отличны друг от друга: w', w'', \dots , для каждого из них указать замкнутое линейное многообразие принадлежащих им собственных функций (т. е. решений уравнения $Uf = wf$) $\mathfrak{M}_{w'}, \mathfrak{M}_{w''}, \dots$ и затем выбрать произвольным способом в каждом из $\mathfrak{M}_{w'}, \mathfrak{M}_{w''}, \dots$ ортогональные системы $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi''_1, \chi''_2, \dots, \dots$, растягивающие данные многообразия. Эти системы $\chi'_1, \chi'_2, \dots; \chi''_1, \chi''_2, \dots; \dots$ образуют тогда систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, а соответствующие собственные значения $w', w', \dots; w'', w'', \dots; \dots$ являются тогда весами w_1, w_2, \dots Коль скоро какое-либо \mathfrak{M}_w имеет больше чем одно измерение, т. е. имеется кратное собственное значение, принадлежащее ему, χ_1, χ_2, \dots не определяются больше с точностью до постоянного множителя модуля 1 (например, в качестве χ_1 можно взять любой нормированный элемент \mathfrak{M}_w), т. е. соответствующие им состояния также многозначны!

Это явление можно сформулировать также следующим образом: если состояния χ_1, χ_2, \dots попарно ортогональны (т. е. χ_1, χ_2, \dots образуют ортонормированную систему, безразлично — конечную или бесконечную) и мы их смешиваем таким образом, что все они входят с одинаковыми весами (скажем, с относительными весами $1 : 1 : \dots$), то получающаяся в результате смесь зависит лишь от замкнутого линейного многообразия \mathfrak{M} , растягиваемого χ_1, χ_2, \dots Действительно,

$$U = P_{[\chi_1]} + P_{[\chi_2]} + \dots = P_{\mathfrak{M}}.$$

Если число χ_1, χ_2, \dots конечно, скажем, равно s : χ_1, \dots, χ_s , то оператор U можно представить себе как смесь всех нормированных элементов \mathfrak{M} , т. е. всех состояний из \mathfrak{M} . Эти состояния имеют вид

$$\chi = x_1 \chi_1 + \dots + x_s \chi_s, \quad |x_1|^2 + \dots + |x_s|^2 = 1.$$

В самом деле, положим $x_1 = u_1 + iv_1, \dots, x_s = u_s + iv_s$, через K обозначим $(2s - 1)$ -мерную поверхность сферы $u_1^2 + v_1^2 + \dots + u_s^2 + v_s^2 = 1$, соответствующей условию $|x_1|^2 + \dots + |x_s|^2 = 1$, и через do элемент поверхности этой сферы. Положим еще

$$U' = \int_K \int \dots \int \int P_{[\chi]} do,$$

тогда

$$\begin{aligned} (U' f, g) &= \int_K \int \dots \int \int (P_{[\chi]} f, g) do = \int_K \int \dots \int \int (f, \chi) \overline{(g, \chi)} do = \\ &= \int_K \int \dots \int \int \left(f, \sum_{\mu=1}^s (u_\mu + iv_\mu) \chi_\mu \right) \overline{\left(g, \sum_{\mu=1}^s (u_\mu + iv_\mu) \chi_\mu \right)} do = \\ &= \int_K \int \dots \int \int \sum_{\mu, \nu=1}^s (f, \chi_\mu) \overline{(g, \chi_\nu)} (u_\mu - iv_\mu) (u_\nu + iv_\nu) do = \\ &= \sum_{\mu, \nu=1}^s (f, \chi_\mu) \overline{(g, \chi_\nu)} \int_K \int \dots \int \int [(u_\mu u_\nu + v_\mu v_\nu) + i(u_\mu v_\nu - u_\nu v_\mu)] do. \end{aligned}$$

Таким образом, поскольку все $u_\mu v_\nu, u_\nu v_\mu$ -интегралы, а также все $u_\mu u_\nu, v_\mu v_\nu$ -интегралы обращаются в нуль при $\mu \neq \nu$ из соображений симметрии¹⁷⁶⁾, а при $\mu = \nu$ все эти последние интегралы $= \frac{C}{2s}$ ($C > 0$)¹⁷⁶⁾, находим

$$\begin{aligned} (U' f, g) &= \frac{C}{s} \sum_{\mu=1}^s (f, \chi_\mu) \overline{(g, \chi_\mu)} = \frac{C}{s} \sum_{\mu=1}^s (P_{[\chi_\mu]} f, g) = \\ &= \left(\left\{ \frac{C}{s} \sum_{\mu=1}^s P_{[\chi_\mu]} \right\} f, g \right). \end{aligned}$$

¹⁷⁶⁾ Замена $u_\mu \rightarrow -u_\mu$ (или $u_\nu \rightarrow -u_\nu$ и $v_\mu \rightarrow -v_\mu$) является операцией симметрии поверхности K , в результате которой первые множители подынтегральных выражений изменяют знак, так что соответствующие интегралы равны 0. Замены $u_\mu \rightarrow v_\mu, v_\mu \rightarrow u_\mu$ и $u_\mu \rightarrow u_\nu, u_\nu \rightarrow u_\mu$ представляют собой такую операцию симметрии поверхности K , при которой последние интегралы переходят друг в друга, ввиду чего они равны между собой, а значит, равны

$\frac{1}{2s}$ -й их суммы: $\int_K \int \dots \int \int (u_1^2 + v_1^2 + \dots + u_s^2 + v_s^2) do = \int_K \int \dots \int \int dv =$

= площади поверхности K , которую обозначим через C .

Это означает, что

$$U' = \frac{C}{s} \sum_{\mu=1}^s P_{[\chi_\mu]} = \frac{C}{s} U,$$

т. е. U' , U отличаются друг от друга несущественным образом.

Эти обстоятельства имеют большое значение для характера квантовомеханической статистики. Ввиду этого мы повторим их еще раз:

1. Если смесь состоит из взаимно ортогональных состояний с в точности равными весами, то нельзя больше установить, какие это были состояния. Иными словами, в результате смещивания в точно равных отношениях различных (взаимно ортогональных) компонент можно получить одну и ту же смесь.

2. Полученная таким образом смесь в случае конечного числа компонент идентична смеси всех состояний, являющихся линейными комбинациями этих компонент.

Вот простейший пример: если смещивать φ и ψ (ортогональные!) $1:1$, то получится то же, что и если, например, смещать $\frac{\varphi+\psi}{\sqrt{2}}$ и $\frac{\varphi-\psi}{\sqrt{2}} 1:1$, или же все $x\varphi+y\psi (|x|^2+|y|^2=1)$. Если смещиваются неортогональные φ , ψ (отношение может не быть $1:1$), то их тем менее можно идентифицировать по готовой смеси, поскольку эту смесь наверняка можно представлять себе как смесь ортогональных состояний.

Дальнейшее углубление в природу смесей мы отложим до термодинамических рассмотрений в V. 2 и далее.

Формула **Sp.** в IV. 2 указывала, как надо вычислять математическое ожидание величины \mathfrak{A} с оператором R в смеси со статистическим оператором U : это $\text{Spur}(UR)$. Вероятность того, что значение a оператора R лежит в интервале $a' < a \leq a''$ (a' , a'' заданы, $a' \leq a''$), находится как в III. 1 или III. 5: с помощью функции

$$F(x) = \begin{cases} 1 & \text{для } a' < x \leq a'', \\ 0 & \text{в остальных случаях} \end{cases}$$

строится величина $F(\mathfrak{A})$, ее математическое ожидание и будет указанной вероятностью. Если величине $F(\mathfrak{A})$ соответствует (согласно **I.** в IV. 2) оператор $F(R)$ и если $E(\lambda)$ — относящееся к R разложение единицы, то, как мы неоднократно вычисляли, $F(R) = E(a'') - E(a')$ и искомая вероятность $w(a', a'') = \text{Spur} U(E(a'') - E(a'))$. Поэтому функцией распределения, определяющей статистику величины \mathfrak{A} , будет $w(a) = \text{Spur} UE(a)$ [ср. IV. 1, прим.¹⁷⁵⁾ на стр. 243; в случае состояний, т. е. когда $U = P_{[\varphi]}$, снова будет $w(a) = \text{Spur} P_{[\varphi]} E(a) = = (E(a)\varphi, \varphi)]$. Естественно, что эти вероятности будут лишь относительными, если оператор U нормирован неправильно.

На вопрос о том, когда величина \mathfrak{R} с оператором R с достоверностью принимает значение λ^* в смеси со статистическим оператором U , можно ответить непосредственно с помощью функции $w(a)$: для $a < \lambda^*$ должно быть $w(a) = 0$, а для $a \geq \lambda^*$ $w(a) = 1$, или же, если U неправильно нормирован, $=\text{Erw}(1)=\text{Spur } U$. То есть $\text{Spur } UE(a) = 0$, если $a < \lambda^*$, $\text{Spur } U(1 - E(a)) = 0$, если $a \geq \lambda^*$ ¹⁷⁷⁾. Но в случае дефинитных операторов A, B из $\text{Spur } AB = 0$ вытекает что $AB = 0$ (ср. II. 11), так что будем иметь $UE(a) = 0$, если $a < \lambda^*$, и $UE(a) = U$, если $a \geq \lambda^*$, или, что то же самое, поскольку в силу эрмитовости произведения сомножители должны коммутировать, $E(a)U = 0$ или же $= U$, т. е. если $f = Ug$, то $E(a)f = \begin{cases} = f \text{ для } a \geq \lambda^* \\ = 0 \text{ для } a < \lambda^* \end{cases}$.

Согласно проведенной в II. 8 дискуссии, это означает, что $Rf = \lambda^*f$, т. е. $RUg = \lambda^*Ug$ тождественно по g . Следовательно, последнее условие гласит: $RU = \lambda^*U$. Если обозначить через \mathfrak{M} замкнутое линейное многообразие, порожденное всеми решениями h уравнения $Rh = \lambda^*h$, то можно сказать также: Uf всегда лежит в \mathfrak{M} .

Тот же результат, впрочем, можно было бы получить из условия обращения в нуль дисперсии, т. е. обращения в нуль (возможно, относительного) математического ожидания величины $(\mathfrak{R} - \lambda^*)^2$.

Мы ответили в III. 3 на следующие вопросы ($\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ — физические величины, R, S, \dots — их соответствующие операторы):

1. Когда \mathfrak{R} измеримо абсолютно точно? Ответ: Если R обладает чисто дискретным спектром.

2.. Когда $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}$ абсолютно точно измеримы одновременно? Ответ: Если R, S обладают чисто дискретными спектрами и перестановочны между собой.

3. Когда несколько величин $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ абсолютно точно измеримы одновременно? Ответ: Если R, S, \dots обладают чисто дискретными спектрами и все перестановочны.

4. Когда несколько величин $\mathfrak{R}, \mathfrak{S}, \dots$ измеримы с произвольной точностью одновременно? Ответ: Если R, S, \dots все перестановочны.

¹⁷⁷⁾ Если $\text{Spur } U$ бесконечен, то последняя формула, полученная с помощью вычитания, может показаться сомнительной. Тем не менее ее можно обосновать также следующим образом: то, что величина \mathfrak{R} имеет значение λ^* , означает, что $w(a', a'') = 0$, т. е. $\text{Spur } U(E(a'') - E(a')) = 0$, если $a'' < \lambda^*$ или $a' \geq \lambda^*$. Так как этот шпур всегда ≥ 0 и так как он не убывает с a'' и не возрастает с a' , то при $a'' < \lambda^*$ достаточно рассмотреть его $\lim_{a' \rightarrow -\infty}$, а при $a' \geq \lambda^*$ — его $\lim_{a'' \rightarrow +\infty}$, т. е. $\text{Spur } UE(a'') = 0$, если $a'' < \lambda^*$, $\text{Spur } U(1 - E(a')) = 0$ при $a' \geq \lambda^*$.

При этом мы использовали следующий принцип, абстрагированный из результата эксперимента Комптона — Симонса:

(M.) Если физическая величина \mathfrak{N} дважды измеряется на системе S , причем измерения следуют непосредственно одно за другим, то в обоих случаях получается одно и то же значение. Это будет справедливо даже в том случае, когда в исходном состоянии системы S \mathfrak{N} обладала дисперсией, так что \mathfrak{N} -измерение, помимо всего прочего, могло изменить состояние системы S .

Физический смысл **M.** мы уже обсудили подробно в III. 3. Дальнейшими предположениями для ответов **I.—4.** были: статистическая формула E_2 , из III. 3 для состояний; допущение F , из III. 3, в силу которого величине $F(\mathfrak{N})$ соответствует оператор $F(R)$, если только величине \mathfrak{N} соответствует оператор R ; допущение, согласно которому величине $\mathfrak{N} + \mathfrak{S}$ соответствует оператор $R + S$, если (одновременно измеримым) величинам \mathfrak{N} , \mathfrak{S} соответствуют операторы R , S .

Так как эти три предположения по-прежнему осуществляются (первое вытекает из формулы $Sp.$ в IV. 2, а два других соответствуют **I.**, **II.** в IV. 2) и так как **M.** также должно считаться верным, — поскольку мы считаем его необходимым для принципиального построения квантовой механики, — то здесь также останутся в силе приведенные в III. 3 доказательства **I.—4..** Таким образом, указанные ответы снова оказываются правильными.

В III. 5 мы исследовали такие физические величины, которые принимают лишь два значения: 0 и 1. Они взаимно однозначно соответствуют альтернативным свойствам \mathfrak{E} . Действительно, если бы было задано \mathfrak{E} , то соответствующую величину можно было бы определить так: эта величина будет измерена, если мы сможем рассудить (см. прим. перев. на стр. 187), имеет \mathfrak{E} место или нет; ее значениями будут соответственно 1 и 0. Наоборот, если была задана величина, то \mathfrak{E} было следующим свойством: названная величина имеет значение 1 (т. е. не 0). Из приведенного там F , (т. е. из **I.** в IV. 2) следовало, что соответствующие операторы E как раз и являются операторами проектирования. Вероятность того, что \mathfrak{E} имеет место, равнялась математическому ожиданию определенной выше величины. В III. 5 эта вероятность вычислялась лишь для состояний φ (т. е. для $U = P_{[\varphi]}$, $\|\varphi\| = 1$), но ее можно вычислить и в общем случае по формуле $Sp.$: она равна $Sp_U U E$ (относительная!, абсолютная, только если U правильно нормирован, т. е. когда $Sp_U U = 1$).

Установив справедливость положений **I.—4.**, мы тем самым доказали вытекающие из них утверждения $\alpha) - \zeta)$ из III. 5. Следует отметить, правда, что там $\alpha)$ давало информацию лишь относительно состояний, а здесь мы распространяли его на любые смеси:

$\alpha')$ В смеси со статистическим оператором U вероятности того, что свойство \mathfrak{E} имеет место или же не имеет места, равны

соответственно

$$\text{Spur}(UE) \quad \text{или} \quad \text{Spur}(U(1 - E))$$

(вероятности относительные!, абсолютными они будут лишь в том случае, когда U правильно нормирован, т. е. когда $\text{Spur } U = 1$).

Если рассматривается несколько величин $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$, причем величинам $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ соответствуют операторы R_1, \dots, R_l с разложениями единицы $E_1(\lambda), \dots, E_l(\lambda)$, и если, далее, задано l интервалов $I_1 : \lambda'_1 < \lambda \leqslant \lambda''_1, \dots, I_l : \lambda'_l < \lambda \leqslant \lambda''_l$, и положено $E_1(I_1) = E_1(\lambda''_1) - E_1(\lambda'_1), \dots, E_l(I_l) = E_l(\lambda''_l) - E_l(\lambda'_l)$, то свойствам « \mathfrak{R}_1 лежит в I_1'' », ..., « \mathfrak{R}_l лежит в I_l'' » соответствуют проекционные операторы $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ (ср. §). Характеристичным условием одновременной рассудимости этих свойств является перестановочность проекционных операторов $E_1(I_1), \dots, E_l(I_l)$ (ср. γ). Их одновременному осуществлению будет соответствовать проекционный оператор $E = E_1(I_1) \cdots E_l(I_l)$ (ср. ε), а соответствующая вероятность будет равна $\text{Spur}(UE)$ (ср. α').

Пойдем теперь по обратному пути: предположим, что мы не знаем состояния системы S , но зато проделали в S некоторые измерения, результаты которых нам известны. Ведь в действительности дело обстоит всегда именно таким образом, так как узнать что-нибудь о состоянии S можно лишь из результатов измерений. Строго говоря, состояния — это лишь теоретические конструкции, в действительности в нашем распоряжении оказываются лишь результаты измерений, и задача физики состоит в том, чтобы установить связь между прошлыми и будущими измерениями. Конечно, для достижения этой цели всегда вводится вспомогательное понятие «состояния», но физическая теория должна тогда научить нас, как, с одной стороны, заключить из прошлых измерений о настоящем состоянии и как, с другой стороны, перейти от настоящего состояния к будущим результатам измерений. До сих пор мы занимались только вторым вопросом, теперь же нам надо обратиться к первому.

Если предшествующие измерения недостаточны, чтобы однозначно установить настоящее состояние, то при известных обстоятельствах из них можно узнать вероятности, с которыми входят отдельные состояния (это справедливо как в причинных теориях, например в классической механике, так и в квантовой механике). Итак, задача состоит, собственно, в том, чтобы по данным результатам измерений найти смесь, которая обладала бы той же статистикой, что и ожидаемая для системы S , относительно которой нам известно только, что в ней проделаны указанные измерения и что они дали указанные результаты. Конечно, мы должны уточнить смысл выражения: относи-

тельно системы S «известно только то» и ничего больше, а также указать, как отсюда может быть получена некоторая статистика.

Связь со статистикой должна, во всяком случае, быть следующей: если для многих систем S'_1, \dots, S'_M (многих экземпляров системы S) эти измерения дают упомянутые результаты, то тогда ансамбль $[S'_1, \dots, S'_M]$ во всех своих статистических свойствах совпадает со смесью, которая дает те же результаты измерений. То, что измерения на всех системах S'_1, \dots, S'_M дают одни и те же результаты, можно приписать в духе M , тому обстоятельству, что первоначально имелся большой ансамбль $[S_1, \dots, S_N]$, в котором были проделаны измерения, а затем из тех элементов, для которых получался требуемый результат, был образован новый ансамбль, который и является ансамблем $[S'_1, \dots, S'_M]$. Конечно, все зависит от того, как был выбран ансамбль $[S_1, \dots, S_N]$. Этот исходный ансамбль, так сказать, задает априорные вероятности индивидуальных состояний системы S . В целом положение вещей хорошо известно из общей теории вероятностей: для того чтобы можно было из результатов измерений делать выводы о состояниях, то есть из следствий — о причинах, т. е. для вычисления апостериорных вероятностей, необходимо знать априорные вероятности. Вообще говоря, последние можно выбирать многими способами, вследствие чего наша задача не решается единственным образом, тем не менее мы увидим, что при наличии специальных квантовомеханических соотношений имеется некоторый особенно подходящий выбор первоначального ансамбля $[S_1, \dots, S_N]$ (т. е. априорных вероятностей).

Совсем по-другому обстоит дело, когда известно достаточно много результатов измерений, чтобы полностью определить состояние системы S : в этом случае всякий вопрос должен иметь однозначный ответ. Мы увидим вскоре, каким образом проявляется это обстоятельство.

Отметим, наконец, еще следующее. Вместо того чтобы говорить, что нам известны многие результаты измерений, относящиеся к системе S , можно сказать также, что система S подвергалась испытанию относительно какого-то известного свойства \mathfrak{E} и что его наличие было установлено. Из α — ζ нам известно, какая существует связь между этими вещами: если, например, имеются результаты одновременно допустимых измерений, из которых следует, что значения величин $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_l$ лежат соответственно в интервалах I_1, \dots, I_l , то (пользуясь введенными выше символами) проекционным оператором величины \mathfrak{E} будет $E = E_1(I_1) \dots E_l(I_l)$.

Итак, наши знания о S всегда выражаются в наличии некоторого известного свойства \mathfrak{E} , которое формально характеризуется заданием проекционного оператора E . Надо найти статистический оператор U ансамбля $[S'_1, \dots, S'_M]$ с одинаковыми значениями, равно как и ста-

тистический оператор U_0 общего исходного ансамбля $[S_1, \dots, S_N]$. Каковы те математические соотношения, которые связывают между собой E , U , U_0 ?

В силу **M.** свойство \mathfrak{E} наверняка имеет место в $[S'_1, \dots, S'_M]$, т. е. величина, принадлежащая \mathfrak{E} , имеет там значение 1. Это означает, как мы видели в начале этого параграфа, что $EU = U$, т. е. что Uf всегда лежит в \mathfrak{M} , где \mathfrak{M} означает множество всех f , для которых $Ef = f$, т. е. замкнутое линейное многообразие, принадлежащее E .

Вместо $EU = U$ мы можем написать также $UE = U$, $U(1-E) = 0$, т. е. $Ug = 0$ для любых $g = (1-E)f$, иными словами, для всех g из замкнутого линейного многообразия, принадлежащего к $1-E$, т. е. для всех g из $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$. Итак, Uf равно 0 для всех f из $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$, а для f из \mathfrak{M} Uf также лежит в \mathfrak{M} . На этом пути относительно U больше ничего сказать нельзя.

Этим оператор U определяется тогда и только тогда (в существенном, т. е. с точностью до постоянного множителя), когда множество \mathfrak{M} является 0- или 1-мерным. Действительно, в случае $\mathfrak{M} = [0]$ мы имеем $U = 0$, что, согласно IV.2, замечание 1, невозможно; в случае же $\mathfrak{M} = [\varphi]$ ($\varphi \neq 0$, поэтому можно принять, что $\|\varphi\| = 1$) будем иметь $Uf = c\varphi$, так что и для всех f из \mathfrak{M} (поскольку они равны $a\varphi$) будет $Uf = cf$ и, следовательно, вообще $Uf = UEf = cEf$. $U = cE = cP_{[\varphi]}$, и так как $c > 0$ (поскольку U дефинитен и $\neq 0$), то U в существенном $= E = P_{[\varphi]}$. В том случае, когда у множества \mathfrak{M} число измерений ≥ 2 , можно выбрать два ортонормированных элемента φ, ψ из \mathfrak{M} , и тогда $P_{[\varphi]}, P_{[\psi]}$ будут двумя существенно различными операторами U , удовлетворяющими нашим условиям. Итак, равенство $E = 0$ невозможно, при $E = P_{[\varphi]} (\|\varphi\| = 1)$ будет $U = E = P_{[\varphi]}$, во всех других случаях U многозначно.

То, что для $E = 0$ вообще нельзя найти никакого U , было бы нехорошо, если бы S могла обладать таким свойством \mathfrak{E} . Однако, согласно **η**), это исключено: такое свойство \mathfrak{E} никогда не имеет места, его вероятность всегда равна 0. Одномерное множество \mathfrak{M} , т. е. $E = P_{[\varphi]} (\|\varphi\| = 1)$, определяет U однозначно, и даже как состояние φ , т. е. это то самое измерение, которое полностью определяет состояние системы S , если оказывается утвердительным, причем этим состоянием оказывается φ^{178}). Все прочие измерения не являются полными и их не хватит для определения состояния.

¹⁷⁸⁾ То есть если \mathfrak{E} имеет место, то состоянием будет φ . Если же оно не имеет места, то имеет место «не \mathfrak{E} », в силу чего вместо $E = P_{[\varphi]}$, $\mathfrak{M} = [\varphi]$ выступят $1 - E = 1 - P_{[\varphi]}$, $\mathfrak{R} - \mathfrak{M} = \mathfrak{R} - [\varphi]$, которые не определяют U единственным образом. (\mathfrak{E} как раз соответствует вопросу: «Это состояние, есть ли оно φ ?».) Измерение, которое при любом исходе определяет состояние однозначно, — это измерение величины \mathfrak{R} , оператор которой R обладает дискретным спектром с исключительно простыми собственными значениями, ср. III.3. Тогда после измерения будет осуществляться одно из состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots$

В общем случае мы поступаем следующим образом. Обозначим величину, соответствующую свойству \mathfrak{E} , также через \mathfrak{E} . Тогда U получается за счет того, что в ансамбле $[S_1, \dots, S_N]$, принадлежащем U_0 , измеряется \mathfrak{E} , а затем все элементы, для которых получено значение 1, объединяются в ансамбль оператора U (т. е. в $[S'_1, \dots, S'_M]$). Само измерение свойства \mathfrak{E} можно проводить многими различными способами, например измеряя какую-нибудь другую величину \mathfrak{R} , известной функцией которой является свойство \mathfrak{E} : $\mathfrak{E} = F(\mathfrak{R})$. Если, например, $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ является ортонормированной системой, растягивающей \mathfrak{M} , а ψ_1, ψ_2, \dots является соответствующей для $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$, то система $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ растягивает $\mathfrak{M} + (\mathfrak{R} - \mathfrak{M}) = \mathfrak{R}$, т. е. является полной. Пусть $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ — попарно различные вещественные числа, а оператор R определен посредством

$$R \left(\sum_n x_n \varphi_n + \sum_n y_n \psi_n \right) = \sum_n \lambda_n x_n \varphi_n + \sum_n \mu_n y_n \psi_n.$$

Оператор R имеет, очевидно, чисто дискретный спектр $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ с соответствующими собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$, причем все собственные значения просты. Если $F(x)$ — какая-нибудь функция, для которой

$$F(\lambda_n) = 1, \quad F(\mu_n) = 0,$$

то $F(R)$ имеет для $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ собственное значение 1, а значит, и для любого f из \mathfrak{M} . В случае же ψ_1, ψ_2, \dots собственным значением будет 0, а значит, и для любого f из $\mathfrak{R} - \mathfrak{M}$. Таким образом, $E = F(R)$. Если R принадлежит \mathfrak{R} , то тем самым $\mathfrak{E} = F(\mathfrak{R})$ и \mathfrak{E} -измерение можно истолковать как \mathfrak{R} -измерение.

В этом случае мы можем вычислить, какая связь существует между U_0, U . После \mathfrak{R} -измерения каждая система будет находиться в одном из состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ в соответствии с тем, какое из значений $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$ было обнаружено. Относящиеся сюда вероятности будут равны соответственно

$$\text{Spur}(U_0 P_{[\varphi_1]}) = (U_0 \varphi_1, \varphi_1), \quad \text{Spur}(U_0 P_{[\varphi_2]}) = (U_0 \varphi_2, \varphi_2), \dots,$$

$$\text{Spur}(U_0 P_{[\psi_1]}) = (U_0 \psi_1, \psi_1), \quad \text{Spur}(U_0 P_{[\psi_2]}) = (U_0 \psi_2, \psi_2), \dots$$

(ср. соображения из III. 3, справедливость которых была нами установлена). Это значит, что эти части U_0 -ансамбля переходят в ансамбли

(собственных функций оператора R), т. е., вообще говоря, измерение изменяет состояние системы S . Аналогично, \mathfrak{E} -измерение также изменяет состояние, поскольку после него в случае положительного результата оказывается $U = P_{[\varphi]}$, а в случае отрицательного результата, напротив, $U(1 - P_{[\varphi]}) = U$, $UP_{[\varphi]} = 0$, т. е. $U\varphi = 0$, тогда как первоначально ни один из этих случаев не был обязательным. Это квантовомеханическое «отыскание» состояния, таким образом, изменяет его, как и следовало ожидать.

$P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots, P_{[\psi_1]}, P_{[\psi_2]}, \dots$. Поскольку значению $\mathfrak{E} = 1$ соответствует $\mathfrak{M} = \lambda_1, \lambda_2, \dots$, то U -ансамбль возникает путем объединения первой группы. Таким образом, находим

$$U = \sum_n (U_0 \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}.$$

Далее, каждый оператор $P_{[\varphi_n]}$ перестановочен с R ¹⁷⁹⁾, а потому R должен коммутировать и с U . То есть если U перестановочно не с любым из операторов R , получающихся указанным способом, то некоторые измерительные процедуры (а именно те, которые основываются на соответствующих \mathfrak{M}) исключаются при подготовлении U из U_0 . Тогда мы знаем об U больше, чем то, что он возник посредством \mathfrak{E} -измерения. Но поскольку U как раз должен представлять это состояние наших знаний, то мы попытаемся придерживаться следующего условия: если имеются такие U , для которых не приходится исключать ни одного измерительного процесса из величины \mathfrak{E} , то мы окажем им предпочтение. Посмотрим поэтому, существуют ли такие U и что они собой представляют!

Как мы видели, U должен был коммутировать со всеми R , получающимися указанным способом. Отсюда следует, что $RU\varphi_n = UR\varphi_n = U(\lambda_n\varphi_n) = \lambda_n U\varphi_n$, т. е. $U\varphi_n$ является собственной функцией оператора R с собственным значением λ_n , в силу чего $U\varphi_n = a_n\varphi_n$. В частности, $U\varphi_1 = a_1\varphi_1$. Пусть задан произвольный элемент φ из \mathfrak{M} , для которого $\|\varphi\| = 1$, тогда можно так выбрать систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_1, \varphi_2, \dots$, чтобы было $\varphi_1 = \varphi$, а потому любое такое φ является собственной функцией U . Все такие φ должны тем самым принадлежать одному и тому же собственному значению. Действительно, если бы φ и ψ принадлежали различным собственным значениям, то они должны были бы быть ортогональны. Но тогда $\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}$ также была бы собственной функцией, причем, в силу соотношений

$$\left(\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}, \varphi \right) = \frac{(\varphi, \varphi)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$\left(\frac{\varphi + \psi}{\sqrt{2}}, \psi \right) = \frac{(\psi, \psi)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

не ортогональной ни к φ , ни к ψ , а потому должна была бы при-

¹⁷⁹⁾ Например, благодаря

$$RP_{[\varphi_n]} f = R((f, \varphi_n) \cdot \varphi_n) = (f, \varphi_n) \cdot R\varphi_n = \lambda_n (f, \varphi_n) \cdot \varphi_n$$

будем иметь

$$P_{[\varphi_n]} Rf = (Rf, \varphi_n) \cdot \varphi_n = (f, R\varphi_n) \cdot \varphi_n = \lambda_n (f, \varphi_n) \cdot \varphi_n.$$

надлежать тому же собственному значению, которому принадлежат φ и ψ , что невозможно, поскольку последние должны были относиться к различным. Следовательно, $U\varphi = a\varphi$ с одним и тем же a . Условие $\|\varphi\| = 1$ можно, очевидно, опустить, так что для любых f из \mathfrak{M} будет иметь место соотношение $Uf = af$. Таким образом, всегда $UEg = aEg$, т. е. $UE = aE$, но поскольку $U = UE$, то $U = aE$. Далее, U, E оба дефинитны и $\neq 0$. Поэтому $a > 0$ и, следовательно, можно положить $U = E$, не изменяя его существенным образом.

Но этот оператор U действительно решает поставленную задачу для любого R , т. е. для любой системы $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$, если только U_0 выбрано надлежащим образом. Именно, для $U_0 = 1$ будет

$$\sum_n (U_0\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]} = \sum_n (\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]} = \sum_n P_{[\varphi_n]} = P_{\mathfrak{M}} = E = U.$$

Тем самым устанавливается, что $U = E$ в смысле набросанной выше программы. Можно определить и оператор U_0 , если допустить, что он универсален, т. е. не зависит ни от E , ни от R . Желаемое дается тогда оператором $U_0 = 1$, и только им. Именно, мы имеем

$$(U\varphi_m, \varphi_m) = (E\varphi_m, \varphi_m) = (\varphi_m, \varphi_m) = 1,$$

$$(U\varphi_m, \varphi_m) = \sum_n (U_0\varphi_n, \varphi_n) (P_{[\varphi_n]}\varphi_m, \varphi_m) = \\ = \sum_n (U_0\varphi_n, \varphi_n) |(\varphi_n, \varphi_m)|^2 = (U_0\varphi_m, \varphi_m),$$

и следовательно, $(U_0\varphi_m, \varphi_m) = 1$. Поскольку любой φ из \mathfrak{M} с $\|\varphi\| = 1$ можно выбрать за φ_1 , то должно быть $(U_0\varphi, \varphi) = 1$, а отсюда следует, что для всех f из \mathfrak{M} будет иметь место равенство $(U_0f, f) = (f, f)$. Но ведь \mathfrak{M} произвольно, а потому это соотношение должно выполняться вообще для всех f . Тем самым показано, что $U_0 = 1$.

Пусть даны не обязательно одновременно устанавливаемые, альтернативные свойства $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$. Согласно изложенному выше, вероятность того, что система S , относительно которой только что установлено, что она обладает свойством \mathfrak{E} , при непосредственно следующем измерении будет обладать и свойством \mathfrak{F} , дается выражением $\text{Spur}(EF) = \sum (EF) (E, F)$ (E, F являются операторами величин $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$; первая формула справедлива, так как $U = E$, а вторая в силу $E^2 = E, F^2 = F$, согласно II. 11). Впрочем, эти вероятности относительные, причем \mathfrak{E} нужно считать фиксированным, а \mathfrak{F} переменным; в том случае, когда число $\text{Spur}(E) = \sum (E) =$ числу измерений \mathfrak{M} оказывается конечным, их можно нормировать, деля на это число.

Вместо свойств $\mathfrak{E}, \mathfrak{F}$ мы можем рассматривать также физические величины. Пусть $\mathfrak{N}_1, \dots, \mathfrak{N}_j$ — одновременно измеримые величины и,

кроме того, пусть $\mathfrak{S}_1, \dots, \mathfrak{S}_l$ — также одновременно измеримые величины. Их операторами пусть будут R_1, \dots, R_l и S_1, \dots, S_l , а разложения единицы для этих операторов обозначим через $E_1(\lambda), \dots, E_l(\lambda)$ и $F_1(\lambda), \dots, F_l(\lambda)$. Пусть, далее, $I_1 : \lambda'_1 < \lambda \leq \lambda''_1, \dots, I_j : \lambda'_j < \lambda \leq \lambda''_j$, и $J_1 : \mu'_1 < \lambda \leq \mu''_1, \dots, J_l : \mu'_l < \lambda \leq \mu''_l$ — интервалы и $E_1(I_1) = E_1(\lambda''_1) - E_1(\lambda'_1), \dots, E_j(I_j) = E_j(\lambda''_j) - E_j(\lambda'_j), F_1(J_1) = F_1(\mu''_1) - F_1(\mu'_1), \dots, F_l(J_l) = F_l(\mu''_l) - F_l(\mu'_l)$. Вопрос состоит в следующем: пусть $\mathfrak{R}_1, \dots, \mathfrak{R}_j$ измерены в \mathcal{S} и пусть их значения попали в интервалы I_1, \dots, I_j соответственно; сколь вероятно, что величины $\mathfrak{S}_1, \dots, \mathfrak{S}_l$ при измерении, непосредственно следующем вслед за первым, попадут в интервалы J_1, \dots, J_l соответственно? Очевидно, что надо положить: $E = E_1(I_1) \dots E_j(I_j), F = F_1(J_1) \dots F_l(J_l)$ (ср. § 5), и тогда искомой вероятностью будет

$$\text{Spr}(E_1(I_1) \dots E_j(I_j) \cdot F_1(J_1) \dots F_l(J_l)) =$$

$$= \sum (E_1(I_1) \dots E_j(I_j) \cdot F_1(J_1) \dots F_l(J_l)).$$

В заключение надо еще раз вернуться к смыслу общего исходного ансамбля $U_0 = 1$. Мы получаем из него ансамбль U , разделяя его на две части при \mathfrak{R} -измерении. Если бы мы не выполнили этого разделения, т. е. провели бы \mathfrak{R} -измерение на всех его элементах, а затем снова объединили их всех в одном ансамбле, то мы снова получили бы $U_0 = 1$. В этом можно легко убедиться или прямым вычислением, или выбирая $E = 1$; тогда собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ и собственные функции $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ выпадают, а собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ и собственные функции $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ образуют полную систему. Итак, хотя при некоторых обстоятельствах \mathfrak{R} -измерение и изменяет индивидуальные элементы, все эти изменения должны в точности компенсироваться, поскольку ансамбль в целом не изменяется. Впрочем, это свойство характерно для $U_0 = 1$. Действительно, если для всех полных ортонормированных систем $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ имеет место соотношение

$$U_0 = \sum_{n=1}^{\infty} (U_0 \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]},$$

то U_0 перестановочно с $P_{[\varphi_1]}$, а так как это может быть любой $P_{[\varphi_n]}$, то это значит, что U_0 коммутирует с любым $P_{[\varphi]}$, $\|\varphi\| = 1$. Таким образом, имеем

$$U_0 \varphi = U_0 P_{[\varphi]} \varphi = P_{[\varphi]} U_0 \varphi = (U_0 \varphi, \varphi) \cdot \varphi,$$

т. е. φ является собственной функцией U_0 . Равенство $U_0 = 1$ следует отсюда в точности таким же образом, как выше из соответ-

ствующих соотношений (с \mathfrak{M} и E вместо \mathfrak{J} и I) получилось, что $U = E$.

В ансамбле $U_0 = 1$, таким образом, все возможные состояния находятся в наиболее равновесном из всех возможных состояний равновесия, и никакое измерение не может его изменить. Для любой полной ортонормированной системы $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ имеет место равенство

$$U_0 = 1 = \sum_{n=1}^{\infty} P_{[\varphi_n]},$$

иными словами, смесь $1 : 1 : \dots$ всех состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Отсюда мы заключаем, что $U_0 = 1$ соответствует обычному в старой квантовой теории термодинамическому допущению об «априорной равновероятности всех простых квантовых орбит». Такой ансамбль будет играть важную роль и в наших термодинамических рассмотрениях, которым посвящены следующие ниже параграфы.

ГЛАВА V

ОБЩЕЕ РАССМОТРЕНИЕ

1. Измерение и обратимость

Что происходит со смесью со статистическим оператором U , если в ней измеряется какая-нибудь величина \mathfrak{M} с оператором R ? (Под измерением в ансамбле мы понимаем здесь измерение величины \mathfrak{M} на каждом элементе ансамбля с последующим объединением полученных в результате этого измерения отдельных систем снова в один ансамбль.) На поставленный вопрос можно ответить в той мере, в какой этот вопрос вообще допускает однозначный ответ.

Во-первых, рассмотрим случай, когда R имеет чисто дискретный и невырожденный спектр. Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — полная ортонормированная система собственных функций, а $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ — соответствующие им собственные значения (по предположению все отличные друг от друга). После измерения возникнет следующее положение вещей: В доле $(U\varphi_n, \varphi_n)$ исходного ансамбля величина \mathfrak{M} будет иметь значение λ_n ($n = 1, 2, \dots$). Эта доля образует тогда ансамбль, в котором \mathfrak{M} имеет значение λ_n с достоверностью (М. в IV.3). Этот ансамбль находится в состоянии φ_n с (правильно нормированным) статистическим оператором $P_{[\varphi_n]}$. Собирая эти подансамбли, мы получим, таким образом, смесь со статистическим оператором

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}.$$

Пусть теперь R обладает чисто дискретным спектром, а $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ имеют прежний смысл, за исключением лишь невырожденности, т. е. среди λ_n могут быть равные друг другу собственные значения. Тогда процесс измерения не определен однозначно (как уже было, например, в случае \mathfrak{E} в IV.3). Действительно, пусть μ_1, μ_2, \dots — различные вещественные числа, а S — оператор, соответствующий $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и μ_1, μ_2, \dots . Пусть этому оператору отвечает величина \mathfrak{S} . Определим функцию $F(x)$:

$$F(\lambda_n) = \mu_n \quad (n = 1, 2, \dots),$$

тогда $F(S) = R$ и, значит, $F(\mathfrak{S}) = \mathfrak{R}$. Таким образом, измерение \mathfrak{S} можно рассматривать как измерение \mathfrak{R} . Это превращает оператор U в оператор U' , определенный выше, причем U' не зависит от (совершенно произвольных) μ_1, μ_2, \dots , но зависит от $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, хотя эти собственные функции, в силу кратности собственных значений R , не определяются единственным образом. В IV.2 мы установили, основываясь на II.8, что можно сказать относительно $\varphi_1, \varphi_2, \dots$: пусть $\lambda', \lambda'', \dots$ — различные собственные значения среди $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, пусть $\mathfrak{M}_{\lambda'}, \mathfrak{M}_{\lambda''}, \dots$ — множества f , удовлетворяющих уравнениям $Rf = \lambda'f$, $Rf = \lambda''f, \dots$. Пусть еще $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi''_1, \chi''_2, \dots, \dots$ — произвольные ортонормированные системы, растягивающие $\mathfrak{M}_{\lambda'}, \mathfrak{M}_{\lambda''}, \dots$ соответственно. Совокупность всех $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi''_1, \chi''_2, \dots, \dots$ образует тогда самую общую систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Таким образом, U' может в зависимости от выбора \mathfrak{S} , т. е., собственно, в зависимости от выбора измерительной процедуры, иметь вид любого выражения типа

$$U' = \sum_n (U\chi'_n, \chi'_n) P_{[\chi'_n]} + \sum_n (U\chi''_n, \chi''_n) P_{[\chi''_n]} + \dots$$

А это выражение однозначно лишь в особых случаях.

Укажем теперь такой особый случай. Каждое отдельное слагаемое должно в этом случае быть однозначным. То есть для каждого собственного значения λ , если \mathfrak{M}_λ означает множество f , удовлетворяющих уравнению $Rf = \lambda f$, сумма $\sum_n (U\chi_n, \chi_n) P_{[\chi_n]}$ должна иметь одно и то же значение при любом выборе ортонормированной системы χ_1, χ_2, \dots , на которую натягивается \mathfrak{M}_λ . Назовем эту сумму V , тогда дословное повторение рассуждения из IV.3 (там только U_0, U, \mathfrak{M} надо заменить на $U, V, \mathfrak{M}_\lambda$) показывает, что должно быть $V = c_\lambda P_{\mathfrak{M}_\lambda}$ (c_λ — константа, > 0), а это требование эквивалентно справедливости равенства $(Uf, f) = c_\lambda(f, f)$ для любого f из \mathfrak{M}_λ . Поскольку эти f совпадают со всеми $P_{\mathfrak{M}_\lambda}g$ для любых g , то мы требуем

$$(UP_{\mathfrak{M}_\lambda}g, P_{\mathfrak{M}_\lambda}g) = c_\lambda (P_{\mathfrak{M}_\lambda}g, P_{\mathfrak{M}_\lambda}g),$$

т. е.

$$(P_{\mathfrak{M}_\lambda}UP_{\mathfrak{M}_\lambda}g, g) = c_\lambda (P_{\mathfrak{M}_\lambda}g, g),$$

т. е.

$$P_{\mathfrak{M}_\lambda}UP_{\mathfrak{M}_\lambda} = c_\lambda P_{\mathfrak{M}_\lambda}$$

для любых собственных значений λ оператора R . Если же это условие, которое, очевидно, сильно ограничивает U , не выполняется, то различные процедуры измерения действительно могут преобразовать U в различные U' . (Тем не менее, исходя из термодинамических принципов, в V.4 мы сможем в общем случае сказать еще кое-что относительно результата \mathfrak{R} -измерения.)

В-третьих, пусть R вообще не имеет чисто дискретного спектра. Тогда, в соответствии с III.3 (или IV.3, критерий I.), соответствующая величина не может быть измерена с абсолютной точностью, а \mathfrak{R} -измерения с ограниченной точностью, как указывалось по этому поводу выше, равнозначны измерениям некоторых величин с чисто дискретным спектром.

Другой тип воздействий на материальную систему, — в противоположность разрывным, непричинным и мгновенно действующим экспериментам или измерениям, — представляет нам временное дифференциальное уравнение Шредингера. Это уравнение описывает непрерывное и причинное изменение системы с течением времени, если только известна ее полная энергия. Для состояний φ это уравнение имеет вид

$$(Z_1.) \quad \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t = -\frac{2\pi i}{\hbar} H \varphi_t,$$

где H — оператор энергии.

Для статистического оператора состояния φ_t , $U_t = P_{[\varphi_t]}$ это уравнение дает нам

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} U_t \right) f &= \frac{\partial}{\partial t} (U_t f) = \frac{\partial}{\partial t} ((f, \varphi_t) \cdot \varphi_t) = \\ &= \left(f, \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t \right) \cdot \varphi_t + (f, \varphi_t) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t = \\ &= - \left(f, \frac{2\pi i}{\hbar} H \varphi_t \right) \cdot \varphi_t - (f, \varphi_t) \cdot \frac{2\pi i}{\hbar} H \varphi_t = \\ &= \frac{2\pi i}{\hbar} ((Hf, \varphi_t) \cdot \varphi_t - (f, \varphi_t) \cdot H \varphi_t) = \frac{2\pi i}{\hbar} (U_t H - H U_t) f. \end{aligned}$$

$$(Z_2.) \quad \frac{\partial}{\partial t} U_t = \frac{2\pi i}{\hbar} (U_t H - H U_t).$$

Если же U_t — не состояние, но смесь многих состояний, скажем $P_{[\varphi_t^{(1)}]}, P_{[\varphi_t^{(2)}]}, \dots$ с соответствующими весами w_1, w_2, \dots , то он должен изменяться так, как это следует из изменений отдельных $P_{[\varphi_t^{(1)}]}, P_{[\varphi_t^{(2)}]}, \dots$. Складывая соответствующие уравнения $Z_2.$, приходим к выводу, что $Z_2.$ имеет место также и для этого U_t . Но ведь все U являются или смесями такого типа, или же их предельными случаями (например, любое U с конечным $\text{Spur } U$ является такой смесью), поэтому можно объявить $Z_2.$ справедливым всегда.

В $Z_2.$, как и в дифференциальном уравнении Шредингера $Z_1.$, H может, кроме того, зависеть от t . Если же это не так, то можно дать явные решения, а именно для $Z_1.$, как мы уже знаем,

$$(Z'_1.) \quad \varphi_t = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H} \varphi_0.$$

а для Z_2 .

$$(Z_2') \quad U_t = e^{-\frac{2\pi i}{h} t \cdot H} U_0 e^{\frac{2\pi i}{h} t \cdot H}.$$

(Легко проверить, что эти выражения являются решениями, а также что они следуют одно из другого. Ясно также, что имеется лишь одно решение при заданных начальных значениях φ_0 или соответственно U_0 : дифференциальные уравнения Z_1 , Z_2 являются ведь уравнениями первого порядка по t .)

Итак, мы пришли к двум фундаментально различным типам воздействий, которые могут быть оказаны на систему S или ансамбль $[S_1, \dots, S_N]$. Во-первых, это — произвольные изменения, вызываемые измерениями, которые передаются формулой

$$(1.) \quad U \rightarrow U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) \cdot P_{[\varphi_n]}$$

($\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — полная ортонормированная система, ср. выше). Во-вторых, — автоматические изменения, вызываемые течением времени, которые передаются формулой

$$(2.) \quad U \rightarrow U_t = e^{-\frac{2\pi i}{h} t \cdot H} U e^{\frac{2\pi i}{h} t \cdot H}$$

(H — оператор энергии, t — время; H не зависит от t). Если H зависит от t , то надо разбить рассматриваемый интервал времени на малые интервалы, в каждом из которых H не изменяется — или же изменяется лишь очень слабо, — и применить 2. к этим отдельным интервалам. Суперпозиция приведет тогда к окончательному результату.

Нам следует теперь более детально разобраться в этих двух типах воздействий, в их природе и в их отношении друг к другу.

Прежде всего поразительно, что 2. допускает (в указанном выше смысле) возможность зависимости H от времени, так что, собственно, надо было бы ожидать, что уже 2. будет достаточно, чтобы описать воздействие, вызываемое измерением: ведь физическое воздействие не может быть ничем, кроме как производящимся время от времени включением в наблюдаемую систему известных энергетических связей, т. е. введением надлежащей (предписанной наблюдателем) временной зависимости H . Почему же в таком случае нам нужен для измерения особый процесс 1.? Причина состоит в следующем: при измерении мы не можем рассматривать систему S саму по себе, напротив, для того, чтобы проследить аналитически ее взаимодействие с измерительным аппаратом M , надо рассматривать систему $S+M$. Теория измерения является утверждением относительно $S+M$, она должна описывать, каким образом состояние S связано с известными свойствами состояний M (а именно с положениями известных стрелок, так как наблюдатель отсчитывает по ним). Кроме того, кажется в некоторой мере произвольным, не надо ли включить в M и самого наблюдателя

и не поставить ли на место зависимостей между состояниями S и положениями стрелок M зависимости между состояниями S и химическими изменениями в его глазу или даже в его мозгу (т. е. тем, что он «увидел» или «воспринял»). В VI.1 мы исследуем этот вопрос подробнее. Так или иначе, речь может пойти, следовательно, лишь о применении 2. к системе $S+M$. Правда, надо будет еще показать, что это дает для S то же самое, что и непосредственное применение 1. к S . Только лишь после того, как это удастся, мы достигнем единого способа описания физического мира на квантовомеханической основе. Мы отложим обсуждение этого вопроса до VI.3.

Во-вторых, отметим в связи с 1., что, как мы неоднократно указывали, измерение, в смысле 1., должно быть мгновенным, т. е. должно проводиться в столь короткий промежуток времени, чтобы изменение U , обусловленное 2., не было бы еще заметно. (Если бы мы захотели поправить результат, вычисляя измененный U_t с помощью 2., то все равно бы ничего не вышло, — ведь чтобы приблизиться к какому-либо U_t , надо знать t , момент измерения, точно, т. е. длительность измерения все равно должна была бы быть короткой.) Однако такое требование сомнительно в самом принципе. Ведь хорошо известно, что существует величина, которая в классической механике канонически сопряжена времени: энергия¹⁸⁰⁾. Поэтому можно ожидать, что для канонически сопряженной пары время — энергия должны существовать соотношения неопределенности, аналогичные соотношениям неопределенности для пары декартова координата — импульс¹⁸¹⁾. Специальная теория относительности также показывает, что должна существовать далеко идущая аналогия: три пространственные координаты и время образуют 4-вектор точно таким же образом, как и три пространственных импульса и энергия. Подобное соотношение неопределенности означало бы, что невозможно очень точно измерить энергию за очень короткий промежуток времени. Действительно, можно ожидать, что между ошибкой измерения ϵ и промежутком времени τ существует соотношение вида

$$\epsilon\tau \sim \hbar.$$

Физическое рассмотрение, аналогичное проведенному в III.4 для p , q , действительно приводит к этому результату¹⁸¹⁾. Не входя в детали, мы рассмотрим случай светового кванта. Неопределенность в его энергии ΔE равна, в силу условия частот Бора, \hbar -кратной неопределенности в частоте: $\hbar\Delta\nu$. Но $\Delta\nu$, как показано в прим.¹⁸⁷⁾ на стр. 182,

¹⁸⁰⁾ Это соотношение можно найти в любом учебнике классической (гамильтоновой) механики.

¹⁸¹⁾ Соотношения неопределенности для пары времени — энергия неоднократно обсуждались. Ср. изложение результатов у Heisenberg'a в Die Physikalischen Prinzipien der Quantentheorie, § II. 2. d., Leipzig, 1930. (Русский перевод: Гейзенберг, Физические принципы квантовой теории, ГТТИ, М., 1932.)

в лучшем случае равно обратной величине временной длительности $1/\tau$, так что $\epsilon \geq \frac{h}{\tau}$, а для того, чтобы монохроматичность светового кванта могла себя проявить во всем интервале τ , измерение должно простираться на весь этот интервал. Случай светового кванта характерен, так как атомные уровни энергии определяются, как правило, из частот соответствующих спектральных линий. Поскольку энергия ведет себя таким образом, можно предположить существование зависимости между точностью и длительностью измерения и для других величин \mathcal{H} . Как же после этого можно было бы оправдать наше допущение о моментальном измерении?

Прежде всего следует согласиться, что это возражение направлено против существенного недостатка, в сущности главного недостатка, квантовой механики: против ее нерелятивистского характера, выделяющего время t по сравнению с тремя пространственными координатами x, y, z и принимающего представление об объективной одновременности. Действительно, в то время как все остальные величины (в частности, координаты x, y, z , тесно связанные с t преобразованием Лоренца) изображаются операторами времени, как и в классической механике, сопоставляется обычный численный параметр t . Или же: система, состоящая из двух частиц, обладает волновой функцией, которая зависит от $2 \times 3 = 6$ пространственных координат, и только лишь от одного времени t , хотя в силу преобразования Лоренца, желательно было бы иметь два времени. С этим нерелятивистским характером квантовой механики могло было бы быть связано и то обстоятельство, что мы можем игнорировать естественный закон минимальной длительности измерения. Это — разъяснение, но отнюдь не радостное!

Более точное исследование этого вопроса показывает между тем, что ситуация все же не так плоха. Действительно, что нам на самом деле нужно, это совсем не малое время t , но лишь малый его эффект при вычислении вероятности $(U_{\varphi_n}, \varphi_n)$ — и, значит, при образовании суммы $U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U_{\varphi_n}, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$ — независимо от того, исходили мы из самого оператора U или же из $U_t = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H} U e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H}$. В силу соотношения

$$(U_{t\varphi_n}, \varphi_n) = \left(e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H} U e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H} \varphi_n, \varphi_n \right) = \left(U e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H} \varphi_n, e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H} \varphi_n \right),$$

этот результат может быть достигнут с помощью такого изменения H возмущающей энергией, при котором $e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H} \varphi_n$ отличалось бы от φ_n лишь на постоянный множитель модуля 1. Это значит, что состояние φ_n должно оставаться под влиянием 2. в своей существенной

части постоянным, т. е. должно быть стационарным состоянием; или же $H\phi_n$ должно равняться некоторой вещественной константе, умноженной на ϕ_n , т. е. ϕ_n должно быть собственной функцией H . На первый взгляд такое изменение оператора энергии H , при котором собственные функции оператора R стационарны и, следовательно, являются также собственными функциями H (т. е. R, H перестановочные), не кажется правдоподобным. Но на самом деле это не так, можно даже убедиться, что типичное измерительное приспособление предполагает как раз изменение такого сорта в H .

Действительно, любое измерение заканчивается тем, что световой квант или частица, обладающая массой, испускаются с известной энергией и в известном направлении и посредством своих характеристик, т. е. своих импульсов, выражают результат измерения; или же тем, что частица с массой (например, стрелка на шкале) приходит в состояние покоя и ее декартовы координаты дают результат измерения. Итак, для светового кванта заданию измеряемой величины эквивалентно, пользуясь терминологией III. 6, задание того M_n , для которого $M_n = 1$ (все остальные = 0), т. е. задание значений всех M_1, M_2, \dots ; для вылетающей частицы с массой — задание трех компонент импульса P^x, P^y, P^z , а в случае покоящейся частицы с массой — задание трех ее декартовых координат x, y, z , или же, пользуясь их операторами, Q^x, Q^y, Q^z . Но измерение будет действительно проведено лишь тогда, когда световой квант или частица с массой действительно улетят «прочь», т. е. когда световой квант не подвергается больше риску быть поглощенным или когда частица с массой не может уже больше отклоняться потенциальными энергиями; или же когда покоящаяся частица с массой действительно поконится, для чего необходима большая масса¹⁸²⁾. (Последнее необходимо уже в силу соотношений неопределенности, поскольку скорость должна быть близка к 0, поэтому ее дисперсия мала, хотя ее произведение на массу, — импульс должен, из-за малой дисперсии координат, обладать большой дисперсией. В действительности стрелки являются макроскопическими объектами, т. е. они огромны.) Далее, оператор энергии H , поскольку он имеет отношение к световому кванту, имеет, согласно III. 6, вид

$$\sum_{n=1}^{\infty} h\rho \cdot M_n + \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} w_{kj}^n \left(\sqrt{M_n + 1} \cdot \binom{k \rightarrow j}{M_n \rightarrow M_n + 1} + \sqrt{M_n} \cdot \binom{k \rightarrow j}{M_n \rightarrow M_n - 1} \right);$$

¹⁸²⁾ Все остальные подробности измерительного приспособления относятся лишь к связи величины Ψ , которая собственно и представляет интерес, или ее оператора R с указанным выше M_n или P^x, P^y, P^z , или Q^x, Q^y, Q^z . Конечно, практически именно это является наиболее важной стороной измерительной техники.

в случае же обоих примеров частиц с массой — это

$$\frac{(P^x)^2 + (P^y)^2 + (P^z)^2}{2m} + V(Q^x, Q^y, Q^z)$$

(m — масса, V — потенциальная энергия). Наши критерии будут гласить, что ω_{kj}^n должны обращаться в нуль или же что V должно быть постоянно, или же что m должно быть очень велико. Но это как раз и приводит к тому, что M_n или P^x, P^y, P^z или Q^x, Q^y, Q^z начинают коммутировать с указанными H .

В заключение следует подчеркнуть, что «делание стационарными» собственно интересующих нас состояний (здесь это $\varphi_1, \varphi_2, \dots$) играет роль также и в других отделах теоретической физики. Предположение о возможности прерывания химических реакций (их «отравления»), которое часто необходимо в физико-химических «мысленных экспериментах», имеет именно такую природу¹⁸³⁾.

Два воздействия **1.** и **2.** отличаются друг от друга фундаментальным образом. То, что оба они по форме однозначны, т. е. причины, не существенно: действительно, так как мы рассматриваем статистические свойства смесей, то не удивительно, что любое изменение, даже если оно статистическое, приводит к причинному изменению вероятностей и математических ожиданий. Ведь именно по этой причине и вводят статистические ансамбли и вероятности! Очень существенно, напротив, то, что **2.** не приводит к увеличению существующей в U статистической неопределенности, тогда как **1.** приводит к такому увеличению: **2.** переводит состояния в состояния

$$\left(\frac{P_{[\varphi]}}{[e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H_\varphi}]} \right).$$

а **1.** вполне может перевести состояние в смесь. В этом смысле можно сказать, что эволюция состояния согласно **1.** является статистической, а согласно **2.** — причинной.

Далее, при фиксированных H и t , **2.** является просто унитарным преобразованием всех U : $U_t = AUA^{-1}$, $A = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t \cdot H}$ унитарно, т. е. из $Uf = g$ следует, что $U_t(Af) = Ag$, так что U_t получается из U с помощью унитарного преобразования A гильбертова пространства и тем самым с помощью некоторого изоморфизма, который оставляет инвариантными все наши основные геометрические представления (ср. принципы, разъясненные в I.4). Поэтому **2.** обратимо: достаточно заменить A на A^{-1} , а это возможно в силу того, что A и A^{-1} можно считать совершенно произвольными унитарными операторами

¹⁸³⁾ Ср., например, Neginst, Theoretische Chemie, Stuttgart (многочисленные издания, начиная с 1893), книга IV, Обсуждение термодинамических доказательств «закона действующих масс».

благодаря далеко идущей свободе в выборе H и t . Точно так же как и классическая механика, 2. не воспроизводит поэому одн из наименее важных и удивительных черт реального мира, а именно его необратимость, фундаментальное различие между направлениями времени в «будущее» и в «прошлое».

Фундаментальным образом по-иному ведет себя 1.: переход

$$U \rightarrow U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$$

не является безусловно обратимым. Вскоре мы увидим, что он вообще необратим: в том смысле, что вообще невозможно возвратиться от данного U' к его U с помощью повторного применения какого-нибудь из процессов 1. или 2.!

Здесь мы достигли такого положения, когда целесообразно привлечь термодинамические методы рассмотрения, так как лишь они позволяют нам правильно понять различие между 1. и 2., в котором замешаны вопросы об обратимости.

2. Термодинамические вопросы

Мы будем исследовать термодинамику квантовомеханических ансамблей с двух различных точек зрения. Сперва мы предположим справедливость обоих основных начал термодинамики, т. е. невозможность *regretum mobile* первого и второго рода (законы энергии и энтропии)¹⁸⁴⁾, и вычислим, исходя отсюда, энтропию каждого ансамбля. При этом будут применяться обычные средства феноменологической термодинамики, а роль квантовой механики ограничится лишь тем, что наше термодинамическое рассмотрение будет относиться к таким объектам, поведение которых определяется законами квантовой механики (нашим ансамблям, равно как и их статистическим операторам U), — правильность же обоих основных начал предполагается и не доказывается. Затем мы перейдем к доказательству выполнения основных начал в квантовой механике, причем выяснится, что закон энергии выполняется без каких-либо оговорок, а закон энтропии — лишь в рамках задачи. Именно, мы покажем, что воздействия 1., 2. никогда не уменьшают энтропию, вычисленную по первому способу. Такая последовательность, казалось бы, несколько неестественна, но обусловлена тем, что только в ходе феноменологического обсуждения нам удается достигнуть того понимания

¹⁸⁴⁾ Построенную на такой основе феноменологическую систему термодинамики читатель сможет найти в бесчисленных учебниках, например в книге: M. Planck, Vorlesungen über Thermodynamik, Berlin, 1930. Для дальнейшего особенно существенно статистическое понимание обоих начал, как оно разъясняется, например, в работах: Einstein, Verh. d. deutsch. phys. Gesel. 12 (1914); L. Szilárd, Zs. f. Phys. 32 (1925).

всей проблемы, которое потребно для рассуждений второй половины задачи.

Итак, мы начинаем с феноменологического рассмотрения, которое, между прочим, позволит нам также разрешить один известный парадокс классической термодинамики. Здесь сразу следовало бы подчеркнуть, что «авантюристический» характер наших мысленных экспериментов, т. е. невозможность провести их практически, не причинит какого-либо ущерба их доказательной силе: по смыслу феноменологической термодинамики всякий мысленный процесс имеет доказательную силу, если только не нарушает основных начал.

Нашей целью будет определить энтропию некоторого ансамбля $[S_1, \dots, S_N]$ со статистическим оператором U , который предполагается правильно нормированным, т. е. так, что $\text{Spur } U = 1$. Пользуясь принятым в классической статистической механике способом выражения, мы имеем здесь дело с ансамблем Гиббса — это значит, что статистика и термодинамика относятся не к (взаимодействующим) составным частям единой, очень сложной, механической системы со многими (и только недостаточно известными) степенями свободы¹⁸⁵⁾, но к набору очень большого числа механических систем, каждая из которых уже одна, сама по себе, может (но не обязана) обладать необозримо большим числом степеней свободы, и которые следует мыслить не взаимодействующими и совершенно разделенными друг от друга¹⁸⁶⁾. В силу полной разделенности систем S_1, \dots, S_N и благодаря тому обстоятельству, что мы хотим применить к ним основанные собственно просто на счете методы исчисления вероятностей, не возникает сомнения, что следует использовать обычные методы теории вероятностей и что отступающие от них способы счета Бозе — Эйнштейна и Ферми — Дирака, уместные для известных ансамблей неразличимых и взаимодействующих индивидов (именно, для световых квантов и соответственно для электронов и протонов, ср. III. 6, особенно прим. ¹⁴⁷⁾ на стр. 206), не относятся здесь к делу.

Введенный Эйнштейном метод термодинамического рассмотрения таких ансамблей $[S_1, \dots, S_N]$ состоит в следующем¹⁸⁷⁾: Каждая из систем S_1, \dots, S_N заключается в свой ящик K_1, \dots, K_N , стенки

¹⁸⁵⁾ Такой подход составил бы максвелл-больцманов метод в статистической механике (ср. обзор в статье Р. und Т. Ehrenfest в *Ephykl. d. Math. Wiss.*, Bd. II. 4. D., Leipzig, 1907). В теории газов, например, «очень сложной» системой является газ, состоящий из многих (взаимодействующих) молекул, и эти молекулы подвергаются статистическому исследованию.

¹⁸⁶⁾ Это составляет метод Гиббса (ср. ¹⁸⁵⁾). Здесь отдельной системой будет весь газ, и мы будем следить за судьбами многих экземпляров одной и той же системы (т. е. одного и того же газа) и определять статистические их свойства.

¹⁸⁷⁾ Ср. выше, прим. ¹⁸⁴⁾ на стр. 266. Этот метод развивался далее Сцилардом, L. Szilárd, Zs. f. Phys. 32 (1925).

которого не проницаемы ни для каких переносов взаимодействий, — в силу невзаимодействия рассматриваемых систем это допустимо. Далее, каждый ящик должен обладать очень большой массой, чтобы возможные изменения состояний (а тем самым и энергий, следовательно и масс) систем S_1, \dots, S_N затрагивали бы их массы лишь в малой степени. Благодаря этому и их скорости окажутся в проводимом мысленном эксперименте столь малыми, что будет допустимо считать нерелятивистским способом. Эти ящики K_1, \dots, K_N мы в свою очередь поместим в очень большой ящик \bar{K} (последнее означает, что объем \bar{V} ящика \bar{K} должен быть много больше суммы объемов K_1, \dots, K_N); ради простоты в \bar{K} не должно быть силовых полей (в частности, следовательно, он должен помещаться далеко от всех гравитационных полей и быть столь большим, чтобы массы K_1, \dots, K_N не оказывали бы никакого действия). Поэтому можно рассматривать теперь K_1, \dots, K_N (содержащие S_1, \dots, S_N соответственно) как молекулы газа, запертого в большом ящике \bar{K} . Если мы теперь приведем \bar{K} в контакт с очень большим резервуаром тепла температуры T , то и стенки ящика \bar{K} тоже примут ту же температуру, и их (настоящие) молекулы придут в соответствующее броуновское движение. Но тогда они станут передавать импульсы ближайшим ящикам K_1, \dots, K_N , из-за чего последние придут в движение, передавая импульсы и остальным ящикам K_1, \dots, K_N . Вскоре все ящики K_1, \dots, K_N окажутся в движении, обмениваясь импульсами: у стенок \bar{K} — с молекулами стенок, а благодаря взаимным соударениям (внутри \bar{K}) — друг с другом. Состояние стационарного равновесия такого движения будет достигнуто лишь тогда, когда ящики K_1, \dots, K_N примут то распределение скоростей, которое будет в равновесии с броуновским движением молекул стенок (температуры T), т. е. максвелловское распределение скоростей для газа температуры T , в качестве «молекул» которого следует рассматривать ящики K_1, \dots, K_N ¹⁸⁸). Итак, мы можем сказать, что $[S_1, \dots, S_N]$ -газ принял температуру T . Ради краткости будем называть в дальнейшем ансамбль $[S_1, \dots, S_N]$ со статистическим оператором U U -ансамблем, а $[S_1, \dots, S_N]$ -газ — U -газом.

Причина, по которой мы решили заняться подобным газом, лежит в том, что разность энтропий U -ансамбля и V -ансамбля (U и V — дефинитные операторы со шпуром 1; соответствующие ансамбли — $[S_1, \dots, S_N]$ и $[S'_1, \dots, S'_N]$) находится по определению путем обра-

¹⁸⁸) Именно так описывает, как известно, кинетическая теория газов тот процесс, в котором стенки передают свою температуру заключенному в них газу. Ср. выше, прим. ¹⁸⁴), ¹⁸⁵).

тимого преобразования первого из них во второй¹⁸⁹⁾), а это удается проще всего выполнить обходным путем через U - или соответственно V -газ. Именно, мы утверждаем: разность энтропий U - и V -ансамблей в точности та же, что и разность энтропий U - и V -газов, если оба последние рассматриваются при одной и той же температуре T , которая в остальном может быть произвольной. Если T приближается к нулю, то это утверждение, очевидно, справедливо с любой степенью точности, ибо разница между U -ансамблем и U -газом исчезает при температуре 0, поскольку ящики K_1, \dots, K_N последнего не обладают тогда никаким собственным движением, а присутствие покоящихся ящиков K_1, \dots, K_N, \bar{K} термодинамически несущественно (аналогично для V). Таким образом, мы достигнем цели, если покажем, что для некоторого заданного изменения температуры T энтропия U -газа меняется на столько же, на сколько энтропия V -газа. Изменение энтропии некоторого одного газа, когда он нагревается от температуры T_1 до температуры T_2 , зависит только от его теплового уравнения, точнее, от его теплоемкостей¹⁹⁰⁾, — при этом, конечно, нельзя допустить идеальности газа, так как, как раз в нашем случае, T_1 должно быть выбрано вблизи нуля¹⁹¹⁾. Напротив, оба газа (U и V) гарантированно имеют одно и то же уравнение состояния и одинаковые теплоемкости, — с точки зрения кинетической теории газов ящики K_1, \dots, K_N доминируют подавляющим образом и совершенно маскируют заключенные в них системы S_1, \dots, S_N или S'_1, \dots, S'_N . Итак, при рассматриваемом процессе нагревания различие между U и V не оказывается и, как и утверждалось, обе разности энтропий совпадают. Поэтому в дальнейшем мы будем сравнивать друг с другом только U - и V -газы, и при этом выберем температуру T столь большой, что их можно было бы рассматривать как идеальные¹⁹²⁾.

¹⁸⁹⁾ Если при этом преобразовании используются количества тепла Q_1, \dots, Q_i при соответствующих температурах T_1, \dots, T_i , то разность энтропий составит $\frac{Q_1}{T_1} + \dots + \frac{Q_i}{T_i}$. Ср. выше, прим.¹⁸⁴⁾ на стр. 266.

¹⁹⁰⁾ Если $c(T)$ — теплоемкость нашего количества газа при температуре T , то в интервале $T, T+dT$ он принимает количество тепла $c(T) dT$.

Согласно¹⁸⁶⁾ разность энтропий составит тогда $\int_{T_1}^{T_2} \frac{c(T) dT}{T}$.

¹⁹¹⁾ Для идеального газа $c(T) = \text{const}$; для очень малых T это гарантированно нарушается. Ср., например, прим.⁶⁾ на стр. 13.

¹⁹²⁾ Для этого требуется также, чтобы объем ν ящика \bar{K} был велик сравнительно с суммарным объемом всех K_1, \dots, K_N и, далее, чтобы «приходящаяся на одну степень свободы» энергия kT (k — постоянная Больцмана) была бы велика сравнительно с $\frac{h^2}{\mu \nu^{3/2}}$; здесь h — постоянная Планка, а μ — масса отдельной молекулы; построенная величина имеет размерность энергии. Ср. E. Fermi, Zs. f. Phys. 36 (1926).

Тем самым их газокинетическое поведение станет полностью ясным, и мы сможем обратиться к собственно нашей задаче — обратимо перевести U -газ в V -газ. При этом нам придется, в отличие от уже рассмотренных процессов, затронуть и находящиеся внутри K_1, \dots, K_N системы S_1, \dots, S_N , т. е. придется «открыть» наши ящики K_1, \dots, K_N .

Покажем прежде всего, что все состояния $U = P_{[\varphi]}$ обладают одной и той же энтропией, т. е. что $P_{[\varphi]}$ -ансамбль удается обратимо перевести в $P_{[\psi]}$ -ансамбль без затраты или получения тепловой энергии (механическую энергию придется, естественно, затратить или выиграть, если только средние значения энергии в $P_{[\varphi]}$ и в $P_{[\psi]}$ различны), ср. прим.¹⁸⁵⁾ на стр. 267. Действительно, для этого нам вовсе не понадобится привлекать только что рассматривавшиеся газы — желательное переведение удается выполнить и при температуре 0, т. е. с самими ансамблями. Следует также подчеркнуть, что как только это будет доказано, то мы сможем (и действительно так сделаем) пронормировать энтропии U -ансамблей таким образом, что все состояния будут обладать энтропией 0.

Впрочем, намеченное выше преобразование $P_{[\varphi]}$ в $P_{[\psi]}$ не обязано даже быть обратимым, поскольку не будь оно таким, то разность энтропий должна была бы быть \geqslant выражения, приведенного выше, в прим. ¹⁸⁹⁾, следовательно $\geqslant 0$; если мы переменим теперь $P_{[\varphi]}$ и $P_{[\psi]}$, то точно так же получим, что оно должно быть $\leqslant 0$; поэтому оно равно 0.

Простейшим способом было бы привлечь сюда зависящее от времени дифференциальное уравнение Шредингера, т. е. наш процесс 2., для чего следовало бы найти некоторый оператор энергии H и чис-

ленное значение t такие, чтобы унитарный оператор $e^{-\frac{2\pi i}{n} t \cdot H}$ переводил бы φ в ψ . Тогда за t секунд $P_{[\varphi]}$ сам по себе перешел бы в $P_{[\psi]}$, процесс был бы даже обратимым и о тепле не было бы и речи (ср. V. 1). Мы предпочтем, однако, уклониться от каких-либо допущений о возможных формах оператора энергии H и будем применять только процесс 1., т. е. воздействия типа измерения. Самым простым, что можно было бы придумать, было бы тогда измерение в ансамбле $P_{[\varphi]}$ некоторой величины R , оператор которой R имел бы чисто дискретный спектр с одними лишь простыми собственными значениями $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, притом так, чтобы ψ встретилась бы среди его собственных функций ψ_1, ψ_2, \dots , например $\psi_1 = \psi$. Поскольку при таком измерении состояние φ преобразуется ведь в смесь ψ_1, ψ_2, \dots , то возникает и состояние ψ . Тем не менее это нецелесообразно, поскольку $\psi_1 = \psi$ возникает лишь с вероятностью $|(\varphi, \psi)|^2$, в то время как доля $1 - |(\varphi, \psi)|^2$ переходит в другие состояния, и для ортогональных φ и ψ эта доля даже составляет целое. Несмотря на это, сходный прием приведет нас к цели: путем последовательного выполнения большого

числа различных измерений мы переведем $P_{[\psi]}$ в такой ансамбль, который сколь угодно мало отличается от $P_{[\varphi]}$. То, что все эти операции необратимы (или по меньшей мере могут оказаться такими), будет, как мы уже замечали выше, несущественно.

Мы будем считать φ и ψ ортогональными, так как иначе мы могли бы выбрать ортогональное к обоим χ ($\|\chi\| = 1$) и перейти сперва от φ к χ , а затем от χ к ψ . Пусть $k = 1, 2, \dots$ будет числом, которым мы еще должны распорядиться, и положим

$$\psi^{(v)} = \cos \frac{\pi v}{2k} \cdot \varphi + \sin \frac{\pi v}{2k} \cdot \psi \quad (v = 0, 1, \dots, k).$$

Очевидно, что $\psi^{(0)} = \varphi$, $\psi^{(k)} = \psi$ и что всегда $\|\psi^{(v)}\| = 1$. Каждую из $\psi^{(v)}$ ($v = 1, \dots, k$) мы дополним до полной ортонормированной системы $\psi_1^{(v)}, \psi_2^{(v)}, \dots$ с $\psi_1^{(v)} = \psi^{(v)}$. Пусть $R^{(v)}$ будет оператором с чисто дискретным спектром и всеми различными собственными значениями, например $\lambda_1^{(v)}, \lambda_2^{(v)}, \dots$, для которого $\psi_1^{(v)}, \psi_2^{(v)}, \dots$ будут собственными функциями; соответствующей величиной пусть будет $\Re^{(v)}$. Заметим еще, что

$$\begin{aligned} (\psi^{(v-1)}, \psi^{(v)}) &= \\ &= \cos \frac{\pi(v-1)}{2k} \cos \frac{\pi v}{2k} + \sin \frac{\pi(v-1)}{2k} \sin \frac{\pi v}{2k} = \cos \left(\frac{\pi v}{2k} - \frac{\pi(v-1)}{2k} \right) = \\ &= \cos \frac{\pi}{2k}. \end{aligned}$$

Теперь мы измерим в ансамбле с $U^{(0)} = P_{[\psi^{(0)}]} = P_{[\varphi]}$ величину $\Re^{(1)}$, благодаря чему возникнет $U^{(1)}$, затем в $U^{(1)}$ — величину $\Re^{(2)}$, благодаря чему возникнет $U^{(2)}$, ..., наконец, в $U^{(k-1)}$ — величину $\Re^{(k)}$, благодаря чему возникнет $U^{(k)}$. Что для достаточно большого k $U^{(k)}$ будет сколь угодно близок к $P_{[\psi^{(k)}]} = P_{[\psi]}$, можно пояснить следующими наглядными соображениями. Когда мы измеряем $\Re^{(v)}$ в $\psi^{(v-1)}$, то в $\psi^{(v)}$ переходит доля $|(\psi^{(v-1)}, \psi^{(v)})|^2 = \left(\cos \frac{\pi}{2k}\right)^2$. Следовательно, при последовательных измерениях величин $\Re^{(1)}, \Re^{(2)}, \dots, \Re^{(k)}$ из $\psi^{(0)} = \varphi$ через посредство $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(k-1)}$ перейдет в $\psi = \psi^{(k)}$ по меньшей мере доля $\left(\cos \frac{\pi}{2k}\right)^{2k}$. А поскольку при $k \rightarrow \infty$ $\left(\cos \frac{\pi}{2k}\right)^{2k} \rightarrow 1$, то возникнет почти одно лишь ψ , если k достаточно велико. Строгое доказательство проходит следующим образом: Поскольку процесс I. не

меняет шпура, то, в силу $\text{Spur } U^{(0)} = \text{Spur } P_{[\psi]} = 1$, будет $\text{Spur } U^{(1)} = \text{Spur } U^{(2)} = \dots = \text{Spur } U^{(j)} = 1$. С другой стороны,

$$\begin{aligned} (U^{(y)} f, f) &= \sum_n (U^{(y-1)} \psi_n^{(y)}, \psi_n^{(y)}) (P_{[\psi_n^{(y)}]} f f) = \\ &= \sum_n (U^{(y-1)} \psi_n^{(y)}, \psi_n^{(y)}) |(\psi_n^{(y)}, f)|^2, \end{aligned}$$

следовательно, для $y = 1, \dots, k - 1$ и $f = \psi_1^{(y+1)} = \psi^{(y+1)}$ или же, соответственно, для $y = k$ и $f = \psi_1^{(k)} = \psi^{(k)} = \psi$ будет

$$\begin{aligned} (U^{(y)} \psi^{(y+1)}, \psi^{(y+1)}) &\geq (U^{(y-1)} \psi^{(y)}, \psi^{(y)}) |(\psi^{(y)}, \psi^{(y+1)})|^2 = \\ &= \left(\cos \frac{\pi}{2k}\right)^2 \cdot (U^{(y-1)} \psi^{(y)}, \psi^{(y)}); \end{aligned}$$

$$(U^{(k)} \psi^{(k)}, \psi^{(k)}) = (U^{(k-1)} \psi^{(k)}, \psi^{(k)}).$$

Вместе с

$$(U^{(0)} \psi^{(1)}, \psi^{(1)}) = (P_{[\psi^{(0)}]} \psi^{(1)}, \psi^{(1)}) = |(\psi^{(0)}, \psi^{(1)})|^2 = \left(\cos \frac{\pi}{2k}\right)^2$$

это дает

$$(U^{(j)} \psi, \psi) \geq \left(\cos \frac{\pi}{2k}\right)^{2k}.$$

Поскольку $\text{Spur } U^{(k)} = 1$ и $\left(\cos \frac{\pi}{2k}\right)^{2k} \rightarrow 1$ при $k \rightarrow \infty$, мы можем применить результат, найденный в II. 11: U^k сходятся к $P_{[\psi]}$. Наша цель достигнута.

Теперь мы должны обсудить вопрос о том, в каких пределах можем мы опираться на такое вспомогательное средство, как «мысленные эксперименты» феноменологической термодинамики, также и при рассмотрении квантовомеханических систем; именно, мы имеем в виду вопрос о так называемых полупроницаемых стенках.

В феноменологической термодинамике имеет место теорема: Если I и II — два различных состояния одной и той же системы S , то допустимо принять существование такой стенки, которая для I полностью проницаема, а для II — совершенно непроницаема¹⁹³⁾; это, так сказать, термодинамические определения различия, следовательно и совпадения, двух состояний. В какой мере допустимо подобное предположение в квантовой механике?

Докажем сперва, что если $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ — ортонормированная система, то существует полупроницаемая стенка, беспрепятственно пропускающая систему S в каждом из состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и отражающая ее в неизменном виде в каждом из состояний ψ_1, ψ_2, \dots

¹⁹³⁾ Ср., например, прим. ¹⁸⁴⁾ на стр. 266.

Напротив, системы, находящиеся в других состояниях, могут при соударении со стенкой даже и измениться.

Систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$ можно принять за полную, так как в противном случае ее можно было бы завершить в полную добавлением дальнейших функций $\chi_1, \chi_2 \dots$, которые можно было бы причислить, например, к $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Выберем теперь оператор R с чисто дискретным спектром и лишь простыми собственными значениями $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots$, собственными функциями которого могли бы быть $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$, и пусть при этом будут все $\lambda_n < 0$, а все $\mu_n > 0$. Пусть к оператору R относится величина \mathfrak{J} . Прорежем в стенке много окошек, каждое из которых устроено следующим образом: Когда любая из «молекул» K_1, \dots, K_N нашего газа (мы снова рассматриваем теперь U -газ при температуре $T > 0$) попадает в окошко, она там задерживается, открывается, в содержащейся в ней системе S_1 или ... или S_N измеряется величина \mathfrak{J} , затем ящик снова закрывается, и, судя по тому, оказалась ли измеренная величина $\mathfrak{J} < 0$ или же > 0 , ящик вместе с его содержимым и без изменения импульса пропускается через окошко или же отражается. То, что такое устройство достигает желаемой цели, — это ясно; остается только обсудить, какие изменения остаются в нем после таких соударений и не родственно ли оно в какой-либо степени так называемому «максвеллову демону» термодинамики¹⁹⁴⁾.

К первому вопросу следует сказать, что поскольку при известных обстоятельствах \mathfrak{J} -измерение меняет состояние S , следовательно и математическое ожидание ее энергии, то по смыслу первого начала эта разность механической энергии должна быть предоставлена или, наоборот, воспринята измерительной установкой (например, путем использования пружины, которая будет при этом ослаблена или, наоборот, напряжена сильнее, или каким-нибудь аналогичным образом). Так как здесь идет речь о совершенно автоматически функционирующем измерительном механизме и так как преобразуются только механические (не тепловые!) энергии, то, конечно, мы не встретимся здесь ни с какими изменениями энтропии, что единственно важно для нас сейчас. (Находясь S в одном из состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \psi_1, \psi_2, \dots$, \mathfrak{J} -измерение вообще не изменит S , и потому в измерительном аппарате вовсе не останется компенсирующих изменений.)

Второй пункт гораздо опаснее; наше приспособление несколько напоминает «максвеллова демона», т. е. полуупронациаемую стенку, пропускающую летящие справа молекулы, но отражающую летящие слева. Вставь мы подобную перегородку посередине наполненного газом сосуда, вскоре весь газ собрался бы на левой стороне,

¹⁹⁴⁾ Ср. прим. ¹⁸⁵⁾ на стр. 267. Читатель найдет исчерпывающую дискуссию связанных с понятием «максвеллова демона» трудностей у L. Sillagd'a, Zs. f. Phys. 53 (1929).

т. е. объем уменьшился бы вдвое без затраты энтропии. Это означало бы нигде не компенсирующееся уменьшение энтропии газа, поэтому по второму началу термодинамики такая стенка не может существовать. Все же наша полупроницаемая стенка отличается от этой, термодинамически недопустимой, весьма существенно в том отношении, что она принимает во внимание только внутренние особенности «молекул» K_1, \dots, K_N (состояние заключенных в них систем S_1, \dots, S_N), а не внешние (движутся ли они справа или слева и т. п.). Как раз от этого все и зависит. Подробный анализ этого вопроса стал возможен на основе исследований Сциларда, которые прояснили природу полупроницаемых стенок, «максвеллова демона» и вообще роль «вмешательства разумного существа в термодинамические системы»; мы не можем вдаваться здесь в эти вещи подробнее, тем более что читатель найдет исчерпывающее изложение этого вопроса в упоминаемой в прим.¹⁹⁴⁾ работе.

Проведенные рассуждения показывают, в частности, что два состояния системы S безусловно можно разделить полупроницаемыми стенками, если эти состояния ортогональны. Мы хотим показать теперь обратное: если φ и ψ не ортогональны, то допущение подобной полупроницаемой стенки противоречит второму началу. Это значит, что необходимым и достаточным условием разделимости полупроницаемыми стенками будет $(\varphi, \psi) = 0$, а не $\varphi \neq \psi$, как в классической теории (мы пишем φ и ψ вместо использовавшихся выше I и II). Тем самым разъясняется старый парадокс термодинамики в ее классической форме, именно, досадное отсутствие непрерывности при оперировании с полупроницаемыми стенками: сколь угодно слабо различные состояния все еще поддаются 100-процентному разделению, а абсолютно тождественные — не поддаются вовсе. Теперь мы имеем дело с непрерывным переходом, поскольку 100-процентная разделимость сохраняется лишь при $(\varphi, \psi) = 0$, а при растущем (φ, ψ) она становится все хуже. Состояния же φ и ψ становятся идентичными только при максимальном (φ, ψ) , именно при $|(\varphi, \psi)| = 1$ (ведь $\|\varphi\| = \|\psi\| = 1$, поэтому из $|(\varphi, \psi)| = 1$ следует, что $\varphi = c\psi$, где c — постоянная и $|c| = 1$), и тогда разделение совершенно невозможно.

Чтобы провести обещанное рассуждение, нам придется заимствовать конечный результат этого параграфа — значение энтропии для U -ансамбля. Естественно, что мы не будем использовать этого результата при его выводе.

Итак, допустим, что существует полупроницаемая стенка, разделяющая φ и ψ ; должно быть выведено, что тогда $(\varphi, \psi) = 0$. Рассмотрим $\frac{1}{2}(P_{[\varphi]} + P_{[\psi]})$ -газ (т. е. состоящий из $\frac{N}{2}$ систем в состоянии φ и $\frac{N}{2}$ систем в состоянии ψ ; штур такого оператора равен 1) и выберем T° (т. е. K) и T так, чтобы он был идеальным. Пусть K имеет изобра-

женное на рис. 3 продольное сечение 12841; на одном конце мы вставляем в него нашу полупроницаемую стенку aa и сдвигаем ее затем до середины (положение bb); температура газа должна при этом поддерживаться постоянной за счет контакта с большим тепловым резервуаром W температуры T на другом конце 23. С φ -молекулами при этом процессе не происходит ничего; ψ -молекулы же, напротив, оттесняются в правую половину \tilde{K} (между bb и 23). Иными словами, если рассматривать $\frac{1}{2}(P_{[\varphi]} + P_{[\psi]})$ -газ как 1:1-смесь $P_{[\varphi]}$ -газа и $P_{[\psi]}$ -газа, то с первым не происходит ничего, а второй оказывается изотермически сжатым до половинного объема. Из уравнения состояния идеальных газов следует, что при этом процессе будет совершена механическая работа $\frac{N}{2} \times T \ln 2$ ($\frac{N}{2}$ — это число молекул $P_{[\psi]}$ -газа, а \times — постоянная Больцмана)¹⁹⁵, и, поскольку энергия газа (из-за изотермии) не меняется¹⁹⁶, это количество энергии возьмет себе тепловой резервуар W . Увеличение энтропии резервуара составит, следовательно (ср. прим. 186) на стр. 267), $\frac{Q}{T} = N \times \frac{1}{2} \ln 2$.

После этого процесса слева от bb содержится половина первоначального $P_{[\varphi]}$ -газа, т. е. $N/4$ молекул; справа же от bb — половина первоначального $P_{[\psi]}$ -газа, т. е. $N/4$ молекул, и весь $P_{[\psi]}$ -газ, т. е. $N/2$ молекул, — т. е. всего $3N/4$ молекул $\left(\frac{1}{3}P_{[\varphi]} + \frac{2}{3}P_{[\psi]}\right)$ -газа. Сожмем и соответственно расширим эти газы до объемов $\frac{\nu}{4}$ и $\frac{3\nu}{4}$, причем соответствующая механической работе энергия опять перейдет к тепловому резервуару W (или будет заимствована у него). Эта

¹⁹⁵) Если идеальный газ состоит из M молекул, то его давление $p = \frac{M \times T}{\nu}$. Поэтому при сжатии от объема ν_1 до объема ν_2 будет совершена механическая работа

$$\int_{\nu_1}^{\nu_2} p d\nu = M \times T \int_{\nu_1}^{\nu_2} \frac{d\nu}{\nu} = M \times T \ln \frac{\nu_2}{\nu_1}.$$

В нашем случае $M = \frac{N}{2}$, $\nu_1 = \frac{\nu}{4}$ и $\nu_2 = \nu$.

¹⁹⁶) Как известно, энергия идеального газа зависит лишь от его температуры.

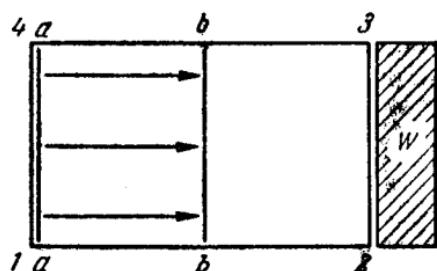


Рис. 8.

работа составит $\frac{N}{4} \times T \ln 2$ или $\frac{3N}{4} \times T \ln \frac{3}{2}$ (ср. прим. 191) на стр. 269), и, следовательно, энтропия резервуара возрастет на $Nx \cdot \frac{1}{4} \ln 2$ или, соответственно, на $-Nx \cdot \frac{3}{4} \ln \frac{3}{2}$. Все вместе составит

$$Nx \cdot \left(\frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{4} \ln 2 - \frac{3}{4} \ln \frac{3}{2} \right) = Nx \cdot \frac{3}{4} \ln \frac{4}{3}.$$

Итак, в результате мы пришли к одному $P_{[\varphi]}$ - и к одному $\left(\frac{1}{3}P_{[\varphi]} + \frac{2}{3}P_{[\psi]}\right)$ -газам из $\frac{N}{4}$ и, соответственно, $\frac{3N}{4}$ молекул, занимающих объемы $\frac{\nu}{4}$ и $\frac{3\nu}{4}$. Первоначально же у нас был один $\left(\frac{1}{2}P_{[\varphi]} + \frac{1}{2}P_{[\psi]}\right)$ -газ из N молекул в объеме \mathcal{V}^o или, что то же, два $\left(\frac{1}{2}P_{[\varphi]} + \frac{1}{2}P_{[\psi]}\right)$ -газа из $\frac{N}{4}$ и $\frac{3N}{4}$ молекул в объемах $\frac{\nu}{4}$ и $\frac{3\nu}{4}$ соответственно. Таким образом, весь процесс привел к следующим изменениям: $\frac{N}{4}$ молекул в объеме $\frac{\nu}{4}$ перешли из $\left(\frac{1}{2}P_{[\varphi]} + \frac{1}{2}P_{[\psi]}\right)$ -газа в $P_{[\varphi]}$ -газ; $\frac{3N}{4}$ молекул в объеме $\frac{3\nu}{4}$ перешли из $\left(\frac{1}{2}P_{[\varphi]} + \frac{1}{2}P_{[\psi]}\right)$ -газа в $\left(\frac{1}{3}P_{[\varphi]} + \frac{2}{3}P_{[\psi]}\right)$ -газ; к энтропии резервуара W добавилось $Nx \cdot \frac{3}{4} \ln \frac{4}{3}$. Поскольку процесс обратим, то полное увеличение энтропии должно составить 0, т. е. изменения энтропий обоих газов должны как раз скомпенсировать увеличение энтропии W . Поэтому нам надо еще знать изменения энтропий газов.

Как мы увидим, энтропия U -газа из M молекул составляет $-Mx \cdot Sp_{[U]}(U \ln U)$, если энтропия $P_{[U]}$ -газа того же объема и той же температуры нормирована на нуль (ср. выше). Поэтому, если U обладает чисто дискретным спектром с собственными значениями w_1, w_2, \dots , то это составит $-Mx \cdot \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$ (при этом $x \ln x$ следует считать равным 0 для $x = 0$). Теперь, как легко сосчитать, операторы $P_{[\varphi]}$, $\left(\frac{1}{2}P_{[\varphi]} + \frac{1}{2}P_{[\psi]}\right)$ и $\left(\frac{1}{3}P_{[\varphi]} + \frac{2}{3}P_{[\psi]}\right)$ обладают собственными значениями 1,0 или, соответственно, $\frac{1+\alpha}{2}, \frac{1-\alpha}{2}, 0$ или, соответственно, $\frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{6}, \frac{3-\sqrt{1+8\alpha^2}}{6}, 0$ (где $\alpha = |(\varphi, \psi)|$, следовательно ≥ 0)

и $\leqslant 1$), из которых 0 во всех случаях бесконечно кратен, а остальные однократны¹⁹⁷⁾. Поэтому энтропия газов возрастает на

$$-\frac{N}{4} \times 0 - \frac{3N}{4} \times \left(\frac{3 + \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{6} \ln \frac{3 + \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{6} + \right. \\ \left. + \frac{3 - \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{6} \ln \frac{3 - \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{6} \right) + N \times \left(\frac{1+\alpha}{2} \ln \frac{1+\alpha}{2} + \frac{1-\alpha}{2} \ln \frac{1-\alpha}{2} \right).$$

Добавляя сюда еще и увеличение энтропии $N \times \frac{3}{4} \ln \frac{4}{3}$ резервуара W , мы должны получить 0. Если разделить все на $N \times 4/4$, то получится

$$-\frac{3 + \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{2} \ln \frac{3 + \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{6} - \frac{3 - \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{2} \ln \frac{3 - \sqrt{1 + 8\alpha^2}}{6} + \\ + 2(1 + \alpha) \ln \frac{1 + \alpha}{2} + 2(1 - \alpha) \ln \frac{1 - \alpha}{2} + 3 \ln \frac{4}{3} = 0,$$

причем $0 \leqslant \alpha \leqslant 1$.

¹⁹⁷⁾ Определим собственные значения оператора $(aP_{[\varphi]} + bP_{[\psi]})$. Должно быть

$$(aP_{[\varphi]} + bP_{[\psi]})f = \lambda f,$$

и, поскольку левая часть является линейной комбинацией φ и ψ , то такой будет и правая, следовательно и f , если $\lambda \neq 0$. $\lambda = 0$ наверняка будет собственным значением бесконечной кратности, так как к нему будет относиться любая f , ортогональная к φ и ψ . Поэтому достаточно рассмотреть $\lambda \neq 0$ и $f = x\varphi + y\psi$ (φ и ψ должны быть линейно независимы, так как иначе $\varphi = c\psi$, $|c| = 1$, т. е. два состояния тождественны).

Тогда выписанное выше уравнение будет гласить

$$a(x + y(\psi, \varphi)) \cdot \varphi + b(x(\varphi, \psi) + y) \cdot \psi = \lambda x \cdot \varphi + \lambda y \cdot \psi,$$

т. е.

$$a \cdot x + a \overline{(\varphi, \psi)} \cdot y = \lambda \cdot x, \quad b(\varphi, \psi) \cdot x + b \cdot y = \lambda \cdot y.$$

Детерминант этих уравнений должен обращаться в нуль:

$$\begin{vmatrix} a - \lambda, & a \overline{(\varphi, \psi)} \\ b(\varphi, \psi), & b - \lambda \end{vmatrix} = 0; \quad (a - \lambda)(b - \lambda) - ab |(\varphi, \psi)|^2 = 0;$$

$$\lambda^2 - (a + b)\lambda + ab(1 - \alpha^2) = 0;$$

$$\lambda = \frac{a + b \pm \sqrt{(a + b)^2 - 4ab(1 - \alpha^2)}}{2} = \frac{a + b \pm \sqrt{(a - b)^2 + 4\alpha^2ab}}{2}.$$

Если теперь положить здесь $a = 1$, $b = 0$ или $a = \frac{1}{2}$, $b = \frac{1}{2}$, или $a = \frac{1}{3}$,

$b = \frac{2}{3}$, то получатся формулы текста.

Легко заметить, однако, что левая часть здесь при α , изменяющемся от 0 до 1, монотонно возрастает¹⁹⁸⁾, именно от 0 до $3 \ln \frac{4}{3}$; поэтому должно быть $\alpha = 0$ (для $\alpha \neq 0$ процесс, обратный описанному, уменьшал бы, вопреки второму началу, энтропию!). Тем самым утверждение $(\varphi, \psi) = 0$ доказано.

После этих предварительных рассуждений мы подошли к тому, чтобы определить энтропию некоторого U -газа из N молекул

¹⁹⁸⁾ Так как $(x \ln x)' = \ln x + 1$, следовательно

$$\left(\frac{1+y}{2} \ln \frac{1+y}{2} + \frac{1-y}{2} \ln \frac{1-y}{2} \right)' = \\ = \frac{1}{2} \left(\ln \frac{1+y}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\ln \frac{1-y}{2} + 1 \right) = \frac{1}{2} \ln \frac{1+y}{1-y},$$

то производной нашего выражения будет

$$-3 \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{3-\sqrt{1+8\alpha^2}} \cdot \frac{1}{3} \frac{8\alpha}{\sqrt{1+8\alpha^2}} + 4 \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} = \\ = 2 \left(\ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} - \frac{2\alpha}{\sqrt{1+8\alpha^2}} \ln \frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{3-\sqrt{1+8\alpha^2}} \right).$$

Утверждение, что она > 0 , означало бы, что

$$\ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} > \frac{2\alpha}{\sqrt{1+8\alpha^2}} \ln \frac{3+\sqrt{1+8\alpha^2}}{3-\sqrt{1+8\alpha^2}},$$

т. е. что

$$\frac{1}{2\alpha} \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} > \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1+\beta}{1-\beta}; \quad \beta = \frac{\sqrt{1+8\alpha^2}}{3}.$$

Мы докажем последнее неравенство даже с $\frac{8}{9}$ на месте $\frac{2}{3}$. Тогда, в силу $1-\beta^2 = \frac{8}{9}(1-\alpha^2)$ и $\alpha < \beta$ (второе следует из первого из-за $\alpha < 1$), неравенство будет утверждать, что

$$\frac{1-\alpha^2}{2\alpha} \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha} > \frac{1-\beta^2}{2\beta} \ln \frac{1+\beta}{1-\beta}.$$

Оно будет гарантированно выполняться, если мы выясним, что

$$\frac{1-x^2}{2x} \ln \frac{1+x}{1-x}$$

будет монотонно убывать в $0 < x < 1$, что можно, например, видеть из разложения в ряд

$$\frac{1-x^2}{2x} \ln \frac{1+x}{1-x} = (1-x^2) \left(1 + \frac{x^2}{3} + \frac{x^4}{5} + \dots \right) = \\ = 1 - \left(1 - \frac{1}{3} \right) x^2 - \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{5} \right) x^4 - \dots$$

в объеме \mathcal{V} и при температуре T , точнее присущий ему избыток энтропии сравнительно с $P_{[\varphi]}$ -газом при тех же условиях. Та же величина будет тогда, согласно нашим прежним замечаниям и в рамках избранной выше нормировки, также и энтропией U -ансамбля из N отдельных систем. Справ U мы будем, как уже говорилось выше, считать равным 1.

В таком случае U обладает, как мы знаем, чисто дискретным спектром w_1, w_2, \dots с $w_1 \geq 0, w_2 \geq 0, \dots, w_1 + w_2 + \dots = 1$. Соответствующими собственными функциями пусть будут $\varphi_1, \varphi_2, \dots$;

тогда $U = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[\varphi_n]}$ (ср. IV. 3). Тем самым наш U -газ является смесью $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$ -газов из $w_1 N_1, w_2 N_2, \dots$ молекул соответственно, заключенных все в один и тот же объем \mathcal{V} . Пусть T и \mathcal{V} опять таковы, что все эти газы идеальны, а K обладает прямоугольным сечением. Чтобы разделить $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ -молекулы друг от друга, предпримем следующие обратимые воздействия (рис. 4). Пристроим к K (23452) второй, такого же размера, прямоугольный ящик K' (12561) и заменим общую стенку 25 двумя тесно прилегающими стенками, одна из которых (25) пусть будет неподвижной и полупроницаемой, именно проницаемой для φ_1 и отражающей для $\varphi_2, \varphi_3, \dots$, а вторая (bb) — подвижной, но обычной, совершенно непроницаемой, стенкой. Далее, вдвинем в положение dd, тесно прилегающее к 34, еще одну полупроницаемую стенку, на этот раз проницаемую для $\varphi_2, \varphi_3, \dots$, но отражающую φ_1 . После этого мы сдвинем bb и dd, сохранив их относительное расстояние неизменным, до положений aa и cc (т. е. вплотную к 16 или к 25). Эти действия совсем не затронут $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ -молекул; молекулы же φ_1 , напротив, будут вынуждены все время оставаться между подвижными стенками bb и dd; поскольку расстояние между ними постоянно, то нам не понадобится затрачивать работы (против давления газа), и потому никаких тепловых процессов не произойдет. В заключение мы заменим стенки 25 и cc неподвижной, совершенно непроницаемой стенкой 25 и удалим aa, в результате чего будут снова созданы ящики K и K' . Лишь все φ_1 -молекулы будут теперь находиться в K' , т. е. мы «отцепили» их обратимым образом без какой-либо затраты работы, передачи тепла или изменения температуры из K в такой же ящик K' ¹⁹⁹⁾.

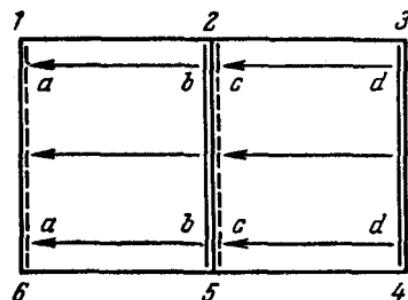


Рис. 4.

прилегающими стенками, одна из которых (25) пусть будет неподвижной и полупроницаемой, именно проницаемой для φ_1 и отражающей для $\varphi_2, \varphi_3, \dots$, а вторая (bb) — подвижной, но обычной, совершенно непроницаемой, стенкой. Далее, вдвинем в положение dd, тесно прилегающее к 34, еще одну полупроницаемую стенку, на этот раз проницаемую для $\varphi_2, \varphi_3, \dots$, но отражающую φ_1 . После этого мы сдвинем bb и dd, сохранив их относительное расстояние неизменным, до положений aa и cc (т. е. вплотную к 16 или к 25). Эти действия совсем не затронут $\varphi_2, \varphi_3, \dots$ -молекул; молекулы же φ_1 , напротив, будут вынуждены все время оставаться между подвижными стенками bb и dd; поскольку расстояние между ними постоянно, то нам не понадобится затрачивать работы (против давления газа), и потому никаких тепловых процессов не произойдет. В заключение мы заменим стенки 25 и cc неподвижной, совершенно непроницаемой стенкой 25 и удалим aa, в результате чего будут снова созданы ящики K и K' . Лишь все φ_1 -молекулы будут теперь находиться в K' , т. е. мы «отцепили» их обратимым образом без какой-либо затраты работы, передачи тепла или изменения температуры из K в такой же ящик K' ¹⁹⁹⁾.

199) Ср. в связи с этим, характерным для феноменологической термодинамики искусственным трюком, например, прим.¹⁸⁴⁾ на стр. 266.

Точно так же мы «отцедим» φ_2 -, φ_3 -, ... -молекулы в одинаковые ящики \bar{K}' , \bar{K}'' , ... и приDEM, наконец, к $P_{[\varphi_1]}$ -, $P_{[\varphi_2]}$ -, ... -газам, состоящим из $w_1 N$, $w_2 N$, ... молекул, каждый в объеме \mathcal{V} . Теперь мы сожмем их изотермически до объемов $w_1 \mathcal{V}$, $w_2 \mathcal{V}$, ... соответственно, для чего нам придется подвести из большого резервуара (температуры T , чтобы процесс был обратимым) количества тепла $w_1 N \times T \ln w_1$, $w_2 N \times T \ln w_2$, ... (все они < 0 !), так как механические работы сжатия отдельных газов как раз равны этим величинам с обратным знаком (ср. прим. ¹⁹¹) на стр. 269). Итак, увеличение энтропии

при этих процессах составит $\sum_{n=1}^{\infty} w_n N \times \ln w_n$. Наконец, переведем в за-

ключение все $P_{[\varphi_1]}$ -, $P_{[\varphi_2]}$ -, ... -газы в один $P_{[\varphi]}$ -газ (φ — произвольное состояние). Итак, мы получили теперь сплошь $P_{[\varphi]}$ -газы, состоящие из $w_1 N$, $w_2 N$, ... молекул и заключенные в объемы $w_1 \mathcal{V}$, $w_2 \mathcal{V}$, ... Поскольку все они идентичны и обладают одинаковой плотностью ($N : \mathcal{V}$), то их можно смешать, не нарушая обратимости, и у нас

возникнет один $P_{[\varphi]}$ -газ из N молекул в объеме \mathcal{V} (из-за $\sum_{n=1}^{\infty} w_n = 1$).

Тем самым желательный обратимый переход выполнен. Энтропия при этом увеличилась на $N \times \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$, и поскольку в конечном состоянии она равна (по нашей нормировке) 0, то в начальном состоянии она равнялась $-N \times \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$.

Поскольку оператор U обладает собственными функциями φ_1 , φ_2 , ... с собственными значениями w_1 , w_2 , ..., то $U \ln U$ будет обладать теми же собственными функциями, но с собственными значениями $w_1 \ln w_1$, $w_2 \ln w_2$, ..., и, следовательно, $\text{Spur}(U \ln U) = \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$. Заметим, что $w_n \geq 0$, ≤ 1 , значит $w_n \ln w_n \leq 0$ и притом $= 0$ лишь для $w_n = 0, 1$, — что для $w_n = 0$ надо брать значение $w_n \ln w_n = 0$, видно из того что в нашем рассмотрении не нужно учитывать обращающихся в нуль w_n ; впрочем, соображения непрерывности приводят к тому же.

Итак, мы определили, что энтропия состоящего из N отдельных систем U -ансамбля составляет $-N \times \text{Spur}(U \ln U)$. Сказанное ранее относительно $w_n \ln w_n$ показывает, что она всегда ≥ 0 и для равенства нулю все w_n должны быть $= 0$ или 1. Поскольку $\text{Spur } U = 1$, то при этом в точности одна $w_n = 1$, все остальные $= 0$, т. е. $U = P_{[\varphi]}$. Итак, только $U = P_{[\varphi]}$, т. е. только состояния имеют энтропию $= 0$, все остальные смеси имеют энтропии > 0 .

3. Вопросы обратимости и равновесия

Теперь мы можем заняться доказательством высказанного в V.1 утверждения о необратимости процесса измерения. Если, например, U — состояние, $U = P_{[\varphi]}$, то в результате измерения некоторой величины \mathfrak{M} , оператор R которой обладает собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, оно переходит в ансамбль

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} (P_{[\varphi]} \varphi_n, \varphi_n) \cdot P_{[\varphi_n]} = \sum_{n=1}^{\infty} |(\varphi, \varphi_n)|^2 P_{[\varphi_n]},$$

и если U' — не состояние, то при этом происходит возрастание энтропии (энтропия U была 0, а энтропия U' будет > 0), так что процесс необратим. Но чтобы U' было состоянием, следовательно было $P_{[\varphi_n]}$, где φ_n — его собственные функции, должно быть $|(\varphi, \varphi_n)|^2 = 0$ для всех φ_n , исключая одну (для нее $= 1$), т. е. φ должна быть ортогональна ко всем φ_n , $n \neq \bar{n}$. Но тогда $\varphi = c\varphi_{\bar{n}}$, причем $|c| = 1$, следовательно $P_{[\varphi]} = P_{[\varphi_{\bar{n}}]}$ и $U = U'$. Итак, всякое измерение в состоянии необратимо, исключая случай, когда собственная функция измеренной величины (т. е. эта величина в данном состоянии) имеет точное значение, когда измерение вообще не меняет состояния. Как мы видим, акаузальное поведение однозначным образом связано поэтому и с определенными сопутствующими термодинамическими явлениями.

Мы хотим обсудить теперь с полной общностью, когда процесс

$$1. U \rightarrow U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) \cdot P_{[\varphi_n]} \text{ повышает энтропию.}$$

Ансамбль U обладает энтропией — $N \times \text{Spur}(U \ln U)$, и если w_1, w_2, \dots — его собственные значения, а ψ_1, ψ_2, \dots — собственные функции, то это равно

$$-N \times \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n = -N \times \sum_{n=1}^{\infty} (U\psi_n, \psi_n) \ln (U\psi_n, \psi_n).$$

Что до U' , то он обладает собственными значениями $(U\varphi_1, \varphi_1)$, $(U\varphi_2, \varphi_2), \dots$, следовательно его энтропия равна

$$-N \times \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) \ln (U\varphi_n, \varphi_n).$$

Поэтому энтропия ансамбля $U \geqq$ энтропии U' в зависимости от того, будет ли

$$* \quad \sum_{n=1}^{\infty} (U\psi_n, \psi_n) \ln (U\psi_n, \psi_n) \leqq \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) \ln (U\varphi_n, \varphi_n).$$

Покажем сперва, что в *, во всяком случае, выполняется знак \geqslant , т. е. что процесс $U \rightarrow U'$ не уменьшает энтропии; хотя это и ясно термодинамически, тем не менее для наших дальнейших целей будет важно обладать и чисто математическим доказательством этого обстоятельства. Именно, мы будем считать U , а вместе с ним и ψ_1, ψ_2, \dots фиксированными, а систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — пробегающей все возможные полные ортонормированные системы.

Мы можем сперва ограничиться из соображений непрерывности такими системами $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, в которых только конечное число функций φ_n отличны от соответствующих функций ψ_n . Итак, пусть, например, для $n > M$ всегда $\varphi_n = \psi_n$. Тогда функции φ_n с $n \leq M$ будут линейными комбинациями функций ψ_n с $n \leq M$ и наоборот, т. е.

$$\varphi_m = \sum_{n=1}^M x_{mn} \psi_n \quad (m = 1, \dots, M),$$

и M -мерная матрица $\{x_{mn}\}$ очевидно унитарна. Выполняется $(U\psi_m, \psi_m) = w_m$ и, как легко вычислить,

$$(U\varphi_m, \varphi_m) = \sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}|^2 \quad (m = 1, \dots, M),$$

так что требуется доказать, что

$$\sum_{m=1}^M w_m \ln w_m \geq \sum_{m=1}^M \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}|^2 \right) \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}|^2 \right).$$

Поскольку правая часть является непрерывной функцией M^2 ограниченных переменных x_{mn} , то она имеет максимум и ($\{x_{mn}\}$ унитарна) принимает его; так как левая сторона является значением правой для

$$x_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{для } m = n, \\ 0 & \text{для } m \neq n, \end{cases}$$

то остается показать, что названный максимум осуществляется как раз для этой системы переменных x_{mn} .

Итак, пусть x_{mn}^0 ($m, n = 1, \dots, M$) — те значения переменных, для которых осуществляется максимум. Если перемножить матрицу $\{x_{m,n}^0\}$ с унитарной матрицей

$$\begin{Bmatrix} \alpha, \beta, 0, . . 0 \\ -\bar{\beta}, \bar{\alpha}, 0, . . 0 \\ 0, 0, 1, . . 0 \\ \cdot \cdot \cdot \\ 0, 0, 0, . . 1 \end{Bmatrix}; \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

то получится унитарная матрица $\{x'_{mn}\}$, т. е. опять допустимая система переменных x_{mn} . Пусть, именно, $\alpha = \sqrt{1 - \varepsilon^2}$, $\beta = \theta\varepsilon$ (ε вещественно, $|\theta| = 1$) и ε мало, так что в дальнейших вычислениях мы будем учитывать только члены порядка 1, ε , ε^2 , а членами порядка ε^3 , ε^4 , ... — пренебрегать. Тогда $\alpha \approx 1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2$, и в новой матрице $\{x'_{mn}\}$ будет

$$x'_{1n} \approx \left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2\right) x_{1n}^0 + \theta\varepsilon x_{2n}^0;$$

$$x'_{2n} \approx -\bar{\theta}\varepsilon x_{1n}^0 + \left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2\right) x_{2n}^0;$$

$$x'_{mn} = x_{mn}^0 \quad (m \geq 3),$$

и, следовательно, далее

$$\sum_{n=1}^M w_n |x'_{1n}|^2 \approx \sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2 + \sum_{n=1}^M 2w_n \operatorname{Re}(\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \cdot \varepsilon + \\ + \sum_{n=1}^M w_n (-|x_{1n}^0|^2 + |x_{2n}^0|^2) \cdot \varepsilon^2;$$

$$\sum_{n=1}^M w_n |x'_{2n}|^2 \approx \sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2 - \sum_{n=1}^M 2w_n \operatorname{Re}(\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \cdot \varepsilon - \\ - \sum_{n=1}^M w_n (-|x_{1n}^0|^2 + |x_{2n}^0|^2) \cdot \varepsilon^2; \\ \sum_{n=1}^M w_n |x'_{mn}|^2 = \sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2.$$

Подставляя эти выражения в $f(x) = x \ln x$, учитывая при этом, что

$$f'(x) = \ln x + 1, \quad f''(x) = \frac{1}{x},$$

и выполняя сложение, мы получим

$$\sum_{m=1}^M \left(\sum_{n=1}^M w_n |x'_{mn}|^2 \right) \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x'_{mn}|^2 \right) \approx \\ \approx \sum_{m=1}^M \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2 \right) \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2 \right) + \\ + \left(\ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2 \right) - \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right) \right) \cdot \sum_{n=1}^M 2w_n \operatorname{Re}(\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \cdot \varepsilon +$$

$$\begin{aligned}
 & + \left[- \left(\ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2 \right) - \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right) \right) \times \right. \\
 & \quad \times \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2 - \sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right) + \\
 & \quad \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2} + \frac{1}{\sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2} \right) \left(\sum_{n=1}^M 2 \operatorname{Re} (\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) \right)^2 \right] \cdot \varepsilon^2.
 \end{aligned}$$

Чтобы первый член справа осуществлял максимум, коэффициент при ε должен $= 0$, а коэффициент при ε^2 быть $\leqslant 0$. Первый из них содержит два множителя,

$$\ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{1n}^0|^2 \right) - \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{2n}^0|^2 \right)$$

и

$$\sum_{n=1}^M 2w_n \operatorname{Re} (\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0).$$

Будь первый из них $= 0$, в коэффициенте при ε^2 первый член будет $= 0$ (он всегда $\leqslant 0$), так что второй член, который, очевидно, всегда $\geqslant 0$, должен будет обратиться в нуль, чтобы весь коэффициент был $\leqslant 0$.

Это означает, что $\sum_{n=1}^M 2w_n \operatorname{Re} (\bar{\theta} x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0) = 0$, т. е. второй множитель в коэффициенте при ε должен тогда тоже $= 0$, что можно записать также и в форме $2 \operatorname{Re} \left(\bar{\theta} \sum_{n=1}^M w_n x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0 \right) = 0$. Поскольку это условие переходит, при соответствующем выборе θ , на абсолютную величину суммы $\sum_{n=1}^M$, то она должна обращаться в нуль: $\sum_{n=1}^M w_n x_{1n}^0 \bar{x}_{2n}^0 = 0$.

Поскольку мы могли бы поставить на место 1 и 2 любые два различных $k, j = 1, \dots, M$, то получается

$$\sum_{n=1}^M w_n x_{kn}^0 \bar{x}_{jn}^0 = 0 \quad \text{для } k \neq j.$$

Но это значит, что унитарное преобразование координат с матрицей $\{x_{mn}^0\}$ преобразует диагональную матрицу с диагональными элементами w_1, \dots, w_n снова к диагональной форме. Поскольку диагональные элементы являются мультиплликаторами (или собственными значениями) матрицы, то при преобразовании координат они не меняются, а могут, самое большое, переставиться. До преобразования

это были величины $w_m (m = 1, \dots, M)$; после преобразования это будут величины $\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2 (m = 1, \dots, N)$. Итак, суммы $\sum_{n=1}^M w_n \ln w_n$ и $\sum_{m=1}^M \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2 \right) \ln \left(\sum_{n=1}^M w_n |x_{mn}^0|^2 \right)$ имеют те же самые значения, т. е. при

$$x_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{для } m = n, \\ 0 & \text{для } m \neq n \end{cases}$$

осуществляется максимум, как то и утверждалось.

Установим теперь, когда в соотношении * имеет место знак равенства. Когда это выполняется, сумма

$$\sum_{n=1}^{\infty} (U\chi_n, \chi_n) \ln (U\chi_n, \chi_n)$$

будет принимать максимальное значение не только для $\chi_n = \psi_n (n = 1, 2, \dots)$ (собственных функций оператора U , ср. выше), но и для $\chi_n = \varphi_n (n = 1, 2, \dots)$. (Считаем, что χ_1, χ_2, \dots пробегают все полные ортонормированные системы.) В частности, это выполняется, если унитарное преобразование испытывают только M первых φ_n (т. е. если $\chi_n = \varphi_n$ для $n > M$). Пусть $u_{mn} = (U\varphi_m, \varphi_n) (m, n = 1, \dots, M)$, v_1, \dots, v_M будут собственными значениями конечной (а также и эрмитовой и дефинитной) матрицы $\{u_{mn}\}$, а $\{\alpha_{mn}\} (m, n = 1, \dots, M)$ — матрицей, приводящей $\{u_{mn}\}$ к диагональному виду. Функции $\varphi_1, \dots, \varphi_M$ пусть она переводят в $\omega_1, \dots, \omega_M$, $\varphi_m = \sum_{n=1}^M \alpha_{mn} \omega_n (m = 1, \dots, M)$, тогда $U\omega_n = v_n \omega_n$, следовательно,

$$(U\omega_m, \omega_n) = \begin{cases} v_n & \text{для } m = n, \\ 0 & \text{для } m \neq n. \end{cases}$$

Для $\xi_m = \sum_{n=1}^M x_{mn} \omega_n (m = 1, \dots, M; \{x_{mn}\})$ пусть тоже будет унитарной) будет, следовательно, $(U\xi_k, \xi_j) = \sum_{n=1}^M v_n x_{kn} \bar{x}_{jn}$. Поэтому, согласно допущению о $\varphi_1, \dots, \varphi_M$, величина $\sum_{m=1}^M \left(\sum_{n=1}^M v_n |x_{mn}|^2 \right) \ln \left(\sum_{n=1}^M v_n |x_{mn}|^2 \right)$ принимает максимум при $x_{mn} = \alpha_{mn}$. В силу предыдущего доказательства отсюда следует $\sum_{n=1}^M v_n \alpha_{kn} \bar{\alpha}_{jn} = 0$ для $k \neq j$, т. е. $(U\psi_k, \psi_j) = 0$ для $k \neq j, k, j = 1, \dots, M$.

Это должно выполняться для всех M ; следовательно, $U\varphi_k$ ортогональна ко всем φ_j , $k \neq j$, поэтому равна $w'_k \varphi_k$ (w'_k — константа). Тем самым $\varphi_1, \varphi_n, \dots$ оказываются собственными функциями U с собственными значениями w'_1, w'_2, \dots (т. е. с перестановкой собственных значений w_1, w_2, \dots). Но при таких обстоятельствах

$$U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) \cdot P_{[\varphi_n]} = \sum_{n=1}^{\infty} w'_n \cdot P_{[\varphi_n]} = U.$$

Итак, мы нашли, что

Процесс 1., $U \rightarrow U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U\varphi_n, \varphi_n) \cdot P_{[\varphi_n]}$ ($\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — собственные функции оператора R измеряемой величины \mathfrak{N}) никогда не уменьшает энтропии; он даже увеличивает ее всегда, исключая случай, когда все $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ являются собственными функциями U , т. е. когда $U = U'$.

Впрочем, в этом случае U коммутирует с R , и это тоже характерно для того, чтобы такой случай имел место (поскольку коммутативность равносильна существованию системы общих собственных функций $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, ср. II. 10).

Итак, процесс 1. необратим во всех случаях, когда он вообще приводит к каким-либо изменениям.

Теперь мы должны рассмотреть вопросы обратимости при процессах 1. и 2. независимо от феноменологической термодинамики, как то было прокламировано в V. 2 в качестве второго пункта программы. Математический метод, с помощью которого это может удастся, мы уже знаем: Если выполняется второе начало, то энтропия должна равняться — $N \times \text{Spur}(U \ln U)$, и эта величина не вправе уменьшиться ни при каком процессе 1. или 2.. Поэтому нам надо рассмотреть теперь — $N \times \text{Spur}(U \ln U)$ как чисто математическую величину, независимо от ее толкования как энтропии, и выяснить, что происходит с ней при 1. и 2. ²⁰⁰⁾.

При процессе 2. из U возникает $U_t = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t H} U e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t H}$, т. е. если обозначить унитарный оператор $e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t H}$ через A , $U \rightarrow U_t = A U A^{-1}$. Поскольку в силу унитарности A замена $f \rightarrow Af$ осуществляет изоморфное отображение гильбертова пространства само на себя, которое переводит каждый оператор P в $A P A^{-1}$, то вообще $F(A P A^{-1}) = A F(P) A^{-1}$. Поэтому $U_t \ln U_t = A \cdot U \ln U \cdot A^{-1}$. Отсюда $\text{Spur}(U_t \ln U_t) = \text{Spur}(U \ln U)$, т. е. наша величина — $N \times \text{Spur}(U \ln U)$ сохраняется при 2. постоянной. Что происходит с ней при 1., мы

²⁰⁰⁾ Мы, естественно, могли бы опустить здесь множитель $N \times$ и рассматривать просто — $\text{Spur}(U \ln U)$ или же, чтобы сохранить пропорциональность числу элементов N , величину — $N \text{Spur}(U \ln U)$.

только что (и притом без ссылок на второе начало) выяснили: если U при этом меняется (т. е. $U \neq U'$), то она возрастает, при неизменном же U (т. е. при $U = U'$ или же при $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, являющихся собственными функциями U , или же при коммутирующих U и R) она, естественно, тоже остается неизменной. Итак, при воздействии, составленном из многих процессов 1. и 2. (в произвольных числе и порядке), — $\text{Spur}(U \ln U)$ остается, следовательно, неизменной, если каждый из процессов 1. недействен (т. е. не совершает каких-либо изменений), а во всех остальных случаях — возрастает. Поэтому, если рассматриваются только воздействия 1. и 2., то каждый из процессов 1., который вообще что-либо меняет, необратим.

Существуют, правда, и более простые выражения, чем — $\text{Spur}(U \ln U)$, которые не убывают при процессах 1. и остаются постоянными при 2., например, наибольшее собственное значение оператора U . В самом деле, при 2. оно, как и все собственные значения U , не меняется, при 1. же собственные значения w_1, w_2, \dots оператора U переходят в собственные значения $\sum_{n=1}^{\infty} w_n |x_{1n}|^2, \sum_{n=1}^{\infty} w_n |x_{2n}|^2, \dots$ оператора U' (ср. рассмотрение этого параграфа), и, поскольку из-за унитарности матрицы $\{x_{mn}\}$ будет выполняться $\sum_{n=1}^{\infty} |x_{1n}|^2 = 1, \sum_{n=1}^{\infty} |x_{2n}|^2 = 1, \dots$

то все эти числа \leqslant наибольшего w_n (наибольшее w_n существует,

поскольку все $w_n \geqslant 0$, и из-за $\sum_{n=1}^{\infty} w_n = 1$ должно быть $w_n \rightarrow 0$).

Поскольку безусловно можно изменить U таким образом, чтобы величина — $\text{Spur}(U \ln U) = - \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$ осталась бы инвариантной,

а наибольшее собственное значение w_n уменьшилось бы, то видно, что существуют переходы, возможные с точки зрения феноменологической термодинамики, — которые, следовательно, действительно можно провести путем наших газовых процессов, но которые никогда не могли бы произойти лишь через посредство последовательного применения 1. и 2.. Это показывает, что введения газовых методов нельзя избежать.

Вместо — $\text{Spur}(U \ln U)$ мы могли бы, конечно, рассматривать $\text{Spur}(F(U))$ для какой-либо подходящей $F(x)$. Что последнее выражение будет увеличиваться при 1. для $U \neq U'$ (для $U = U'$, равно как и при 2., оно, естественно, останется инвариантным), можно доказать точно так же, как мы делали для $F(x) = -x \ln x$, если только для функции $F(x)$ будут выполняться те свойства, которые единственно использовали выше; именно, что $F''(x) < 0$ и что

$F'(x)$ монотонно убывает (последнее, впрочем, следует из первого). Итак, для нашего нетермодинамического рассмотрения необратимости мы можем употребить любой $\text{Spur}(F(U))$, будь только $F(x)$ выпуклая кверху функция, т. е. выполняющая $F''(x) < 0$ (в интервале $0 \leq x \leq 1$, поскольку в нем лежат все собственные значения U).

В заключение следовало бы еще показать, что и смешивая два ансамбля U и V (например, в соотношении $\alpha : \beta$, $\alpha > 0$, $\beta > 0$, $\alpha + \beta = 1$) мы не придем к уменьшению энтропии, т. е. что

$$-\text{Spur}((\alpha U + \beta V) \ln(\alpha U + \beta V)) \geq -\alpha \text{Spur}(U \ln U) - \beta \text{Spur}(V \ln V).$$

И это утверждение остается справедливым для всякой выпуклой функции $F(x)$ на месте $-x \ln x$; доказательство мы предоставим читателю.

Займемся теперь розыском стационарно равновесной смеси, т. е. смеси максимальной энтропии при заданной энергии. Последнее надо, конечно, понимать в том смысле, что предписано математическое ожидание энергии, — только такое понимание будет соответствовать идеи цитированных в прим.¹⁸⁴⁾ (стр. 266) методов термодинамического исследования статистических ансамблей. Таким образом, допустимыми будут лишь те смеси, для чьих U выполняется $\text{Spur } U = 1$ и $\text{Spur}(U \mathbf{H}) = E$, где \mathbf{H} — оператор энергии, а E — ее предписанное математическое ожидание. При этих дополнительных условиях надо сделать $-N \times \text{Spur}(U \ln U)$ максимальной. Сделаем еще то упрощающее предположение, что \mathbf{H} обладает чисто дискретным спектром, именно, собственными значениями W_1, W_2, \dots и собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (среди них могут быть и многократные).

Пусть \mathfrak{R} — некоторая величина, чей оператор R обладает теми же собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, но всеми различными собственными значениями. Измерение \mathfrak{R} преобразует U согласно 2. в $U' = \sum_{n=1}^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) P_{[\varphi_n]}$; при этом $-N \times \text{Spur}(U \ln U)$ возрастает, а $\text{Spur } U$ и $\text{Spur}(U \mathbf{H})$ не изменяются — последнее из-за того, что φ_n — это собственные функции \mathbf{H} и, следовательно, $(\mathbf{H} \varphi_m, \varphi_n)$ для $m \neq n$ обращаются в нуль:

$$\text{Spur}(U' \mathbf{H}) = \sum_{n=1}^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) \text{Spur}(P_{[\varphi_n]} \mathbf{H}) =$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} (U \varphi_n, \varphi_n) (\mathbf{H} \varphi_n, \varphi_n) = \sum_{m, n=1}^{\infty} (U \varphi_m, \varphi_n) (\mathbf{H} \varphi_n, \varphi_m) = \text{Spur}(U \mathbf{H});$$

это должно выполняться и из-за коммутативности R и \mathbf{H} (т. е. из-за одновременной измеримости \mathfrak{R} и энергии). Поэтому искомый максимум будет таким же, как если бы мы ограничились операторами U' , т. е. статистическими операторами с собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и будет достигаться как раз на этих функциях.

Итак, пусть $U = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[\varphi_n]}$, и так как все операторы U , UH и $U \ln U$ обладают собственными функциями φ_n , но собственными значениями w_n , $W_n w_n$ и $w_n \ln w_n$ соответственно, то речь идет о том, чтобы достичь максимума для $-N \times \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$ при дополнительных условиях $\sum_{n=1}^{\infty} w_n = 1$ и $\sum_{n=1}^{\infty} W_n w_n = E$. Но это в точности та же задача, что и встающая в соответствующей проблеме равновесия в обычной теории газов²⁰¹⁾, и поэтому она решается так же. По известным правилам нахождения экстремумов, для максимальной системы чисел w_1, w_2, \dots должно выполняться

$$\frac{\partial}{\partial w_n} \left(\sum_{m=1}^{\infty} w_m \ln w_m \right) + \alpha \frac{\partial}{\partial w_n} \left(\sum_{m=1}^{\infty} w_m \right) + \beta \frac{\partial}{\partial w_n} \left(\sum_{m=1}^{\infty} W_m w_m \right) = 0,$$

где α и β — подходящие постоянные и $n = 1, 2, \dots$. Это значит, что

$$(\ln w_n + 1) + \alpha + \beta W_n = 0, \quad w_n = e^{-1-\alpha-\beta W_n} = a e^{-\beta W_n},$$

где вместо α введена постоянная $a = e^{-1-\alpha}$. Из $\sum_{n=1}^{\infty} w_n = 1$ следует, что $a = \frac{1}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta W_n}}$, и поэтому

$$w_n = \frac{e^{-\beta W_n}}{\sum_{m=1}^{\infty} e^{-\beta W_m}},$$

а из-за $\sum_{n=1}^{\infty} W_n w_n = E$ должно выполняться

$$\frac{\sum_{n=1}^{\infty} W_n e^{-\beta W_n}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta W_n}} = E,$$

что фиксирует β . Если ввести, как обычно, «сумму состояний»

$$Z(\beta) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta W_n} = \text{Spur}(e^{-\beta H})$$

²⁰¹⁾ Cf. M. Planck, Theorie der Wärmestrahlung, Leipzig, 1913.

(ср. сюда и далее прим. ¹⁹⁷⁾ на стр. 277), то будет

$$Z'(\beta) = - \sum_{n=1}^{\infty} W_n e^{-\beta W_n} = \text{Spur}(He^{-\beta H}),$$

и следовательно, условие для β будет гласить

$$-\frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} = E.$$

$\left(\text{Мы допустили здесь еще, что } \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta W_n} \text{ и } \sum_{n=1}^{\infty} W_n e^{-\beta W_n} \text{ сходятся для всех } \beta > 0, \text{ т. е. что для } n \rightarrow \infty \text{ значения } W_n \rightarrow \infty, \text{ и притом достаточно быстро. Например, хватят требования } \frac{W_n}{\ln n} \rightarrow \infty. \right)$ Для самого U возникает следующее выражение:

$$U = \sum_{n=1}^{\infty} a e^{-\beta W_n} P_{[\varphi_n]} = a e^{-\beta H} = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Spur}(e^{-\beta H})} = \frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)}.$$

Итак, свойства равновесного ансамбля U , которые фиксируются заданием значения E или β , т. е. зависят, как то и должно было быть, от одного параметра, можно определить с помощью методов, обычных в кинетической теории газов.

Энтропия нашего ансамбля будет равна

$$\begin{aligned} S &= -N \times \text{Spur}(U \ln U) = -N \times \text{Spur}\left(\frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)} \ln \frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)}\right) = \\ &= -\frac{N\kappa}{Z(\beta)} \text{Spur}(e^{-\beta H} (-\beta H - \ln Z(\beta))) = \\ &= \frac{\beta N\kappa}{Z(\beta)} \text{Spur}(He^{-\beta H}) + \frac{\ln Z(\beta) N\kappa}{Z(\beta)} \text{Spur}(e^{-\beta H}) = \\ &= N\kappa \left[-\frac{\beta Z'(\beta)}{Z(\beta)} + \ln Z(\beta) \right], \end{aligned}$$

а полная энергия

$$NE = -N \frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)}$$

(эту полную энергию, а не саму E надо ставить в параллель к S). Тем самым U , S и NE выражены через β . Вместо того чтобы выражать β через E , будет практичнее найти температуру T равновесной смеси и свести все к ней. Это делается так: Приведем нашу равновесную смесь в соприкосновение с тепловым резервуаром температуры T' , чтобы она могла перенять от него энергию NdE , при этом (по смыслу обоих начал) суммарная энергия не должна измениться,

а энтропия — уменьшиться. Тепловой резервуар теряет при этом энергию $N dE$, поэтому его энтропия увеличивается на $-\frac{N dE}{T'}$, и в то же время должно быть

$$dS - \frac{N dE}{T'} = \left(\frac{dS}{NdE} - \frac{1}{T'} \right) NdE \geq 0.$$

С другой стороны, конечно, $N dE \geq 0$, судя по тому $T' \leq T$, поскольку более холодные тела получают энергию от более теплых; поэтому $T' \leq T$ означает, что

$$\frac{dS}{NdE} - \frac{1}{T'} \geq 0,$$

т. е. что

$$T' \leq \frac{NdE}{dS} = \frac{\frac{N}{d\beta}}{\frac{dS}{d\beta}}.$$

Поэтому

$$T = \frac{N \frac{dE}{d\beta}}{\frac{dS}{d\beta}} = -\frac{1}{\kappa} \frac{\left(\frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} \right)'}{\left(\ln Z(\beta) - \beta \frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} \right)'} = -\frac{1}{\kappa} \frac{\left(\frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} \right)'}{-\beta \left(\frac{Z'(\beta)}{Z(\beta)} \right)'} = \frac{1}{\kappa \beta},$$

т. е.

$$\beta = \frac{1}{\kappa T}.$$

Тем самым все величины U , S и NE представлены как функции температуры.

Аналогия полученных выше выражений для энтропии, равновесного ансамбля и т. п., соответствующим результатам термодинамической теории, основывающейся на классической механике, сразу бросается в глаза. Прежде всего, энтропия — $N\kappa \text{Spur}(U \ln U)$. Смесь

$U = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[\varphi_n]}$ — это смесь ансамблей $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$ в соотношениях $w_1 : w_2 : \dots$, т. е. Nw_1 систем φ_1 , Nw_2 систем φ_2 , \dots Больцманову энтропию этого ансамбля можно получить с помощью «термодинамической вероятности» $\frac{N!}{(Nw_1)!(Nw_2)!\dots}$, она будет равна ее κ -кратному логарифму (прим. 201) на стр. 289). Поскольку N велико, то мы вправе приблизить факториал формулой Стирлинга $x! \approx \sqrt{2\pi x} e^{-x} x^x$; тогда $\kappa \ln \frac{N!}{(Nw_1)!(Nw_2)!\dots}$ переходит в своей существенной части в $-N\kappa \sum_{n=1}^{\infty} w_n \ln w_n$, а это как раз и есть $-N\kappa \text{Spur}(U \ln U)$.

Далее, для равновесного ансамбля у нас было $U = e^{-\frac{H}{kT}}$ (мы опускаем здесь численный множитель $\frac{1}{Z(\beta)}$); это равно $\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{W_n}{kT}} P_{[\varphi_n]}$, т. е. представляет собой смесь состояний $P_{[\varphi_1]}, P_{[\varphi_2]}, \dots$, т. е. смесь стационарных состояний с энергиями W_1, W_2, \dots и с (относительными) весами $e^{-\frac{W_1}{kT}} : e^{-\frac{W_2}{kT}} : \dots$. Если какое-либо собственное значение энергии многократно, например $W_{n_1} = \dots = W_{n_v} = W$, то смесь $P_{[\varphi_{n_1}]} + \dots + P_{[\varphi_{n_v}]}$ войдет с весом $e^{-\frac{W}{kT}}$, т. е. правильно нормированный ансамбль $\frac{1}{v} (P_{[\varphi_{n_1}]} + \dots + P_{[\varphi_{n_v}]})$ (ср. начало IV.3) — с весом $ve^{-\frac{W}{kT}}$. Но как раз так и определяется классический «канонический» ансамбль (если отвлечься от появления специфически квантовомеханического образования $\frac{1}{v} (P_{[\varphi_{n_1}]} + \dots + P_{[\varphi_{n_v}]})$; это так называемая теорема Больцмана (см. прим. ²⁰¹ на стр. 289).

Для $T \rightarrow \infty$ веса $e^{-\frac{W_n}{kT}}$ стремятся к 1, следовательно, наш $U \rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} P_{[\varphi_n]} = 1$. Таким образом, $U = 1$ является абсолютным состоянием равновесия в случае, когда нет энергетических ограничений, — результат, который мы уже получили в IV.3. Мы видим, что «априорная равновероятность квантовых орбит» (имеются в виду простые, невырожденные; в общем случае кратность уровня является «априорным весом», ср. сказанное выше) возникает в этой теории сама собой.

Столи установить, сколь много может быть высказано относительно равновесного ансамбля U заданной энергии нетермодинамически, т. е. на основе только тех обстоятельств, что U стационарен (не меняется с течением времени, процесс 1) и что он остается неизменным при всех измерениях, не затрагивающих энергии (т. е. при измерениях величин, измеримых одновременно с энергией; процесс 2, с коммутирующими R и H , т. е. с $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, являющимися собственными функциями H).

Первое означает, в силу дифференциального уравнения $\frac{\partial}{\partial t} U = \frac{2\pi i}{\hbar} (UH - HU)$, только, что H и U коммутируют. Последнее утверждает, что если $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ можно использовать в качестве полной системы собственных функций для H , то $U = U'$, т. е.

$\varphi_1, \varphi_2, \dots$ будут собственными функциями и для U . Пусть соответствующими собственными значениями H будут W_1, W_2, \dots , а для $U - w_1, w_2, \dots$ Если $W_j = W_k$, то мы можем заменить для H

функции φ_j, φ_k на $\frac{\varphi_j + \varphi_k}{\sqrt{2}}, \frac{\varphi_j - \varphi_k}{\sqrt{2}}$; поэтому эти комбинации тоже

будут собственными функциями U , откуда следует, что $w_j = w_k$. Поэтому можно построить функцию $F(x)$, удовлетворяющую $F(W_n) = w_n$ ($n = 1, 2, \dots$), и тогда будет $F(H) = U$. Ясно, что этого достаточно, равно как и то, что это повлечет за собой коммутативность H и U .

Итак, на этом пути вполне выводится $U = F(H)$, однако установить вид $F(x)$ (т. е. что, как мы знаем, $F(x) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta x}$, $\beta = \frac{1}{kT}$) не удается. Из условий $\text{Spur } U = 1$ и $\text{Spur}(UH) = E$ получается еще, что

$$\sum_{n=1}^{\infty} F(W_n) = 1 \quad \text{и} \quad \sum_{n=1}^{\infty} W_n F(W_n) = E.$$

но этими результатами метод исчерпывает себя полностью.

4. Макроскопическое измерение

Хотя наше выражение для энтропии является, как мы видели, образованием, совершенно аналогичным классической энтропии, представляется удивительным, что при временном развитии системы (процесс 2.) она остается постоянной и увеличивается только при измерениях (процесс 1.), — в классической теории (где измерения вообще не играют роли) она ведь, как правило, увеличивалась уже при обычном механическом развитии системы во времени. Поэтому этот кажущийся парадокс нуждается в разъяснении.

Нормальная процедура классической термодинамики протекает следующим образом. Берется сосуд объема V , в правой половине которого (объем $\frac{V}{2}$, отделенный от другой половины промежуточной стенкой) находятся M молекул (ради простоты — идеального) газа температуры T . Если мы расширим этот газ изотермически и обратимо до объема V (давая промежуточной перегородке отодвинуться под действием давления газа, используя освобождающуюся механическую работу и поддерживая температуру газа постоянной большим тепловым резервуаром температуры T), то энтропия вовне (в резервуаре) уменьшится на $M \times \ln 2$ (ср. прим. ¹⁹⁵) на стр. 275), следовательно, энтропия газа на столько же возрастет. Если же,

напротив, мы просто вытянем перегородку, то газ проникает в свободную левую половину, объем возрастет до \mathcal{V}^2 , т. е. энтропия увеличится на $M \ln 2$, без того, чтобы создалась какая-либо компенсация. Процесс будет, таким образом, необратимым, и энтропия возрастет в ходе простого механического развития системы во времени (именно, в ходе диффузии). Почему же наша теория не приводит ни к чему похожему?

Соотношения становятся всего яснее, если положить $M = 1$; для такого одномолекулярного газа термодинамика все еще справедлива, и то, что его энтропия возрастает на $\times \ln 2$ при удвоении объема, это верно. Однако эта разница на $\times \ln 2$ действительно есть лишь до тех пор, пока мы на самом деле не знаем о молекуле ничего более того, что она находится в объеме $\frac{\mathcal{V}}{2}$ или соответственно \mathcal{V}^2 . Если, например, молекула находится в объеме \mathcal{V}^2 , но известно, расположена она справа или слева от середины сосуда, то достаточно вставить посередине перегородку и дать молекуле оттеснить ее изотермически и обратимо к левому или правому концу сосуда. При этом будет совершена механическая работа $\times T \ln 2$, т. е. эта энергия отнимется от теплового резервуара. В результате молекула опять окажется в объеме \mathcal{V}^2 , однако мы уже не будем знать, располагается ли она справа или слева от середины, но зато произошло ведь компенсирующее уменьшение энтропии (в резервуаре) на $\times \ln 2$. Иными словами, мы обменяли наше знание на уменьшение энтропии на $\times \ln 2$ ²⁰²⁾. Можно сказать, что энтропия в объеме \mathcal{V}^2 будет такой же, что и в объеме $\frac{\mathcal{V}}{2}$, если только известно, в какой половине сосуда расположена молекула. Поэтому, если бы мы перед диффузией знали молекулу (т. е. ее положение и импульс) с полной подробностью, то для каждого момента после диффузии можно было бы вычислить, расположена она в правой или в левой половине, т. е. энтропия вообще бы не возросла. Только тогда, когда в нашем распоряжении имеется одна лишь макроскопическая информация, что первоначальный объем составлял $\frac{\mathcal{V}}{2}$, в процессе диффузии действительно происходит возрастание энтропии.

Итак, для классического наблюдателя, знающего все импульсы и координаты, энтропия постоянна, а именно равна нулю, так как

²⁰²⁾ Сцилард показал (ср. прим. ¹⁹⁴⁾ на стр. 273), что это «знание» нельзя также и добить дешевле, чем ценой компенсирующего увеличения энтропии на $\times \ln 2$: в общем случае $\times \ln 2$ — это «термодинамическая цена» знания, какой из двух альтернативных случаев осуществляется. Для любых попыток провести описанный выше процесс в случае, когда неизвестно, в какой половине сосуда находится молекула, можно доказать их несостоятельность, хотя они и оперируют зачастую с весьма сложными автоматическими механизмами.

больцманова «термодинамическая вероятность» (ср. выше, прим. 201) на стр. 289) равна тогда 1, — как раз как в нашей теории для состояний, $U = P_{[\varphi]}$, которые ведь тоже отвечают наибольшей возможной степени знаний наблюдателя относительно системы.

Изменения энтропии со временем касаются, следовательно, той ситуации, когда наблюдатель знает не всё или может выяснить (измерить) не всё, что принципиально измеримо. Его чувства как раз позволяют ему воспринимать только так называемые макроскопические величины. Это разъяснение изложенного в начале параграфа кажущегося противоречия налагает, однако, на нас обязанность найти для квантовомеханических ансамблей точный аналог классической макроскопической энтропии, т. е. энтропии, рассматриваемой с точки зрения такого наблюдателя, который может мерить не все величины, но лишь некоторые избранные, именно — макроскопические, величины, да и эти — в зависимости от обстоятельств — только с ограниченной точностью.

В III.3 мы узнали, что все измерения с ограниченной степенью точности могут быть заменены абсолютно точными измерениями других величин, являющихся функциями от них и обладающих чисто дискретными спектрами. Если \mathfrak{R} — такая величина, R — ее оператор, а $\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \dots$ — отличные друг от друга из числа ее собственных значений, то измерение \mathfrak{R} равносильно ответу на вопросы: «Равно ли \mathfrak{R} значению $\lambda^{(1)}$?», «Равно ли \mathfrak{R} значению $\lambda^{(2)}$?», ... Мы могли бы, конечно, сказать и непосредственно: если величина \mathfrak{S} с оператором S должна быть измерена с ограниченной точностью, например надо рассудить, в каком из интервалов $c_{n-1} < \lambda \leq c_n$ она лежит ($\dots < c_{-2} < c_{-1} < c_0 < c_1 < c_2 < \dots$; $c_n \rightarrow +\infty$ или к $-\infty$ при $n \rightarrow +\infty$ или к $-\infty$), то речь идет об ответе на все вопросы: «Лежит ли \mathfrak{S} в $c_{n-1} < \lambda \leq c_n$?», $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Но таким вопросам соответствуют, согласно III.5, проекционные операторы E , чьи величины \mathfrak{E} (принимающие только два значения 0 и 1) собственно и подлежат измерению. В наших примерах величинами \mathfrak{E} будут функции $F_n(\mathfrak{R})$, $n = 1, 2, \dots$, где

$$F_n(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{для } \lambda = \lambda^{(n)}, \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

или же функции $G_n(\mathfrak{S})$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, где

$$G_n(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{для } c_{n-1} < \lambda \leq c_n, \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

а операторами E будут соответственно $F_n(R)$ или $G_n(S)$. Итак, вместо того чтобы задавать макроскопически измеримые величины \mathfrak{S} вместе с достижимой точностью измерения, можно задать вопросы \mathfrak{E} ,

на которые могут ответить макроскопические измерения или же их проекционные операторы E (ср. III. 5). Как раз это является отличительным признаком макроскопического наблюдателя — задание его E (классически мы характеризовали бы его, например, тем, что он в состоянии измерить в каждом кубическом сантиметре занимаемого газом объема температуру и давление — возможно с определенной ограниченной точностью, — но ничего другого) ²⁰³⁾.

В самой природе макроскопического измерения заключено, что все, измеримое вообще, измеримо тотчас же, т. е. что все вопросы, на которые можно ответить макроскопически, тотчас же находят свой ответ; это значит, что все E перестановочны друг с другом. Как раз потому ведь неодновременная измеримость квантовомеханических величин и произвела сначала столь парадоксальное впечатление, что это понятие чуждо макроскопическому образу восприятия. Благодаря большому принципиальному значению этого пункта будет уместно обсудить его несколько подробнее.

Представим себе яснее способ, которым две явно не измеримые одновременно величины, например координата q и импульс p (ср. III. 4), измеряются одновременно с ограниченной точностью. Пусть средними ошибками измерения будут ϵ и η (согласно соотношению неопределенностей $\epsilon\eta \sim h$), обсуждение в III. 4 показало, что при таких претензиях к точности одновременное измерение в самом деле возможно, — измерение положения (q) проводится не слишком коротковолновым светом, а измерение импульса (p) — не слишком длинными цугами волн. Когда все подготовлено таким образом, то собственно измерение состоит в том, что как-либо идентифицируются, например фотографируются, два световых кванта — один световой квант, отклонившийся за счет комптон-эффекта при измерении q , и второй, отразившийся при измерении p с эффектом Доплера, свою частоту изменивший и для обнаружения этой частоты соответствующим оптическим устройством (призмой, дифракционной решеткой) отклоненный, световой квант. Итак, в конце опыта мы имеем дело с двумя световыми квантами или даже просто с двумя фотографическими пластинками, и из направления этих квантов или из расположения почернений на пластинках мы должны вычислить q и p . Здесь следует отметить, что ничто не препятствует нам определить эти два направления или места этих двух почернений сколь угодно точно, — ибо очевидно, что это — одновременно измеримые величины (это импульсы или соответственно координаты двух различных объектов), — но это нисколько не поможет измерению q и p . Действительно, как было показано в III. 4, связь этих величин с q и p так устроена, что для последних как раз сохраняются неточности ϵ и η (даже при

²⁰³⁾ Такая характеристика макроскопического наблюдателя восходит к Вигнеру.

совершенно точном знании первых), и нельзя устроить опыт так, чтобы стало $\epsilon\eta \ll h$.

Итак, если мы введем эти два направления или два положения почернений как самостоятельные физические величины, их операторы пусть будут называться Q' и P' , то видим, что Q' и P' совершенно точно перестановочны, но принадлежащие q и p операторы Q и P можно выразить с их помощью не аккуратнее, чем с точностью до ϵ и η . Пусть относящимися к Q' и P' величинами будут q' и p' ; та интерпретация, что макроскопически измеримые величины — это, собственно, не сами q и p , но q' и p' , совершенно естественна и полностью соответствует нашему постулату об одновременной измеримости всех макроскопических величин.

Целесообразно трактовать выясненное обстоятельство вообще как характеристику макроскопического способа рассмотрения. Это рассмотрение состоит тогда в том, чтобы заменить все возможные операторы A, B, C, \dots , как правило, не коммутирующие друг с другом, другими операторами A', B', C', \dots , функциями которых они приближенно являются и которые коммутируют друг с другом. Поскольку эти функции операторов A', B', C', \dots можно тоже обозначить через A', B', C', \dots , то мы вправе сказать, что A', B', C', \dots являются приближениями для A, B, C, \dots , но коммутируют друг с другом. Если порядок величины операторов $A' - A, B' - B, C' - C, \dots$ задан числами $\epsilon_A, \epsilon_B, \epsilon_C, \dots$, то мы видим, что произведение $\epsilon_A \epsilon_B$ будет такого порядка, как $AB - BA$ (что ведь, вообще говоря, $\neq 0$) и т. д., — это определяет границы достижимой степени приближения. Разумно, конечно, уже при задании A, B, C, \dots ограничиться лишь такими операторами, чьи физические величины хоть в каком-либо приближении макроскопически постижимы.

Эти чисто качественные рассуждения остаются пустой программой, пока мы не сможем показать, что они требуют чего-либо математически проводимого. Остановимся поэтому на том, чтобы обсудить для характерного случая Q и P вопрос о существовании Q' и P' чисто математически. Итак, пусть заданы два положительных числа ϵ и η с $\epsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$; мы ищем два коммутирующих оператора Q' и P'

таких, чтобы $Q' - Q$ и $P' - P$ имели бы (в некотором, еще подлежащем более точному определению смысле) порядок величины ϵ и η .

Мы достигнем этого с двумя совершенно точно измеримыми величинами q' и p' , т. е. такими, чтобы Q' и P' обладали чисто дискретным спектром; поскольку они перестановочны, то существует состоящая из их общих собственных функций полная ортонормированная система $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (ср. II. 10). Соответствующие собственные значения Q' и P' пусть будут a_1, a_2, \dots и b_1, b_2, \dots , так что

$Q' = \sum_{n=1}^{\infty} a_n P_{[\varphi_n]}$ и $P' = \sum_{n=1}^{\infty} b_n P_{[\varphi_n]}$. То, что их измерение — пусть проводимое так, что после него возникает одно из состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ (измеряя, например, некоторую величину \mathfrak{R} , которой соответствует оператор R с собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и всеми различными собственными значениями c_1, c_2, \dots , тогда Q' и P' будут функциями R), — включает приближенно и измерение Q и P , видно из следующего: В состоянии φ_n операторы Q и P выражаются приближенно через соответствующие значения Q' и P' , т. е. через a_n и b_n , в том смысле, что их дисперсии вблизи этих значений малы. Этими дисперсиями будут математические ожидания величин $(q - a_n)^2$ и $(p - b_n)^2$, т. е.

$$((Q - a_n 1)^2 \varphi_n, \varphi_n) = \| (Q - a_n 1) \varphi_n \|^2 = \| Q \varphi_n - a_n \varphi_n \|^2$$

и

$$((P - b_n 1)^2 \varphi_n, \varphi_n) = \| (P - b_n 1) \varphi_n \|^2 = \| P \varphi_n - b_n \varphi_n \|^2.$$

Они будут масштабами для квадратов разностей между Q' и Q или соответственно между P' и P , т. е. должны примерно равняться ε^2 или η^2 . Итак, мы требуем, чтобы

$$\| Q \varphi_n - a_n \varphi_n \| \leq \varepsilon; \quad \| P \varphi_n - b_n \varphi_n \| \leq \eta \dots$$

Поэтому, вместо того чтобы говорить о Q' и P' , целесообразнее просто найти полную ортонормированную систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, для которой при соответствующем выборе a_1, a_2, \dots и b_1, b_2, \dots выполнялись бы приведенные оценки.

Отдельные φ (с $\|\varphi\|=1$), для которых при соответственно подобранных a и b выполняется

$$\| Q \varphi - a \varphi \| = \varepsilon \quad \text{и} \quad \| P \varphi - b \varphi \| = \eta,$$

мы уже знаем из III. 4:

$$\varphi_{\rho, \sigma, \gamma} = \varphi_{\rho, \sigma, \gamma}(q) = \left(\frac{2\gamma}{h} \right)^{1/4} e^{-\frac{\pi\gamma}{h}(q-\sigma)^2 + \frac{2\pi\rho}{h}iq},$$

где мы из-за $\varepsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$ опять положили $\varepsilon = \sqrt{\frac{h\gamma}{4\pi}}$, $\eta = \sqrt{\frac{h}{4\pi\gamma}}$ (т. е. $\gamma = \frac{\varepsilon}{\eta}$) и где надо выбрать $a = \sigma$ и $b = \rho$. Речь идет теперь о том, чтобы составить из этих $\varphi_{\rho, \sigma, \gamma}$ полную ортонормированную систему. Поскольку ρ — это математическое ожидание оператора Q , а σ — оператора P , то хотелось бы допустить, что ρ и σ пробегают системы чисел независимо друг от друга, и притом так, чтобы первая имела примерно плотность ε , а вторая — η . В действительности оказывается

удобным выбрать единицы $2\sqrt{\pi \cdot \varepsilon} = \sqrt{h\gamma}$ и $2\sqrt{\pi \cdot \eta} = \sqrt{\frac{h}{\gamma}}$, так

чтобы было $\rho = \sqrt{h\gamma} \mu$, $\sigma = \sqrt{\frac{h}{\gamma}} \nu$ ($\mu, \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).
Итак, функции

$$\psi_{\mu, \nu} = \varphi_{\sqrt{h\gamma} \mu, \sqrt{\frac{h}{\gamma}} \nu}, \quad (\mu, \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

должны будут играть роль φ_n ($n = 1, 2, \dots$); то, что вместо одного индекса у нас появились два — μ и ν , — конечно, несущественно.

Однако эти $\psi_{\mu, \nu}$ пока еще не ортогональны. (Нормированными они являются, и условия

$$\|Q\psi_{\mu, \nu} - \sqrt{h\gamma} \mu \psi_{\mu, \nu}\| = \epsilon, \quad \|P\psi_{\mu, \nu} - \sqrt{\frac{h}{\gamma}} \nu \psi_{\mu, \nu}\| = \eta$$

выполнены.) Если мы «ортогонализируем» (ср. II. 2, док. *теоремы 8.*) их методом Шмидта (в какой-нибудь последовательности), то для ортонормированной системы $\psi'_{\mu, \nu}$, которая тогда возникнет, можно будет без труда доказать полноту и установить справедливость оценок

$$\|Q\psi'_{\mu, \nu} - \sqrt{h\gamma} \mu \psi'_{\mu, \nu}\| \leq C\epsilon; \quad \|P\psi'_{\mu, \nu} - \sqrt{\frac{h}{\gamma}} \nu \psi'_{\mu, \nu}\| \leq C\eta,$$

причем для C получится значение ~ 60 . Доказательство этих утверждений потребовало бы довольно громоздких, но не требующих каких-либо новых точек зрения, выкладок, которые мы обойдем. Множители $C \sim 60$ не играют большой роли, поскольку измеренная в макроскопических (CGS) единица величина $\epsilon\eta = \frac{h}{4\pi}$ оказывается совершенно необычайной малости ($\sim 10^{-28}$!).

Итак, мы можем сказать теперь, подводя итоги, что допущение о коммутативности всех макроскопических операторов мотивировано; следовательно, в частности, это так и для введенных выше макроскопических проекционных операторов E .

Операторы E отвечают всем вопросам \mathfrak{E} , на которые можно ответить с макроскопической точки зрения, т. е. всем разбиениям на различные случаи, относящиеся к исследуемой системе, которые могут быть проведены макроскопически. Как мы видели, они все перестановочны; согласно III. 5, вместе с E к ним относится и $1 - E$, далее, вместе с E и F — также и операторы EF , $E + F - EF$ и $E - EF$. Естественно допустить, что их существует лишь конечное число: E_1, \dots, E_n . Введем на мгновение обозначение $E^{(+)} = E$ и $E^{(-)} = 1 - E$ и рассмотрим все 2^n произведений $E_1^{(s_1)} \dots E_n^{(s_n)}$ ($s_1, \dots, s_n = \pm 1$). Любые два различных из них обладают произведением нуль, так как если $E_1^{(s_1)} \dots E_n^{(s_n)}$ и $E_1^{(t_1)} \dots E_n^{(t_n)}$ — два таких произведения, у которых, например, $s_v \neq t_v$, то в их произведение войдут множители $E_v^{(s_v)}$ и $E_v^{(t_v)}$, т. е. $E_v^{(t_v)} = E$ и $E_v^{(-)} = 1 - E$, произведение которых равно нулю.

Каждое E_v является суммой нескольких таких произведений, именно

$$E_v = \sum_{s_1, \dots, s_{v-1}, s_{v+1}, \dots, s_n = \pm 1} E_1^{(s_1)} \dots E_{v-1}^{(s_{v-1})} \cdot E_v^{(+)} \cdot E_{v+1}^{(s_{v+1})} \dots E_n^{(s_n)}.$$

Если мы назовем те из этих произведений, которые отличны от нуля, E'_1, \dots, E'_m (ясно, что $m \leq 2^n$, но должно быть даже $m \leq n - 1$, так как все они должны встретиться среди E_1, \dots, E_n и не равны нулю), то будет $E_\mu' \neq 0, E_\mu'E_v' = 0$ для $\mu \neq v$ и каждый E_μ' есть сумма нескольких E_v' . (Из последнего следует также, что $n = 2^m$.) Заметим, что никогда не может случиться, что $E_\mu + E_v = E_\rho$, исключая $E_\mu = 0, E_v = E'_\rho$ или $E_\mu = E'_\rho, E_v = 0$, так как иначе E_μ и E_v были бы суммами нескольких E_π' , следовательно E_ρ' — суммой ≥ 2 операторов E_π' (возможно, с повторениями). По теоремам 15. и 16. из II. 4 все эти операторы были бы отличны друг от друга, поскольку их ≥ 2 , и от E_ρ' . Но поэтому должны были бы равняться нулю их произведения с E_ρ' , следовательно и произведение их суммы, что противоречит тому, что эта должна была быть равной E_ρ' .

Итак, соответствующие операторам E'_1, \dots, E'_m свойства $\mathfrak{E}'_1, \dots, \mathfrak{E}'_m$ — это макроскопические свойства следующего рода: Ни одно из них не абсурдно. Любые два взаимно исключают друг друга. Любое макроскопическое свойство оказывается расщепимым на некоторые из них. Ни одно из них нельзя дальнейшим расщеплением разложить на два более точных макроскопических свойства. Итак, $\mathfrak{E}'_1, \dots, \mathfrak{E}'_m$ осуществляют самое глубокое макроскопическое различие случаев, которое вообще может быть сделано; они макроскопически неразложимы.

В дальнейшем мы не будем требовать конечности их числа, но только существования макроскопически неразложимых свойств $\mathfrak{E}'_1, \mathfrak{E}'_2, \dots$. Соответствующие проекционные операторы пусть будут E'_1, E'_2, \dots , опять все $\neq 0$, любые два ортогональные и такие, что каждый макроскопический E есть сумма некоторых из них.

Поэтому и 1 должна быть суммой некоторых из них; не войди некоторый E_v' в их число, он был бы к ней, т. е. к 1, ортогонален, т. е. было бы $E'_1 \cdot E'_v \cdot 1 = 0$, что невозможно. Поэтому $E'_1 + E'_2 + \dots = 1$. Мы опустим теперь штрихи и будем писать $\mathfrak{E}_1, \mathfrak{E}_2, \dots$ и E_1, E_2, \dots . Относящиеся к ним замкнутые линейные многообразия будут называться $\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \dots$, а числа их измерений — s_1, s_2, \dots

Будь все $s_n = 1$, т. е. \mathfrak{M}_n одномерны, то было бы и $\mathfrak{M}_n = [\varphi_n], E_n = P_{[\varphi_n]}$ и, из-за $E_1 + E_2 + \dots = 1, \varphi_1, \varphi_2, \dots$ — полной ортонормированной системой. Это означало бы, что уже макроскопические измерения позволяли бы полностью установить состояние рассматри-

ваемой системы. Поскольку в нормальном случае это не так, то, вообще говоря, будет $s_n > 1$ и даже $s_n \gg 1$.

Заметим кстати, что операторы E_n , являющиеся элементарными кирпичиками макроскопического описания мира, в некотором смысле соответствуют обычному в классической теории разделению на клетки фазового пространства. Что они в состоянии приближенно передавать поведение некоммутирующих операторов, в частности поведение столь важных для фазового пространства Q и P , — мы уже видели.

Какой же энтропией обладает смесь U для макроскопического наблюдателя, чьи неразложимые проекционные операторы — это E_1, E_2, \dots ? Или, более точно, какую максимальную энтропию может выиграть такой наблюдатель при преобразовании U в V , т. е. какое уменьшение энтропии (оно может быть, естественно, ≤ 0) во внешних объектах в состоянии он в лучшем случае создать в качестве компенсации за переход $U \rightarrow V$?

Прежде всего следует подчеркнуть, что два ансамбля U и U' , для которых все E_1, E_2, \dots обладают одинаковыми ожидаемыми значениями, т. е. такие, что $\text{Spur}(UE_n) = \text{Spur}(U'E_n)$ ($n = 1, 2, \dots$) он вовсе не может различить друг от друга. Правда, он смог бы, возможно, сделать это спустя некоторое время, так как U и U' эволюционируют согласно 2. и равенство $\text{Spur}(AUA^{-1}E_n) = \text{Spur}(AU'A^{-1}E_n)$

с $A = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t H}$ не должно было бы более выполняться²⁰⁴⁾, но мы ведь рассматриваем только измерения, которые можно выполнить тотчас. Итак, при изложенных выше условиях мы вправе считать U и U' неразличимыми. Далее, наблюдатель может употреблять лишь такие полупроницаемые стенки, которые пропускают ϕ некоторых E_n и отражают все остальные. Этого оказывается достаточно, чтобы, как без труда можно убедиться, следуя методу V. 2, перевести

некоторый $U' = \sum_{n=1}^{\infty} x_n E_n$ в некоторый $V' = \sum_{n=1}^{\infty} y_n E_n$ обратимым образом, так что для разности энтропий сохранится выражение

$$\times \text{Spur}(U' \ln U') - \times \text{Spur}(V' \ln V'),$$

т. е. энтропия U' будет равна $\times \text{Spur}(U' \ln U')$. Правда, надо

²⁰⁴⁾ Если E_n коммутирует с H , следовательно и с A , то равенство все же выполняется из-за

$$\text{Spur}(A \cdot UA^{-1}E_n) = \text{Spur}(UA^{-1}E_n \cdot A) = \text{Spur}(UA^{-1}AE_n) = \text{Spur}(UE_n).$$

Но все E_n , т. е. все макроскопические величины, все они ни в коей мере не коммутируют с H . Многие из них, например центр тяжести какого-либо газа при диффузии, изменяются со временем вполне заметно. Это значит, что $\text{Spur}(UE_n)$ не постоянен. Поскольку все макроскопические величины перестановочны, то H ни в коем случае не есть макроскопическая величина, т. е. энергию нельзя совершенно точно измерить макроскопически. С этим можно согласиться без дальнейшего.

заметить, что, — чтобы такие U' со свойством $\text{Spur } U' = 1$ вообще существовали, — шпуры $\text{Spur } E_n$, т. е. числа s_n , должны быть конечны. Поэтому мы примем, что все s_n конечны. Оператор U' обладает s_1 -кратным собственным значением x_1 , s_2 -кратным собственным значением x_2 , ..., поэтому — $U' \ln U'$ будет обладать s_1 -кратным собственным значением — $x_1 \ln x_1$, s_2 -кратным собственным значением — $x_2 \ln x_2$, ... Таким образом, $\text{Spur } U' = 1$ означает, что $\sum_{n=1}^{\infty} s_n x_n = 1$,

а энтропия равняется — $\kappa \sum_{n=1}^{\infty} s_n x_n \ln x_n$. Из-за

$$U'E_m = \sum_{n=1}^{\infty} x_n E_n E_m = x_m E_m; \quad \text{Spur}(U'E_m) = x_m \text{Spur } E_m = s_m x_m,$$

будет $x_m = \frac{\text{Spur}(U'E_m)}{s_m}$, поэтому обсуждаемая энтропия будет равна

$$-\kappa \sum_{n=1}^{\infty} \text{Spur}(U'E_n) \ln \frac{\text{Spur}(U'E_n)}{s_n}.$$

Для произвольного U ($\text{Spur } U = 1$) энтропия тоже должна равняться

$$-\kappa \sum_{n=1}^{\infty} \text{Spur}(UE_n) \ln \frac{\text{Spur}(UE_n)}{s_n}.$$

Действительно, положи мы

$$x_n = \frac{\text{Spur}(UE_n)}{s_n}, \quad U' = \sum_{n=1}^{\infty} x_n E_n,$$

то будет $\text{Spur}(UE_n) = \text{Spur}(U'E_n)$, и поскольку U и U' неразличимы, то они должны обладать одной и той же энтропией.

Надо еще упомянуть, что эта энтропия всегда превосходит обыкновенную: всегда будет

$$-\kappa \sum_{n=1}^{\infty} \text{Spur}(UE_n) \ln \frac{\text{Spur}(UE_n)}{s_n} \geq -\kappa \text{Spur}(U \ln U),$$

и знак равенства достигается только для $U = \sum_{n=1}^{\infty} x_n E_n$. Согласно результатам V. 3, это гарантированно будет иметь место, если $U' = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Spur}(UE_n)}{s_n} E_n$ может быть создано из U несколькими (не обязательно макроскопическими) применениями процесса I., так как слева ведь стоит $-\kappa \text{Spur}(U' \ln U')$, а $U = \sum_{n=1}^{\infty} x_n E_n$ означает то же,

что и $U = U'$. Выберем ортонормированную систему $\varphi_1^{(n)}, \dots, \varphi_{s_n}^{(n)}$, растягивающую принадлежащее E_n линейное многообразие \mathfrak{M}_n ; из-за $\sum_{n=1}^{\infty} E_n = 1$ совокупность всех $\varphi_v^{(n)} (n = 1, 2, \dots; v = 1, \dots, s_n)$ образует полную ортонормированную систему. Пусть R — оператор, собственными функциями (со всеми различными собственными значениями) которого они являются, а \mathfrak{R} — его физическая величина. При измерении \mathfrak{R} из U получается, в силу 1.,

$$U'' = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{s_n} (U \varphi_v^{(n)}, \varphi_v^{(n)}) \cdot P_{[\varphi_v^{(n)}]}.$$

Положим теперь

$$\psi_{\mu}^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{s_n}} \sum_{v=1}^{s_n} e^{\frac{2\pi i}{s_n} \mu v} \varphi_v^{(n)} \quad (\mu = 1, \dots, s_n).$$

Функции $\psi_1^{(n)}, \dots, \psi_{s_n}^{(n)}$ образуют ортонормированную систему, которая растягивает то же замкнутое линейное многообразие \mathfrak{M}_n , что и $\varphi_1^{(n)}, \dots, \varphi_{s_n}^{(n)}$. Поэтому и $\psi_v^{(n)} (n = 1, 2, \dots; v = 1, \dots, s_n)$ образуют полную ортонормированную систему. Построим с этими собственными функциями оператор S и относящуюся к нему физическую величину \mathfrak{S} . Отметим еще, что выполняются следующие формулы:

$$(P_{[\varphi_v^{(n)}]} \psi_{\mu}^{(m)}, \psi_{\mu}^{(m)}) = \begin{cases} 0 & \text{для } m \neq n, \\ \frac{1}{s_n} & \text{для } m = n, \end{cases} \quad \sum_{v=1}^{s_n} P_{[\varphi_v^{(n)}]} = \sum_{v=1}^{s_n} P_{[\psi_v^{(n)}]} = E_n.$$

Поэтому при измерении \mathfrak{S} в силу 1. из U'' получится

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{s_m} (U'' \psi_{\mu}^{(m)}, \psi_{\mu}^{(m)}) P_{[\psi_{\mu}^{(m)}]} &= \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{s_m} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{s_n} (U \varphi_v^{(n)}, \varphi_v^{(n)}) (P_{[\varphi_v^{(n)}]} \psi_{\mu}^{(m)}, \psi_{\mu}^{(m)}) \right] P_{[\psi_{\mu}^{(m)}]} = \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{s_m} \left[\sum_{v=1}^{s_m} \frac{(U \varphi_v^{(m)}, \varphi_v^{(m)})}{s_m} \right] P_{[\psi_{\mu}^{(m)}]} = \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{s_m} \frac{\text{Spur}(UE_m)}{s_m} P_{[\psi_{\mu}^{(m)}]} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\text{Spur}(UE_m)}{s_m} E_m = U'. \end{aligned}$$

Таким образом, двух процессов 1. хватает, чтобы преобразовать U в U' , — и это все, в чем мы нуждались для доказательства.

Для состояний ($U = P_{[\varphi]}$, $\text{Spur}(UE_n) = (E_n\varphi, \varphi) = \|E_n\varphi\|^2$) эта энтропия

$$-\kappa \sum_{n=1}^{\infty} \|E_n\varphi\|^2 \ln \frac{\|E_n\varphi\|^2}{s_n}$$

не испытывает более тех зол, что «микроскопическая», — она, вообще говоря, не остается постоянной во времени (т. е. при процессе 2.) и не для всех состояний равна нулю. Действительно, что $\text{Spur}(UE_n)$, из которого строится наша энтропия, вообще говоря, не остается постоянным со временем, уже обсуждалось в прим.²⁰⁴⁾ (стр. 301). Легко выяснить, когда состояние $U = P_{[\varphi]}$ будет обладать энтропией 0: Поскольку $\frac{\|E_n\varphi\|^2}{s_n} \geqslant 0$ и $\leqslant 1$, то все слагаемые $\|E_n\varphi\|^2 \ln \frac{\|E_n\varphi\|^2}{s_n}$ в выражении для энтропии $\leqslant 0$, они должны были бы, следовательно, все обратиться в 0. Это требует, чтобы $\frac{\|E_n\varphi\|^2}{s_n} = 0$ или $= 1$. Первое означает, что $E_n\varphi = 0$, последнее — что $\|E_n\varphi\| = \sqrt{s_n}$. Поскольку, однако, $\|E_n\varphi\| \leqslant 1$, $s_n \geqslant 1$, то для последнего нужно $s_n = 1$ и $\|E_n\varphi\| = \|\varphi\|$, т. е. $E_n\varphi = \varphi$ или $s_n = 1$ и φ лежит в \mathfrak{M}_n . Это последнее не может, конечно, выполняться для двух различных n , но не может и не выполняться ни для одного, так как тогда было бы всегда $E_n\varphi = 0$, т. е., в силу $\sum_{n=1}^{\infty} E_n = 1$, $\varphi = 0$. Итак, надо, чтобы в точности для одного n φ лежала бы в \mathfrak{M}_n , и при этом было бы $s_n = 1$. Поскольку ранее мы установили, что, вообще говоря, все $s_n \geqslant 1$, то это невозможно. Итак, наша энтропия всегда > 0 .

Поскольку макроскопическая энтропия зависит от времени, то следующий вопрос, который нам надо разрешить, состоит в том, ведет ли она себя, как энтропия феноменологической термодинамики в действительном мире, т. е. возрастает ли она прогрессивно? В основанной на классической механике теории утвердительный ответ на этот вопрос получается через посредство так называемой H -теоремы Больцмана, но при этом приходится делать известные статистические допущения, так называемые «гипотезы беспорядка»²⁰⁵⁾. В квантовой

²⁰⁵⁾ Относительно классической H -теоремы ср. Boltzmann, Vorlesungen über Gasttheorie, Leipzig, 1896, равно как и чрезвычайно поучительное обсуждение у П. и Т. Эренфестов (см. прим.¹⁸⁵⁾ на стр. 267). «Гипотезы молекулярного беспорядка», которые могли бы занять в квантовой механике место соответствующих гипотез Больцмана, формулировал Паули (в зоннерфельдовом юбилейном сборнике, 1928), там же с их помощью доказывается H -теорема. Недавно автору удалось доказать и эргодическую теорему классической механики, ср. Proc. Nat. Ac., янв. и март 1930, равно как и усиление у G. D. Birkhoff, Proc. Nat. Ac., декабрь 1929, март 1930.

механике автору удалось доказать соответствующую теорему без предположений такого рода²⁰⁶). Более близкое знакомство с этим предметом, равно как и с теснейшим образом связанной с ним эргодической теоремой (ср. прим.²⁰⁶), где последняя также доказывается), завело бы нас слишком далеко, и мы должны отказаться от передачи этих исследований. Заинтересованного в этом направлении читателя мы отсылаем к приведенным работам *).

²⁰⁶⁾ Zs. f. Phys. 57, 30 (1929). (См. перевод этой статьи в конце книги.)

*) См. прим.²⁰⁶). Прим. ред.

ГЛАВА VI

ПРОЦЕСС ИЗМЕРЕНИЯ

1. Постановка задачи

В предыдущем рассмотрении мы выяснили, как относится квантовая механика к различным, причинным и статистическим, методам описания природы, и обнаружили своеобразную двойственность ее предписаний, которая не была еще исчерпывающе объяснена. Именно, мы нашли, что, с одной стороны, некоторое состояние φ преобразуется под действием оператора энергии H за время $0 \leq \tau \leq t$ в состояние φ' по закону

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \varphi_{\tau} = -\frac{2\pi i}{\hbar} H \varphi_{\tau} \quad (0 \leq \tau \leq t),$$

$$\varphi_0 = \varphi, \quad \varphi_t = \varphi',$$

или, иными словами,

$$\varphi' = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t H} \varphi,$$

т. е. чисто причинным образом. Смесь U преобразуется тогда соответственно в

$$U' = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t H} U e^{\frac{2\pi i}{\hbar} t H},$$

и в согласии с причинным изменением φ в φ' состояния $U = P_{[\varphi]}$ переходят при этом в состояния $U' = P_{[\varphi']}$ (процесс 2. в V.1). С другой стороны, при измерении — пусть, например, измеряющим некоторую величину с только простыми собственными значениями и собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — состояние φ испытывает акаузальное изменение, в результате которого может возникнуть каждое из состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, и притом с вероятностями $|(\varphi, \varphi_1)|^2, |(\varphi, \varphi_2)|^2, \dots$

соответственно. Это значит, что возникает смесь $U' = \sum_{n=1}^{\infty} |(\varphi, \varphi_n)|^2 \cdot P_{[\varphi_n]}$. В общем случае смесь U переходит в $U' = \sum_{n=1}^{\infty} |(U\varphi_n, \varphi_n)|^2 \cdot P_{[\varphi_n]}$ (про-

цесс 1. в V.1). Поскольку состояния переходят здесь в смеси, то этот процесс не является причинным.

Различие между двумя этими процессами $U \rightarrow U'$ глубоко фундаментально: даже отвлекаясь от разного поведения относительно принципа причинности, они отличаются и тем, что первый (термодинамически) обратим, а второй — нет (ср. V. 3).

Сравним теперь эти соотношения с теми, которые действительно осуществляются в природе или при ее наблюдении. Во-первых, само по себе безусловно верно, что измерение или связанный с ним процесс субъективного восприятия является по отношению к внешнему физическому миру новой, не сводящейся к нему сущностью. Действительно, такой процесс выводит нас из внешнего физического мира или, правильнее, вводит в неконтролируемую, так как в каждом контролльном опыте уже предполагаемую, мысленную внутреннюю жизнь индивидуума (ср. ниже). Однако имеется, несмотря на это, фундаментальное для всего естественнонаучного мировоззрения требование, так называемый принцип психофизического параллелизма, согласно которому должно быть возможно так описать в действительности внефизический процесс субъективного восприятия, как если бы он имел место в физическом мире, — это значит сопоставить его последовательным этапам физические процессы в объективном внешнем мире, в обычном пространстве (естественно, что при этом процессе сопоставления (*Zuordnungsprozeß*) возникает еще необходимость локализовать эти физические процессы в таких точках, которые лежат в занимаемой нашим телом части пространства). В применении к простейшему примеру это наше понимание выглядело бы примерно следующим образом. Пусть измеряется температура. Мы можем, если захотим, продолжить теоретическое вычисление этого процесса до тех пор, пока не получим температуру окружения ртутного сосуда термометра, и сказать затем: эту температуру измеряет термометр. Мы можем, однако, продолжить расчеты далее и вычислить, исходя из объясняемых молекулярно-кинетической теорией свойств ртути, ее нагревание, расширение и результирующую длину ртутного столбика, после чего мы скажем: эту длину видит наблюдатель. Идя еще дальше, мы могли бы, включая в рассмотрение источник света, учесть рассеяние световых квантов на непрозрачном столбике ртути и путь остальных квантов в глаз наблюдателя, затем преломление в хрусталике и образование изображения на сетчатке, и только тогда мы сказали бы: это изображение регистрируется сетчаткой наблюдателя. Наконец, если бы наши физиологические знания были полнее, чем сегодня, мы могли бы пойти еще дальше и указать химические реакции, возбуждаемые этим изображением на сетчатке, в нерве и в мозгу, и только тогда сказать: эти химические изменения в его мозговых клетках воспринимает наблюдатель. Однако в любом случае, сколь далеко ни продолжали бы мы вычисления — до ртутного сосуда термометра, до его

шкалы, до сетчатки или до клеток мозга, — в некоторый момент мы должны будем сказать: а это воспринимается наблюдателем. Это значит, что мы всегда должны делить мир на две части — наблюданную систему и наблюдателя. В первой из них мы можем, по крайней мере принципиально, сколь угодно подробно исследовать все физические процессы; в последней это бессмысленно. Положение границы между ними в высокой степени произвольно. Так, в приведенном выше примере мы видели четыре разные возможности; следует специально подчеркнуть, что наблюдатель в рассматриваемом смысле ни в коей мере не идентифицируется с телом настоящего наблюдателя, — в приведенном примере мы в одном случае причислили к наблюдателю даже термометр, в то время как в другом не включили его глаза и нервные пути. То, что такую границу можно переместить сколь угодно далеко внутрь организма действительного наблюдателя, и составляет содержание принципа психофизического параллелизма. Однако это обстоятельство ничего не меняет в том, что при каждом способе описания эта граница должна быть где-нибудь проведена, если только все не проходит впустую, т. е. если сравнение с опытом должно быть возможным. Ибо опыт может приводить только к утверждениям этого типа — наблюдатель испытал определенное (субъективное) восприятие, но никогда не к утверждениям таким, как: некоторая физическая величина имеет определенное значение.

Квантовая механика описывает как раз те события, которые разыгрываются в наблюданной части мира за то время, пока она не приходит во взаимодействие с наблюдающей частью, с помощью процессов 2. (V.1); как скоро, однако, такое взаимодействие возникает, т. е. производится измерение, она предписывает использование процесса 1.. Тем самым двойственность оправдана²⁰⁷⁾. При этом, однако, возникает опасность нарушения принципа психофизического параллелизма, если только мы не покажем, что (понимаемую в указанном выше смысле) границу между наблюданной системой и наблюдателем можно смешать произвольным образом.

Чтобы обсудить последний вопрос, разделим мир на три части I, II и III. Пусть I означает собственно наблюданную систему, II — измерительный инструмент, а III — собственно наблюдателя²⁰⁸⁾. Нам надо показать, что границу можно провести с равным успехом как между I и II + III, так и между I + II и III. (В приведенном выше

²⁰⁷⁾ N. Bohr (Naturwiss. 17 (1929)) первый указал как на то, что возникшую в результате открытия квантовой механики с формальной точки зрения неизбежную двойственность в описании природы можно оправдать и с точки зрения природы вещей, так и на связь с принципом психофизического параллелизма.

²⁰⁸⁾ Последующие рассуждения, равно как и дискуссия в VI.3, содержат существенные элементы, за которые автор должен быть благодарен разговорам с Л. Сцилардом. Ср. также аналогичные рассуждения у Гейзенberга (прим.¹⁸¹) на стр. 262).

примере при сравнении первого и второго случаев I соответствовало исследуемой системе, II — термометру, а III — системе свет + наблюдатель; при сравнении второго и третьего — I соответствовало исследуемой системе + термометр, II — свету + глаз наблюдателя, III — наблюдателю, начиная от его сетчатки; при сравнении третьего и четвертого случаев I — всему, вплоть до сетчатки наблюдателя, II — его сетчатке, нервам и мозгу, III — его абстрактному «Я».) Это значит, что один раз надо применить $\mathbf{2}.$ к I , а $\mathbf{1}.$ к взаимодействиям между I и $II+III$, а другой раз — $\mathbf{2}.$ к $I+II$, а $\mathbf{1}.$ — к взаимодействиям между $I+II$ и III . (Само III остается каждый раз вне рассмотрения.) Доказательство того, что оба пути приведут к тем же самим утверждениям относительно части I (она и только она принадлежит оба раза к наблюдаемой части мира), и составляет, собственно, нашу задачу.

Однако, чтобы быть в состоянии успешно заняться ею, нам надо будет сперва более подробно исследовать процесс объединения двух физических систем в одну (который ведет от I и II к $I+II$).

2. Составные системы

Рассмотрим, как было намечено в конце предыдущего параграфа, две физические системы I и II (они не обязательно должны иметь обсуждавшийся там смысл) и получающуюся их объединением систему $I+II$. Пусть с точки зрения классической механики система I обладает k степенями свободы, следовательно, координатами q_1, \dots, q_k , вместо которых мы ради краткости будем писать одну букву q . Система II пусть обладает соответственно l степенями свободы, описывается координатами r_1, \dots, r_l , сокращенно r . Тогда у системы $I+II$ будет $k+l$ степеней свободы и ей будут соответствовать координаты $q_1, \dots, q_k, r_1, \dots, r_l$, сокращенно q, r . При квантовомеханическом описании волновые функции I будут тогда иметь вид $\varphi(q)$, системы II — $\xi(r)$, а системы $I+II$ — $\Phi(q, r)$. Внутреннее произведение в соответствующих гильбертовых пространствах \mathfrak{H}' , \mathfrak{H}'' и \mathfrak{H}^{I+II} естественно определить как $\int \varphi(q) \overline{\psi(q)} dq$ или $\int \xi(r) \bar{\eta}(r) dr$, или $\int \int \Phi(q, r) \overline{\Psi(q, r)} dq dr$. В соответствии с этим физические величины систем I , II и III будут (гипермаксимальными) эрмитовыми операторами \mathbf{A} или A , или \mathbf{A} в \mathfrak{H}' , или в \mathfrak{H}'' , или в \mathfrak{H}^{I+II} .

Каждая физическая величина в I является, конечно, такой и в системе $I+II$, и при этом ее оператор \mathbf{A} получается из \mathbf{A} следующим образом: чтобы получить $\mathbf{A}\Phi(q, r)$, следует считать r постоянными и применить \mathbf{A} к q -функции $\Phi(q, r)$ ²⁰⁹). Это правило сопоставления,

²⁰⁹⁾ Можно легко показать, что оператор \mathbf{A} будет одновременно с A эрмитовым или гипермаксимальным.

во всяком случае верно для операторов координат и импульсов (Q_1, \dots, Q_k и P_1, \dots, P_k , т. е., ср. I.2, q_1, \dots, q_k , $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$) и находится в согласии с общими принципами сопоставления I. и II. из IV.2²¹⁰), поэтому мы постулируем его и для общего случая. (В квантовой механике оно общеупотребительно.)

Точно так же каждая физическая величина в II является такой и в I + II, и ее оператор A приводит к ее \mathbf{A} по тому же правилу: $\mathbf{A}\Phi(q, r)$ равняется $A\Phi(q, r)$, если при образовании последнего выражения рассматривать q как постоянные и $\Phi(q, r)$ — как r -функцию.

Если $\varphi_m(q)$ ($m = 1, 2, \dots$) образуют полную ортонормированную систему в \Re^I , а $\xi_n(r)$ ($n = 1, 2, \dots$) — такую систему в \Re^{II} , то функции $\Phi_{m/n}(q, r) = \varphi_m(q)\xi_n(r)$ ($m, n = 1, 2, \dots$) составят, очевидно, такую же систему в \Re^{I+II} . Тогда операторы \mathbf{A} , A или \mathbf{A} можно будет представить матрицами $\{\mathbf{a}_{m/m'}\}$ или $\{a_{n/n'}\}$ или $\{\alpha_{mn/m'n'}\}$ ($m, m', n, n' = 1, 2, \dots$)²¹¹), к чему мы будем ниже часто прибегать. Матричное представление означает, что

$$\mathbf{A}\varphi_m(q) = \sum_{m'=1}^{\infty} \mathbf{a}_{m/m'} \varphi_{m'}(q), \quad A\xi_n(r) = \sum_{n'=1}^{\infty} a_{n/n'} \xi_{n'}(r)$$

и

$$\mathbf{A}\Phi_{mn}(q, r) = \sum_{m', n'=1}^{\infty} \alpha_{mn/m'n'} \Phi_{m'n'}(q, r).$$

т. е.

$$\mathbf{A}\varphi_m(q)\xi_n(r) = \sum_{m', n'=1}^{\infty} \alpha_{mn/m'n'} \varphi_{m'}(q)\xi_{n'}(r).$$

В частности, сопоставление $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}$ устанавливает, что

$$\mathbf{A}\varphi_m(q)\xi_n(r) = (\mathbf{A}\varphi_m(q))\xi_n(r) = \sum_{m'=1}^{\infty} \mathbf{a}_{m/m'} \varphi_{m'}(q)\xi_n(r),$$

т. е. что

$$\alpha_{mn/m'n'} = \mathbf{a}_{m/m'} \delta_{n/n'}, \quad \left(\delta_{n/n'} = \begin{cases} 1 & \text{для } n = n', \\ 0 & \text{для } n \neq n'. \end{cases} \right)$$

Аналогично сопоставление $A \rightarrow \mathbf{A}$ устанавливает, что $\alpha_{mn/m'n'} = a_{n/n'} \delta_{m/m'}$.

²¹⁰) Для I. это ясно, для II. — тоже, пока рассматриваются только полиномы. Для произвольных функций это следует из того обстоятельства, что взаимосвязь разложения единицы и какого-либо эрмитова оператора не нарушается при переходе $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}$.

²¹¹) Из-за большого числа разнообразных индексов мы прибегнем для матриц к такому обозначению, несколько отличному от применявшегося.

Статистический ансамбль в $I+II$ характеризуется его статистическим оператором \mathbf{U} или соответствующей последнему матрицей $\{\psi_{mn|m'n'}\}$. Этот оператор определяет статистические свойства всех величин в $I+II$, следовательно, в частности, и статистические свойства величин в I . Таким образом, этому ансамблю отвечает и статистический ансамбль в одной лишь системе I : в самом деле, наблюдатель, могущий учитывать существование только I , но не II , воспринял бы ансамбль, относящийся к системам $I+II$, как относящийся к системе I . Что же будет теперь статистическим оператором \mathbf{U} или его матрицей $\{\psi_{m|m'}\}$, относящимся к этому I -ансамблю? Определим его из следующих соображений. I -величина с матрицей $\{\mathbf{a}_{m|m'}\}$ будет обладать, как $(I+II)$ -величина, матрицей $\{\mathbf{a}_{m|m'}\delta_{n'n'}\}$, следовательно, на основе вычислений в I будет иметь среднее значение

$$\sum_{m, m'=1}^{\infty} \psi_{m|m'} \mathbf{a}_{m'|m},$$

в то время как вычисления в $(I+II)$ приведут к

$$\begin{aligned} \sum_{m, n, m', n'=1}^{\infty} \psi_{mn|m'n'} \mathbf{a}_{m'|n'} \delta_{n'|n} &= \sum_{m, m', n=1}^{\infty} \psi_{mn|m'n} \mathbf{a}_{m'|m} = \\ &= \sum_{m, m'=1}^{\infty} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \psi_{mn|m'n} \right) \mathbf{a}_{m'|n}. \end{aligned}$$

Чтобы эти два выражения совпали, должно быть

$$\psi_{m|m'} = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_{mn|m'n}.$$

Совершенно аналогичным образом определяет наш $(I+II)$ -ансамбль в случае, когда учитывается только II , а I игнорируется, II -ансамбль со статистическим оператором U и соответствующей ему матрицей $\psi_{n|n'}$. Совершенно так же тогда получается, что

$$\psi_{n|n'} = \sum_{m=1}^{\infty} \psi_{mn|mn'}.$$

Итак, мы вывели правила сопоставления и для статистических операторов \mathbf{U} , U и \mathbf{U} систем I , II и $I+II$, однако эти правила существенно отличаются от тех правил сопоставления, которые имели место для операторов \mathbf{A} , A и \mathbf{A} физических величин.

Надо еще отметить, что выбранное сопоставление операторов \mathbf{U} , U и \mathbf{U} зависит от выбора полных ортонормированных систем $\varphi_m(q)$ и $\xi_n(r)$ только кажущимся образом, поскольку оно было выведено из инвариантного условия (которому можно удовлетворить только

таким сопоставлением) — совпадения средних значений операторов \mathbf{A} и \mathbf{A}' или A и A' .

Оператор \mathbf{U} выражает собой статистику в системе $I+II$, операторы \mathbf{U} или U — статистику, ограниченную системами I или II . Возникает вопрос, определяют ли \mathbf{U} и U оператор \mathbf{U} однозначно или нет? В общем случае следует ожидать отрицательного ответа, поскольку при знании только операторов \mathbf{U} и U , т. е. лишь свойств разделенных систем I и II , у нас выпадают все «зависимости вероятностей», могущие существовать между обеими системами. Если, однако, как состояние I , так и состояние II известны точно, то «зависимости вероятностей» не играют роли и $I+II$ узнается точно. За этими качественными соображениями должно, конечно, последовать точное математическое рассмотрение, к которому мы сейчас приступим.

Задача состоит в том, чтобы для двух заданных дефинитных матриц $\{\mathbf{u}_{m/m'}\}$ и $\{u_{n/n'}\}$ построить третью дефинитную матрицу $\{v_{mn/m'n'}\}$ такую, что

$$\sum_{n=1}^{\infty} v_{mn/m'n'} = u_{m/m'}, \quad \sum_{m=1}^{\infty} v_{mn/m'n'} = u_{n/n'}.$$

(Из $\sum_{m=1}^{\infty} u_{m/m} = 1$, $\sum_{n=1}^{\infty} u_{n/n} = 1$ следует тогда автоматически, что $\sum_{mn=1}^{\infty} v_{mn/mn} = 1$, т. е. правильная нормировка сохраняется.) Разрешима задача всегда; так, например, $v_{mn/m'n'} = u_{m/m'} u_{n/n'}$ всегда будет решением (легко убедиться, что эта матрица дефинитна); вопрос состоит в том, когда это решение будет единственным.

Мы покажем, что это выполняется тогда и только тогда, когда, по крайней мере, одна из двух матриц $\{\mathbf{u}_{m/m'}\}$ и $\{u_{n/n'}\}$ будет состоянием. Докажем сперва необходимость этого условия, т. е. существование многих решений в случае, когда обе матрицы соответствуют смесям. Действительно, тогда (ср. IV. 2)

$$u_{m/m'} = \alpha v_{m/m'} + \beta w_{m/m'}, \quad u_{n/n'} = \gamma v_{n/n'} + \delta w_{n/n'}$$

(матрицы $v_{m/m'}$ и $w_{m/m'}$ дефинитны и отличаются не только постоянным множителем, то же для $v_{n/n'}$ и $w_{n/n'}$;

$$\sum_{m=1}^{\infty} v_{m/m} = \sum_{m=1}^{\infty} w_{m/m} = \sum_{n=1}^{\infty} v_{n/n} = \sum_{n=1}^{\infty} w_{n/n} = 1;$$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta > 0$; $\alpha + \beta = 1$; $\gamma + \delta = 1$), и легко проверить вычислением, что каждая матрица

$$v_{mn/m'n'} = \pi v_{m/m'} v_{n/n'} + \rho w_{m/m'} v_{n/n'} + \sigma v_{m/m'} w_{n/n'} + \tau w_{m/m'} w_{n/n'} \\ \pi + \sigma = \alpha; \quad \rho + \tau = \beta; \quad \pi + \rho = \gamma; \quad \sigma + \tau = \delta; \quad \pi, \rho, \sigma, \tau > 0$$

будет решением. Числа π, ρ, σ и τ можно выбрать при этом бесконечным числом различных способов (поскольку $\alpha + \beta = \gamma + \delta$, то из четырех уравнений независимы только три, пусть, например,

$$\rho = \gamma - \pi; \quad \sigma = \alpha - \pi; \quad \tau = (\delta - \alpha) + \pi.$$

Чтобы все было положительным, должно быть $\alpha - \delta = \gamma - \beta < \pi < \alpha, \gamma$, что выполняется для бесконечного числа значений π), и различные π, ρ, σ, τ ведут к различным $v_{mn/m'n'}$, так как $v_{m/m'} v_{n/n'}, \dots, w_{m/m'} w_{n/n'}$ линейно независимы, поскольку это имеет место как для $v_{m/m'}, w_{m/m'}$, так и для $v_{n/n'}, w_{n/n'}$.

Перейдем теперь к доказательству достаточности, причем можем принять, что состоянию отвечает $u_{m/m'}$ (другой случай рассматривается точно так же). Итак, пусть $U = P_{[\varphi]}$. Поскольку полная ортонормированная система $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ была произвольна, можем принять, что $\varphi_1 = \varphi$. Оператору $U = P_{[\varphi_1]}$ соответствует, очевидно, матрица

$$u_{m/m'} = \begin{cases} 1 & \text{для } m = m' = 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Итак,

$$\sum_{n=1}^{\infty} v_{mn/m'n'} = \begin{cases} 1 & \text{для } m = m' = 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

В частности, для $m \neq 1$ $\sum_{n=1}^{\infty} v_{mn/mn} = 0$, но поскольку по определению $v_{mn/m'n'}$ все $v_{mn/mn} \geq 0$ (действительно, $v_{mn/mn} = (U\Phi_{mn}, \Phi_{mn})$), то в этом случае $v_{mn/mn} = 0$. Это значит, что $(U\Phi_{mn}, \Phi_{mn}) = 0$, следовательно, в силу дефинитности U , и $(U\Phi_{mn}, \Phi_{m'n'}) = 0$ (ср. II. 5, теорема 19.) для произвольных m', n' . Но это значит, что из $m \neq 1$ следует $v_{mn/m'n'} = 0$, а вследствие эрмитовости то же будет следовать и из $m' \neq 1$. Но для $m = m' = 1$ получается

$$v_{1n/1n'} = \sum_{m=1}^{\infty} v_{mn/mn'} = u_{n/n'}.$$

Тем самым, как и утверждалось, оказывается, что решение $v_{mn/m'n'}$ определено однозначно.

Резюмируя, можно сформулировать наш результат следующим образом. Статистический ансамбль в I + II с оператором $U = \{v_{mn/m'n'}\}$ однозначно определяется определенными только в I и только в II статистическими ансамблями с операторами $U = \{u_{m/m'}\}$ и $U = \{u_{n/n'}\}$ тогда и только тогда, когда выполняются следующие условия:

1.

$$v_{mn/m'n'} = v_{m/m'} v_{n/n'}.$$

(Из равенства $\text{Spur } \mathbf{U} = \sum_{m,n=1}^{\infty} v_{mn}/mn = \sum_{m=1}^{\infty} v_{m/m} \sum_{n=1}^{\infty} v_{n/n} = 1$ следует, что мы можем умножением $v_{m/m}$ и $v_{n/n}$ на два взаимно обратных множителя добиться выполнения

$$\sum_{m=1}^{\infty} v_{m/m} = 1, \quad \sum_{n=1}^{\infty} v_{n/n} = 1.$$

Но тогда видно, что будет $u_{m/m'} = v_{m/m'}$ и $u_{n/n'} = v_{n/n'}$.)

2. Выполняется либо $v_{m/m'} = x_m x_{m'}$, либо $v_{n/n'} = x_n x_{n'}$.

(Ибо $\mathbf{U} = P_{[\varphi]}$ означает, что $\varphi = \sum_{m=1}^{\infty} y_m \varphi_m$, следовательно, $u_{m/m'} = \bar{y}_m y_{m'}$ и соответственно для $v_{m/m'}$; аналогично рассуждаем и для $U = P_{[\xi]}$.)

В дальнейшем мы будем называть \mathbf{U} и U проекциями оператора \mathbf{U} в I и в II ²¹²⁾.

Обратимся теперь к состояниям из $I + II$, $\mathbf{U} = P_{[\Phi]}$. Относившиеся к ним волновые функции $\Phi(q, r)$ могут быть разложены по полной ортонормированной системе $\Phi_{mn}(q, r) = \varphi_m(q) \xi_n(r)$:

$$\Phi(q, r) = \sum_{m,n=1}^{\infty} f_{mn} \varphi_m(q) \xi_n(r).$$

Мы можем также заместить их коэффициентами f_{mn} ($m, n = 1, 2, \dots$), которые ограничены только условием $\sum_{m,n=1}^{\infty} |f_{mn}|^2 = \|\Phi\|^2$ конечна.

Можно ввести также два оператора F и F^* равенствами

$$F \varphi(q) = \int \overline{\Phi(q, r)} \varphi(q) dq,$$

$$F^* \xi(r) = \int \Phi(q, r) \xi(r) dr.$$

Они линейны и обладают той своеобразной особенностью, что, будучи определенными в \Re^I или соответственно в \Re^{II} , принимают значения из \Re^{II} или соответственно из \Re^I . Они соотносятся как сопряженные операторы, поскольку, очевидно, $(F\varphi, \xi) = (\varphi, F^*\xi)$ (внутреннее произведение в левой части образуется в \Re^{II} , а в правой — в \Re^I !). Поскольку различие между \Re^I и \Re^{II} не имеет математического значения, то мы можем применить результаты II. 11, и поэтому $\Sigma(F)$

²¹²⁾ Проекции состояния из $I + II$ оказываются в I и в II , вообще говоря, смесями, ср. ниже. Это обстоятельство было открыто Ландау (L. Landau, Zs. f. Phys. 45 (1927)).

и $\Sigma(F^*)$, поскольку речь идет об интегральных операторах, будут равны

$$\int \int |\Phi(q, r)|^2 dq dr = \|\Phi\|^2 = 1 \quad (\|\Phi\| \text{ в } \Re^{I+II})$$

и, следовательно, конечны. Поэтому F и F^* будут непрерывными, даже полностью непрерывными операторами, произведения F^*F , равно как и FF^* , будут дефинитными операторами и

$$\text{Spur}(F^*F) = \Sigma(F) = 1, \quad \text{Spur}(FF^*) = \Sigma(F^*) = 1.$$

Обращая снова внимание на различие между \Re^I и \Re^{II} , замечаем, что F^*F определено в \Re^I , а FF^* — в \Re^{II} .

Так как $F\varphi_m(q)$ оказывается равным $\sum_{n=1}^{\infty} \bar{f}_{mn}\xi_n(r)$, то оператор F имеет своей матрицей $\{\bar{f}_{mn}\}$ (при использовании полных ортонормированных систем $\varphi_m(q)$ и $\xi_n(r)$); аналогично матрицей оператора F^* будет $\{f_{mn}\}$. Поэтому F^*F и FF^* будут иметь матрицы

$$\left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \bar{f}_{mn} f_{m'n} \right\} \quad \text{и} \quad \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \bar{f}_{mn} f_{mn'} \right\}.$$

С другой стороны, оператор $\mathbf{U} = P_{[\Phi]}$ будет обладать в системе функций $\Phi_{mn}(q, r) = \varphi_m(q)\xi_n(r)$ матрицей $\{\bar{f}_{mn} f_{m'n'}\}$, так что матрицами его проекций \mathbf{U} и U в I и в II будут $\sum_{n=1}^{\infty} \bar{f}_{mn} f_{m'n}$ и соответственно $\sum_{m=1}^{\infty} \bar{f}_{mn} f_{mn}$ ²¹³⁾. Поэтому

$$\mathbf{U} = F^*F, \quad U = FF^*.$$

Это утверждение не будет зависеть от выбора функций φ_m и ξ_n (так как \mathbf{U} , U и F не зависят от такого выбора).

Операторы \mathbf{U} и U полностью непрерывны и, согласно II.11 и IV.3, могут быть записаны в виде

$$\mathbf{U} = \sum_{k=1}^{\infty} w'_k P_{[\psi_k]}, \quad U = \sum_{k=1}^{\infty} w''_k P_{[\eta_k]},$$

где ψ_k образуют полную ортонормированную систему в \Re^I , η_k — такую систему в \Re^{II} и все w'_k , $w''_k \geq 0$. Опустим теперь в каждой из обеих формул члены с $w'_k = 0$ или $w''_k = 0$ и перенумеруем оставшиеся опять последовательными числами 1, 2, ... Тогда функции ψ_k или η_k будут образовывать уже только ортонормированную, но

²¹³⁾ Математически это рассуждение соприкасается с работой E. Schmidt'a, Math. Ann. 63 (1907).

не обязательно полную систему, на месте сумм $\sum_{k=1}^{\infty}$ выступят $\sum_{k=1}^{M'}$ и $\sum_{k=1}^{M''}$, где M' и M'' с равным правом могут как равняться бесконечности, так и быть конечными, но зато все w'_k и w''_k будут теперь строго больше нуля.

Рассмотрим некоторую ψ_k . Будет $U\psi_k = w'_k \psi_k$, следовательно,

$$F^* F \psi_k = w'_k \psi_k, \quad FF^* F \psi_k = w'_k F \psi_k, \quad UF \psi_k = w'_k F \psi_k.$$

Далее

$$(F\psi_k, F\psi_l) = (F^* F\psi_k, \psi_l) = (U\psi_k, \psi_l) =$$

$$= w'_k (\psi_k, \psi_l) = \begin{cases} w'_k & \text{для } k = l, \\ 0 & \text{для } k \neq l. \end{cases}$$

Поэтому, в частности, $\|F\psi_k\|^2 = w'_k$. Итак, функции $\frac{1}{\sqrt{w'_k}} F\psi_k$ об-

разуют ортонормированную систему в \Re^{II} и, более того, они будут собственными функциями оператора U с теми же собственными значениями, что у функций ψ_k для U (т. е. равными w'_k). Это значит, что всякое собственное значение U будет и собственным значением не меньшей кратности для оператора U ; переставляя U и U , получаем, что эти операторы имеют одинаковые собственные значения с одинаковыми кратностями. Итак, числа w'_k и w''_k совпадают попарно с точностью до порядка нумерации. Поэтому $M' = M'' = M$, и изменением порядка нумерации w''_k мы можем достигнуть выполнения $w'_k = w''_k = w_k$. Но, коль скоро это так, мы можем, не теряя общности, выбрать $\eta_k = \frac{1}{\sqrt{w_k}} F\psi_k$. Тогда будет

$$\frac{1}{\sqrt{w_k}} F^* \eta_k = \frac{1}{w_k} F^* F \psi_k = \frac{1}{w_k} U \psi_k = \psi_k.$$

Итак,

$$\eta_k = \frac{1}{\sqrt{w_k}} F\psi_k, \quad \psi_k = \frac{1}{\sqrt{w_k}} F^* \eta_k *)).$$

Дополним теперь ортонормированную систему ψ_1, ψ_2, \dots до полной $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi'_1, \psi'_2, \dots$, а систему η_1, η_2, \dots до $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta'_1, \eta'_2, \dots$ (каждая из систем ψ'_1, ψ'_2, \dots и η'_1, η'_2, \dots может быть пустой, конечной или бесконечной; они строятся независимо друг от друга). Все предыдущие рассуждения не зависели от выбора полных орто-

*) См. прим. 212) на стр. 314.

нормированных систем $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и ξ_1, ξ_2, \dots , мы можем поэтому выбрать в качестве их системы $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi'_1, \psi'_2, \dots$ и $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta'_1, \eta'_2, \dots$. Именно, пусть ψ_k совпадает с φ_{μ_k} , η_k — с ξ_{ν_k} (μ_1, μ_2, \dots взаимно различны; то же для ν_1, ν_2, \dots). Тогда

$$F\varphi_{\mu_k} = \sqrt{w_k} \xi_{\nu_k}, \quad F\varphi_m = 0 \quad \text{для } m \neq \mu_1, \mu_2, \dots$$

Итак,

$$f_{mn} = \begin{cases} \sqrt{w_k} & \text{для } m = \mu_k, n = \nu_k, k = 1, 2, \dots, \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

или, что то же самое,

$$\Phi(q, r) = \sum_{k=1}^M \sqrt{w_k} \varphi_{\mu_k}(q) \xi_{\nu_k}(r).$$

Таким образом, мы достигли, путем соответствующего выбора систем $\varphi_m(q)$ и $\xi_n(r)$, того, что каждая строка и каждый столбец матрицы $\{f_{mn}\}$ содержит самое большее один не равный нулю элемент (то, что он даже веществен и положителен, именно равен $\sqrt{w_k}$, для дальнейшего не важно). В чем заключается физический смысл этого формального утверждения?

Пусть A — оператор с собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и всеми различными собственными значениями, например a_1, a_2, \dots ; B — такой же оператор с функциями ξ_1, ξ_2, \dots и значениями b_1, b_2, \dots . Оператор A соответствует некоторой физической величине в I , оператор B — в II ; эти две величины допускают, следовательно, одновременное измерение. Легко видеть, что утверждения « A имеет значение a_m » и « B имеет значение b_n » определяют совместно состояние $\Phi_{mn}(q, r) = \varphi_m(q) \xi_n(r)$, которое имеет в состоянии $\Phi(q, r)$ вероятность $(P_{[\Phi_{mn}]} \Phi, \Phi) = |(\Phi, \Phi_{mn})|^2 = |f_{mn}|^2$. Таким образом, наше утверждение означает, что A и B одновременно измеримы, и если бы один из них был измерен в Φ , то тем самым значение другого было бы однозначно определено. (Собственное значение a_m , которому отвечают все $f_{mn} = 0$, встретиться не может, поскольку его полная вероятность $\sum_{n=1}^{\infty} |f_{mn}|^2$ не может равняться нулю, если a_m вообще можно найти. Итак, точно для одного n $f_{mn} \neq 0$. Для b_n — так же.) Это означает, что в состоянии Φ может встретиться много значений оператора A (каждое значение a_m , для которого $\sum_{n=1}^{\infty} |f_{mn}|^2 > 0$, т. е. существует n с $f_{mn} \neq 0$, — в большинстве случаев это будут все a_m) и столько же значений оператора B (каждое b_n ,

для которого $\sum_{n=1}^{\infty} |f_{mn}|^2 > 0$, т. е. существует одно m с $f_{mn} \neq 0$), но Φ устанавливает между возможными значениями A и B однозначное соответствие.

Если назвать возможные $m: \mu_1, \mu_2, \dots$, а соответственные возможные $n: \nu_1, \nu_2, \dots$, то будет

$$f_{mn} = \begin{cases} c_k \neq 0, & \text{для } m = \mu_k, n = \nu_k, k = 1, 2, \dots, \\ 0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

т. е. (M — либо конечно, либо бесконечно)

$$\Phi(q, r) = \sum_{k=1}^M c_k \varphi_{\mu_k}(q) \xi_{\nu_k}(r).$$

Далее будет

$$u_{mm'} = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{f}_{mn} f_{m'n} = \begin{cases} |c_k|^2 \text{ для } m = m' = \mu_k, k = 1, 2, \dots, \\ 0 \text{ в остальных случаях,} \end{cases}$$

$$u_{nn'} = \sum_{m=1}^{\infty} \bar{f}_{mn} f_{mn'} = \begin{cases} |c_k|^2 \text{ для } n = n' = \nu_k, k = 1, 2, \dots, \\ 0 \text{ в остальных случаях,} \end{cases}$$

следовательно,

$$U = \sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 P_{[\varphi_{\mu_k}]}, \quad u = \sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 P_{[\xi_{\nu_k}]}.$$

Итак, будучи спроектировано в I или в II , Φ становится, вообще говоря, смесью, оставаясь состоянием только в $I+II$, поскольку оно включает утверждение относительно $I+II$, которое нельзя использовать ни в рамках одной системы I , ни в рамках одной системы II , — взаимно однозначное соответствие между значениями операторов A и B .

Таким образом, для любого Φ мы можем так выбрать A и B , т. е. функции φ_m и ξ_n , что это наше условие будет выполнено, но для произвольных A и B оно, конечно, нарушится. Иными словами, каждое состояние Φ устанавливает определенную связь между I и II , в то время как связываемые величины A и B зависят от Φ . В какой степени определяет их, т. е. φ_m и ξ_n , состояние Φ , легко установить. Если все $|c_k|$ различны и не равны нулю, то U и u (которые фиксируются заданием Φ) определяют φ_m и ξ_n однозначно (ср. IV.3); обсуждение общего случая мы оставим на долю читателя.

В заключение заметим, что если $M \neq 1$, то из-за $|c_k|^2 > 0$ ни U , ни u не будут состояниями. Для $M = 1$ состояниями будут оба: $U = P_{[\varphi_{\mu_1}]}$ и $u = P_{[\xi_{\nu_1}]}$. Тогда $\Phi(q, r) = c_1 \varphi_{\mu_1}(q) \xi_{\nu_1}(r)$, а c_1 можно будет включить в $\varphi_{\mu_1}(q)$. Итак, U и u будут состояниями тогда и

только тогда, когда $\Phi(q, r)$ имеет вид $\varphi(q)\xi(r)$; они будут тогда равняться $P_{[\varphi]}$ и $P_{[\xi]}$.

На основе полученных выше результатов мы можем сформулировать следующее утверждение. Находится система I в состоянии $\varphi(q)$, а система II — в состоянии $\xi(r)$, то и $I+II$ будет находиться в состоянии $\Phi(q, r) = \varphi(q)\xi(r)$. Если же, напротив, $I+II$ находится в состоянии $\Phi(q, r)$, не имеющем формы произведения $\varphi(q)\xi(r)$, то I и II будут смесями, но Φ установит взаимно однозначное соответствие между возможными значениями определенных величин в I и II .

3. Обсуждение процесса измерения

Прежде чем довести до конца обсуждение процесса измерения в смысле развитых в VI. 1 идей с помощью найденных в VI. 2 формальных средств, мы хотели бы еще использовать результаты VI. 2, чтобы исключить многократно предлагавшуюся возможность объяснения статистического характера процесса **1.** (V. 1). Она основывается на следующем рассуждении. Пусть I означает наблюдаемую систему, а II — наблюдателя. Если I находится до измерения в состоянии

$\mathbf{U} = P_{[\varphi]}$, а II — в смеси $U = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[\xi_n]}$, то $I+II$ будет в однозначно определенной смеси \mathbf{U} , именно, как легко сосчитать, следуя VI. 2, будет

$$\mathbf{U} = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{[\Phi_n]}, \quad \Phi_n(q, r) = \varphi(q)\xi_n(r).$$

Если теперь имеет место измерение величины A в I , то его надо понимать как взаимодействие между I и II , т. е. как процесс **2.** (V. 1) с некоторым оператором энергии \mathbf{H} . Если оно продолжается время t , то превратит \mathbf{U} в

$$\mathbf{U}' = e^{-\frac{2\pi t}{\hbar} t\mathbf{H}} \mathbf{U} e^{\frac{2\pi t}{\hbar} t\mathbf{H}},$$

именно, как легко видеть, в

$$\mathbf{U}' = \sum_{n=1}^{\infty} w_n P_{\left[e^{-\frac{2\pi t}{\hbar} t\mathbf{H}} \Phi_n]\right]}.$$

Если бы теперь всякое $\Phi_n(q, r)$ имело форму $\psi_n(q)\eta_n(r)$, где ψ_n — собственная функция A , а η_n образуют некоторую фиксированную полную ортонормированную систему, то это вмешательство имело бы характер измерения, переводя каждое состояние φ системы I в смесь собственных функций ψ_n оператора A . Статистический характер возникает здесь из того, что, хотя система I и находилась до изме-

рения в одном определенном состоянии, но II , была смесью, а в процессе взаимодействия «смешанный» характер II «заразил» и систему $I+II$, в частности, превратил в смесь проекцию в I . Иными словами, измерение не приводит к определенному результату из-за того, что состояние наблюдателя перед измерением не является точно определенным. Было бы мысленно, что такой механизм функционирует, так как степень информации наблюдателя о его собственном состоянии могла бы быть ограничена законами природы. Эти границы нашли бы себе выражение в значениях w_n , которые должны были бы определяться только наблюдателем (т. е. не зависели бы от φ !).

Как раз здесь эта попытка объяснения терпит крушение, ибо квантовая механика требует, чтобы было

$$w_n = (P_{[\psi_n]} \varphi, \varphi) = |(\varphi, \psi_n)|^2,$$

т. е. чтобы w_n зависело от φ ! Существующее, возможно, другое разложение $\mathbf{U}' = \sum_{n=1}^{\infty} w'_n P_{[\Phi'_n]}$ (в котором $\Phi'_n(q, r) = \psi_n(q) \eta_n(r)$ ортогональны и нормированы!) тоже не помогает, поскольку w'_n однозначно устанавливаются (с точностью до порядка) смесью \mathbf{U}' (IV. 3) и, следовательно, совпадают с w_n ²¹⁴⁾.

Итак, акаузальность процесса I , обусловлена не недостаточностью знаний о состоянии наблюдателя. Поэтому в дальнейшем мы будем всегда принимать, что оно известно точно.

Обратимся снова к задаче, сформулированной в конце VI. 1. I , II и III будут иметь определенное там значение; для квантовомеханического описания систем I и II будут использоваться обозначения VI. 1, в то время как III вообще останется вне вычислений (ср. сказанное по этому поводу в VI. 1). Пусть A означает подлежащую измерению величину (в I), $\varphi_1(q)$, $\varphi_2(q)$, ... — ее собственные функции, а система I находится в состоянии $\varphi(q)$.

Если I считается наблюдаемой системой, а $II+III$ — наблюдателем, то нам следует прибегнуть к процессу 2., и мы найдем, что измерение переводит I из состояния φ в одно из состояний φ_n ($n = 1, 2, \dots$) с соответствующими вероятностями $|(\varphi, \varphi_n)|^2$ ($n = 1, 2, \dots$). К какому же способу описания следует нам прибегнуть, если считать наблюдаемой системой $I+II$, а наблюдателем — III ?

В этом случае мы должны сказать, что II — это измерительный прибор, показывающий на шкале значение величины A (из I). Положение стрелки на этой шкале есть некоторая физическая величина B (из II), которая, собственно, и наблюдается системой III (если II

²¹⁴⁾ Эта форма допускает еще некоторые вариации, которые также не заслуживают рассмотрения по аналогичным причинам.

лежит уже внутри организма наблюдателя, то на месте шкалы и положения стрелки выступят соответствующие физиологические понятия, например сетчатка и изображение на ней) и значения которой однозначно связаны со значениями величины A . Пусть значения A будут a_1, a_2, \dots , значения $B - b_1, b_2, \dots$, а нумерация выполнена так, что как раз a_n и b_n связаны друг с другом.

Первоначально I находится в (неизвестном) состоянии $\varphi(q)$, а II — в (известном) состоянии $\xi(r)$, следовательно, $I+II$ — в состоянии $\Phi(q, r) = \varphi(q)\xi(r)$. Измерение (пока оно проводится системой II над системой I) совершается, как и в прежнем примере, посредством оператора энергии \mathbf{H} (в $I+II$) за время t . Это будет

процессом 2., который превратит Φ в $\Phi' = e^{-\frac{2\pi t}{\hbar} t\mathbf{H}} \Phi$. С точки зрения наблюдателя III об измерении можно заговорить, только если дело обстоит так, что начни III измерять посредством процесса 1. одновременно измеримые величины A и B (в I и соответственно в II , или же обе в $I+II$), то пары значений a_m, b_n с $m \neq n$ стали бы появляться лишь с вероятностью нуль, напротив, пары с $m=n$ — с некоторыми определенными вероятностями w_n . Иными словами, достаточно «рассмотреть» II , чтобы A из I оказалась бы измеренной. Квантовая механика потребует тогда еще, чтобы $w_n = |(\varphi, \varphi_n)|^2$.

Произойди такое, и процесс измерения, в той мере, в какой он протекает в II , будет теоретически «объяснен» — рассматривавшаяся в VI. 1 граница сдвинута из положения $I|II+III$ в $I+II|III$.

Итак, математическая задача состоит в следующем. Задана полная ортонормированная система $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ в I . Такую же систему ξ_1, ξ_2, \dots в \Re^{II} , равно как и состояние ξ в \Re^{II} , надо найти. Далее следует подобрать оператор (энергии) \mathbf{H} в \Re^{I+II} и значение t так, чтобы выполнялись следующие условия. Если φ — произвольное состояние в \Re^I , а

$$\Phi(q, r) = \varphi(q)\xi(r), \quad \Phi'(q, r) = e^{-\frac{2\pi t}{\hbar} t\mathbf{H}} \Phi(q, r)$$

по построению, то $\Phi'(q, r)$ должна представляться в виде $\sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(q) \xi_n(r)$ (коэффициенты c_n могут, естественно, зависеть от φ). При этом должно быть $|c_n|^2 = |(\varphi, \varphi_n)|^2$ (то, что последнее условие соответствует сформулированным выше физическим требованиям, было выяснено в VI. 2).

В дальнейшем мы будем наряду с $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ считать фиксированными и ξ_1, ξ_2, \dots и ξ , а вместо \mathbf{H} искать унитарный оператор $\Delta = e^{-\frac{2\pi t}{\hbar} t\mathbf{H}}$.

Математическая задача сводится к уже разрешенной в VI. 2: там была задана Φ' , и мы показали существование c_n, φ_n и ξ_n ; теперь нам заданы

постоянны φ_n , ξ_n и зависящие от φ Φ и c_n , и задача состоит в том, чтобы так определить Δ , чтобы эти c_n , φ_n и ξ_n получились бы из $\Phi' = \Delta\Phi$.

Мы покажем, что такое построение Δ действительно возможно. При этом мы будем интересоваться лишь принципиальной стороной дела, т. е. вопросом существования какого-либо такого Δ . Дальнейший вопрос о том, обладают ли требуемыми свойствами операторы

$\Delta = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} t \mathbf{H}}$ простейших наглядных схем постановки опытов (например, рассмотренных в III. 4), не должен нас заботить. В самом деле, поскольку, как мы видели, наши условия действительно совпадают с наглядным критерием измеримости и, с другой стороны, в упомянутых схемах опытов наглядные требования к измерению тоже удовлетворяются, то квантовая механика должна была бы приводить к грубо противоречащим наблюдению результатам, если бы соответствующие Δ не удовлетворяли бы (по крайней мере приближенно) нашим условиям²¹⁵⁾. Таким образом, в дальнейшем нам надо будет найти только абстрактный оператор Δ , точно удовлетворяющий нашим условиям.

Итак, пусть функции φ_m ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) и ξ_n ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) образуют две заданные ортонормированные системы в \Re^I и соответственно в \Re^{II} (мы даем теперь m и n пробегать не значения 1, 2, ..., а значения 0, $\pm 1, \pm 2, \dots$; это основано на технических соображениях и не имеет принципиального значения) и пусть, простоты ради, состояние ξ совпадает с ξ_0 . Определим оператор Δ равенством

$$\Delta \sum_{m, n=-\infty}^{\infty} x_{mn} \varphi_m(q) \xi_n(r) = \sum_{m, n=-\infty}^{\infty} x_{mn} \varphi_m(q) \xi_{m+n}(r).$$

Поскольку как $\varphi_m(q) \xi_n(r)$, так и $\varphi_m(q) \xi_{n+m}(r)$ образуют в \Re^{I+II} полные ортонормированные системы, то такое Δ будет унитарным. Теперь

$$\varphi(q) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (\varphi, \varphi_m) \cdot \varphi_m(q); \quad \xi(r) = \xi_0(r).$$

Следовательно,

$$\Phi(q, r) = \varphi(q) \xi(r) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (\varphi, \varphi_m) \cdot \varphi_m(q) \xi_0(r)$$

и

$$\Phi'(q, r) = \Delta\Phi(q, r) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (\varphi, \varphi_m) \cdot \varphi_m(q) \xi_m(r).$$

215) Для рассматривавшегося в III. 4 измерения положения соответствующее вычисление имеется в работе Weizsäcker'a, Zs. f. Phys. 70 (1931).

Но тем самым наша цель достигнута, мы добились даже равенства $c_n = (\varphi, \varphi_n)$.

Мы получим, однако, более наглядное представление о механизме этого процесса, рассмотрев пример с конкретными шредингеровыми волновыми функциями и задавая само \mathbf{H} вместо Δ .

Как наблюдаемый объект, так и наблюдателя (т. е. I и II) будет достаточно охарактеризовать одной непрерывно пробегающей от $-\infty$ до $+\infty$ переменной q или r , т. е. мы будем представлять их как линейно двигающиеся точки. Их волновые функции будут иметь вид $\psi(q)$ и $\eta(r)$. Мы примем, что их массы m_1 и m_2 столь велики, что кинетической энергией

$$\frac{1}{2m_1} \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 + \frac{1}{2m_2} \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial r} \right)^2$$

в операторе энергии можно будет пренебречь, и в \mathbf{H} останется только ответственная за измерение энергия взаимодействия, для которой мы выберем специальную форму $\frac{\hbar}{2\pi i} q \frac{\partial}{\partial r}$.

Зависящее от времени дифференциальное уравнение Шредингера для волновой функции $\psi_t = \psi_t(q, r)$ системы I+II будет тогда гласить:

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(q, r) = - \frac{\hbar}{2\pi i} q \frac{\partial}{\partial r} \psi_t(q, r),$$

т. е.

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + q \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_t(q, r) = 0,$$

что приведет к

$$\psi_t(q, r) = f(q, r - tq).$$

Если для $t = 0$ $\psi_0(q, r) = \Phi(q, r)$, то мы получим $f(q, r) = \Phi(q, r)$ и, следовательно,

$$\psi_t(q, r) = \Phi(q, r - tq).$$

Если, в частности, начальные состояния систем I и II представляются функциями $\varphi(q)$ и $\xi(r)$, то, в духе нашей вычислительной схемы (если выбрать участвующее в ней время t равным 1), будет

$$\Phi(q, r) = \varphi(q) \xi(r), \quad \Phi'(q, r) = \psi_1(q, r) = \varphi(q) \xi(r - q).$$

Покажем теперь, что найденные результаты могут послужить для измерения координаты системы I системой II, т. е. что координаты q и r взаимно связаны. (Поскольку q и r обладают непрерывным спектром, т. е. только сколь угодно точно, но не абсолютно точно измеримы, то это может удастся только приближенно.)

Допустим для этой цели, что $\xi(r)$ отлична от нуля только в очень узком интервале $-\varepsilon < r_0 < \varepsilon$ (т. е. что координата r наблюдателя

известна до измерения очень точно). Кроме того, ξ должна, естественно, быть нормированной:

$$\|\xi\| = 1, \quad \text{т. е.} \quad \int |\xi(r)|^2 dr = 1.$$

Вероятность того, что q лежит в интервале $q_0 - \delta < q < q_0 + \delta$, а r — в интервале $r_0 - \delta' < r < r_0 + \delta'$, будет тогда составлять

$$\int_{q_0-\delta}^{q_0+\delta} \int_{r_0-\delta'}^{r_0+\delta'} |\Phi'(q, r)|^2 dq dr = \int_{q_0-\delta}^{q_0+\delta} \int_{r_0-\delta'}^{r_0+\delta'} |\varphi(q)|^2 |\xi(r-q)|^2 dq dr.$$

Если q_0 и r_0 отличаются друг от друга больше чем на $\delta + \delta' + \varepsilon$, то она обратится в нуль, т. е. q и r связаны столь сильно, что их разность никогда не может стать $> \delta + \delta' + \varepsilon$. Для случая же $r_0 = q_0$ она, если мы выберем $\delta' \geq \delta + \varepsilon$, будет из-за допущений относительно ξ

равняться $\int_{q_0-\delta}^{q_0+\delta} |\varphi(q)|^2 dq$. Так как, однако, мы можем выбрать δ, δ'

и ε сколь угодно малыми (они должны быть только большими нуля!), то это значит, что q и r связаны сколь угодно сильно, а плотность вероятности имеет требуемое квантовой механикой значение $|\varphi(q)|^2$.

Таким образом, условия для измерения в той форме, как они обсуждались в VI. 1 и в этом параграфе, осуществляются.

Обсуждение более сложных примеров, например, аналогичных нашему четырехчленному примеру из VI. 1, или таких, как контроль со стороны второго наблюдателя III измерения, выполненного II над I, проводится совершенно аналогично. Мы предоставим его читателю.

ДОПОЛНЕНИЕ

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ЭРГОДИЧЕСКОЙ ТЕОРЕМЫ И H -ТЕОРЕМЫ В НОВОЙ МЕХАНИКЕ *)

Показывается, каким образом должно разрешаться кажущееся противоречие между макроскопическим понятием фазового пространства и существованием соотношений неопределенности. Затем дается квантовомеханическое истолкование самых основных представлений статистической механики, формулируются и доказываются (без «допущения о беспорядке») эргодическая теорема и H -теорема. После этого следует обсуждение физического смысла математических условий, ограничивающих области их применения.

Введение

1. Темой настоящей работы является выяснение связи между макроскопическим и микроскопическим рассмотрениями сложной системы, т. е. обсуждение вопроса, почему дело обстоит так, что обычные термодинамические методы статистической механики дают возможность делать в подавляющем большинстве правильные утверждения относительно систем, известных неполным образом (т. е. только макроскопически). В частности: каким образом, во-первых, возникает своеобразное, казалось бы, необратимое поведение энтропии и почему, во-вторых, для известной неполным образом (реальной) системы позволительно подставлять статистические свойства (фиктивного) микроканонического ансамбля **). И на эти вопросы мы должны ответить, пользуясь средствами квантовой механики.

Как известно, в классической механике эти вопросы привели к построению двух детально разработанных теоретических систем: больцмановой и гиббсовой статистических механик. Первая теория не

*) J. v. Neumann, Zs. f. Phys. 57, 30—70 (1929).

**) Здесь имеются в виду замкнутые и изолированные системы. Известно, что для системы, сообщающейся с большим тепловым резервуаром, характеристичным является так называемый канонический ансамбль. Но методы статистической механики позволяют без труда свести этот случай к предыдущему, если только тепловой резервуар присоединить к системе.

смогла дать окончательного и удовлетворительного решения, потому что в ней приходится существенно пользоваться так называемым предположением о «беспорядке», — а понимание природы этого «беспорядка» и представляет как раз основную задачу *). Вторая теория по своему подходу была бы вполне пригодна для этого: однако она привела к математической проблеме, так называемой проблеме квази-эргодичности, оказавшейся абсолютно непреодолимой ни при тогдашнем состоянии науки, ни при нынешнем. Поэтому теория Гиббса приведет к цели, только если предположить правильность соответствующей математической теоремы.

Далее, в общих принципиальных вопросах новая квантовая механика отличается от классической механики совершенно необычайной простотой **). И именно благодаря этому обстоятельству в квантовой механике цель может быть достигнута с помощью сравнительно простых математических средств, если только следовать гиббсову пути. Так, в дальнейшем окажется возможным доказать эргодическую теорему и H -теорему (которые являются двумя указанными выше постановками вопроса) независимо от каких бы то ни было предположений о беспорядке. Однако прежде, чем переходить к подробному разговору об этом, не лишне сказать несколько слов о понятии макроскопического в квантовой механике.

2. Принципиальной трудностью квантовомеханического воссоздания гиббсовой теории является то, что здесь нельзя избегнуть обращения к понятию «фазового пространства», т. е. — для системы с f степенями свободы — к $2f$ -мерному пространству, описываемому f координатами q_1, \dots, q_f и их f импульсами p_1, \dots, p_f , — все важные для этой цели понятия (энергетическая поверхность, фазовые ячейки, микроканонические и канонические ансамбли и т. д.) определяются в нем. В квантовой механике никак нельзя построить такое фазовое пространство, так как координата q_k и ее импульс p_k не могут быть измерены одновременно, напротив, между их вероятными ошибками (разбросами) Δq_k и Δp_k всегда имеет место соотношение неопределенности $\Delta q_k \cdot \Delta p_k \geq \frac{\hbar}{4\pi}$ ***).

Более того, невозможно даже указать для какого-либо состояния системы два интервала I, J таких, что q_k с достоверностью лежит в I , а p_k с достоверностью лежит в J (этого нельзя сделать и тогда,

*) Ср. (также и для дальнейшего) критическое обсуждение этих условий в работе P. и T. Ehrenfest, Enzyklop. d. Math. Wiss., Bd. IV, 4. D. (Art. 32) и далее Phys. Zs. 8 (1907).

**) Правда, в случае многих специальных проблем дело обстоит как раз наоборот.

***) Ср. W. Heisenberg, Zs. f. Phys. 43, Heft. 3/4 (1927), а также N. Bohr, Naturwissenschaften 16, Heft 15 (1928). Относительно границы $\frac{\hbar}{4\pi}$ см., например, H. Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik, Leipzig, 1928, S. 272.

когда произведение их длин намного больше, чем $\frac{\hbar}{4\pi} ! *$), — так что не только непрерывное фазовое пространство, но и его дискретные разбиения на ячейки лишены смысла! Несмотря на это, в действительности совершенно очевидно и то, что при макроскопических измерениях координаты и импульсы измеряются одновременно, — здесь возникает даже представление, что это возможно благодаря неточности макроскопических измерений, которая намного больше неточности, при которой еще можно было бы опасаться коллизии с соотношениями неопределенности. Как же согласовать эти два противоречащих друг другу обстоятельства?

Мы считаем, что правильной является следующая интерпретация: при макроскопическом одновременном измерении координаты и импульса (или двух других величин, квантовомеханически одновременно не измеримых) в действительности одновременно и точно измеряются две физические величины, только эти величины не являются в точности координатой и импульсом. Пусть, скажем, это будут положения двух стрелок или места двух почернений фотографических пластинок **), — ничто не мешает нам измерить их одновременно и с достаточной точностью, но связь этих величин с реальными интересующими нас физическими величинами (q_k и p_k) довольно неопределенна, причем мерилом этой необходимой по законам природы неточности связи как раз и является соотношение неопределенностей (ср. прим. ***)) на стр. 326).

Математическая формулировка: квантовая механика сопоставляет величинам q_k и p_k известные операторы $Q_k = q_k \dots$ и

*) Это означает, что если волновая функция $\varphi(q_1, \dots, q_f)$ обращается в нуль для всех значений q_k , лежащих вне какого-нибудь конечного интервала I , то ее коэффициенты Фурье $c(p_1, \dots, p_f)$ (мы разлагаем

$$\varphi(q_1, \dots, q_f) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} c(p_1, \dots, p_f) e^{\frac{2\pi i}{\hbar} (p_1 q_1 + \dots + p_f q_f)} dp_1 \dots dp_f)$$

должны всегда $\neq 0$ при произвольно больших p_k .

) Координату и импульс частицы можно представлять себе измеренными в смысле цитированных в прим. *)) на стр. 326 работ, скажем, следующим образом: с одной стороны, частица освещается пучком света, сфокусированным в приблизительном месте ее нахождения, и рассеянный свет фотографируется (координата) и, с другой стороны, частица освещается достаточно монохроматичным и плоскопараллельным пучком света, причем отраженный свет фотографируется после прохождения через призму (для констатации длины волны) (импульс). Естественно, что должна соблюдаться связь между точностями, обусловленная соотношением неопределенностей. Таким образом получаем на двух пластинах два почернения, устанавливающие с известными точностями координату и импульс.

$P_k = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$... *), неперестановочность которых $(Q_k P_k \neq P_k Q_k)$, разность же равна, как известно, $\frac{\hbar}{2\pi i} 1$) соответствует одновременной неизмеримости этих величин **). Предположим теперь, что существуют два других перестановочных оператора Q'_k и P'_k , которые лишь мало отличаются от Q_k , P_k , причем настолько мало, что для их соответственных отклонений мерой являются два числа ΔQ_k и ΔP_k , произведение которых не превосходит существенно $\frac{\hbar}{4\pi}$ из соотношения неопределенностей. (Естественно, что в силу $P_k Q_k - Q_k P_k = = \frac{\hbar}{4\pi i} 1$, $Q'_k P'_k - P'_k Q'_k = 0$ оно не может быть меньше $\frac{\hbar}{4\pi} !$) Немного отличная, но, как легко убедиться, по существу, та же формулировка получается, если заметить следующее: перестановочные операторы Q'_k , P'_k должны обладать полной ортогональной системой общих собственных функций ***), назовем их $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Потребуем тогда от этой системы следующее: в любом состоянии φ_n дисперсии Q_k и P_k меньше, чем ΔQ_k и ΔP_k соответственно (и при этом $\Delta Q_k \cdot \Delta P_k \sim \frac{\hbar}{4\pi}$).

Тогда одновременное измерение Q'_k , P'_k , после которого должно наступать некоторое состояние φ_n , действительно дает нам одновременную информацию относительно Q_k и P_k . Впрочем, достаточно отыскать полную ортогональную систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ с указанными выше свойствами; тогда Q'_k , P'_k могут быть сейчас же установлены — для этого достаточно лишь задать их собственные значения в состояниях φ_n ($n=1, 2, \dots$), каковые собственные значения целесообразно выбрать равными математическим ожиданиям Q_k , P_k в состояниях φ_n ****).

*) Ср. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79, 8 (1926).

) Ср. P. Dirac, Proc. Roy. Soc. 113 (1927) и W. Heisenberg, I. c., прим. * на стр. 326.

***) Будем считать ради простоты, что реально измеренные величины Q'_k , P'_k имеют только дискретный спектр, что бывает на самом деле, если мы имеем дело с конечным объемом. Тогда существование общей системы собственных функций доказывается в точности так же, как в случае обычных (конечномерных) матриц. Ср. по этому поводу Frobenius, J. f. Math. 84 (1877), Hellingер и Toeplitz, Enzykl. d. Math. Wiss., Bd. II, C. 13 (Art. 41).

****) То есть

$$\int_{-\infty}^{\infty} q_k |\varphi_n(q_1, \dots, q_f)|^2 dq_1 \dots dq_f$$

и

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi'_{q_k}(q_1, \dots, q_f) \varphi^*(q_1, \dots, q_f) dq_1 \dots dq_f.$$

Это, по существу, убедительное допущение мы можем теперь подтвердить математически: каковы бы ни были два положительных числа ϵ, η с $\epsilon\eta = C \cdot \frac{h}{4\pi}$ (C — константа,ср. по этому поводу прим. *)), существует полная ортогональная система $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ такая, что в любом состоянии φ_n дисперсии Q_k и P_k будут меньше, чем ϵ, η соответственно *). Задание φ_n и доказательство их свойств приводит к довольно затруднительным выкладкам **), приводить которые мы здесь не станем, тем более что сказанное до сих пор достаточно проясняет принципиально наиболее важное.

Таким образом мы делаем следующее допущение о сущности макроскопических измерений: они являются исключительно измерениями одновременно измеримых величин (с взаимно перестановочными операторами), которые связаны с простыми и не измеримыми одновременно физическими величинами (координаты, импульсы и т. д.) лишь настолько, насколько это допускается соотношениями неопределенности. В дальнейшем изложении работы должно быть показано, как это осуществляется в деталях.

3. Относительно общего формального аппарата квантовой механики надо иметь в виду следующее. Состояния системы будут характеризоваться известным образом комплексными функциями $\psi = \psi(q_1, \dots, q_f)$ (так называемыми волновыми функциями), определенными

*) Как видно, $C \approx 1$ было бы идеальной оценкой (использующей все возможности, допускаемые соотношением неопределенности). Автору удалось лишь достичь $C < 3,600$, но поскольку $\frac{h}{4\pi}$ в макроскопических (CGS)-единицах составляет $\approx 10^{-28}$, то это несущественно.

) Нужно воспользоваться введенными Гейзенбергом, л. с. прим. * на стр. 326, волновыми пакетами

$$e^{-\frac{1}{4\theta^2} q^2 + \left(\frac{a}{2\theta^2} + \frac{2\pi i}{h} b\right) q},$$

— мы пишем q вместо q_k и опускаем остальные из q_1, \dots, q_f , в указанном выше состоянии $Q = q \dots$ и $P = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q} \dots$ имеют средние значения a, b и квадраты дисперсий $\theta^2, \left(\frac{h}{4\pi\theta}\right)^2$ соответственно, — где

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{C}} \epsilon \cdot i; \quad b = \sqrt{\frac{4\pi}{C}} \eta \cdot j = \sqrt{\frac{C}{4\pi}} \frac{h}{\epsilon} \cdot j;$$

$$\theta = \frac{1}{\sqrt{C}} \epsilon \text{ и } i, j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Получающиеся таким образом функции записываются в каком-нибудь порядке в виде последовательности и затем, согласно Шмидту (E. Schmidt, Math. Ann. 63 (1907)), «ортогонализируются». Это дает желаемую систему $\varphi_1, \varphi_2, \dots$

в «пространстве состояний» системы, т. е. в f -мерном пространстве, описываемом f координатами q_1, \dots, q_f , физические же величины — эрмитовыми операторами A, B, \dots). Важнейшими операциями с этими объектами являются: «внутреннее произведение»

$$(\varphi, \psi) = \int \dots \int \varphi(q_1, \dots, q_f) \psi(q_1, \dots, q_f)^* dq_1 \dots dq_f$$

(* мы обозначаем комплексное сопряжение) и «абсолютная величина»

$$|\varphi| = \sqrt{(\varphi, \varphi)} = \sqrt{\int \dots \int |\varphi(q_1, \dots, q_f)|^2 dq_1 \dots dq_f} (**).$$

Простейшее описание состояний с помощью волновой функции φ дается так: математическое ожидание величины A в состоянии φ равняется $(A\varphi, \varphi)$. Задание всех математических ожиданий означает, поскольку одновременно с этим становятся известными математические ожидания всех степеней (т. е. так называемые высшие моменты распределения вероятностей), знание всего распределения вероятностей любой величины, т. е. полную статистическую характеристику системы ***).

Нам нужна также статистика величин в системе, в которой имеется не одно состояние φ , а много состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ с соответствующими вероятностями w_1, w_2, \dots Тогда математическое ожидание A равно, очевидно, $\sum_n w_n (A\varphi_n, \varphi_n)$, что удобнее записать по-другому.

Именно, будем описывать оператор A в некоторой полной ортогональной системе функций матрицей $a_{\mu\nu}$, а функции φ_n — векторами $x_\mu^n (\mu, \nu = 1, 2, \dots)$ ****). Тогда

$$\sum_n w_n (A\varphi_n, \varphi_n) = \sum_n w_n \sum_{\mu, \nu} a_{\mu\nu} x_\mu^n x_\nu^n = \sum_{\mu, \nu} a_{\mu\nu} \left[\sum_n w_n x_\nu^n x_\mu^n \right],$$

т. е. если обозначить через U оператор с матрицей $\sum_n w_n x_\mu^n x_\nu^n$, то рассматриваемое выражение будет равно шпуру от AU *****). Тем са-

*) В способе обозначений и методах, используемых ниже, мы придерживаемся работы автора в Gött. Nachr. 11 Nov. 1927, S. 245 — 272. Однако все необходимое для поставленной цели будет резюмировано здесь.

**) Вычисления с этими объектами описываются вкратце, например, в работе автора в Gött. Nachr., 20 Mai 1927, S. 1 — 57.

***) Ср. Dirac, I. c., прим. ***) на стр. 328 и работу автора, I. c., прим. *).

****) Ср. I. c., прим. **).

*****) Ср. I. c., прим. *) и далее Dirac, Proc. Combr. Phil. Soc., 29 Oct. 1928. Шпур — это сумма диагональных элементов матрицы; так как эта сумма инвариантна по отношению к унитарным преобразованиям, то можно просто говорить о шпуре оператора безотносительно к определенной полной ортогональной системе функций.

мым статистическое поведение введенных смесей многих состояний характеризуется оператором U на основании правила: математическое ожидание A равняется $\text{Spr}(AU)$. Мы называем U статистическим оператором смеси. Как видно, знания его достаточно для описания смесей, причем нет нужды задавать отдельные состояния, из которых состоит смесь.

Кроме того, удобно ввести особое обозначение для оператора с матрицей $x_\mu x_\nu^*$ (x_μ — вектор волновой функции φ): P_φ . Легко верифицировать и другое определение: $P_\varphi f = (f, \varphi) \cdot \varphi$ (f — любая другая волновая функция). Тогда будет $U = \sum_n w_n P_{\varphi_n}$, в частности P_φ

является статистическим оператором самого состояния φ .

4. Теперь мы можем непосредственно перейти к (квантовомеханической) формулировке эргодической теоремы. А именно, мы обсудим сначала два подхода, которые хоть и не решают саму проблему, но, как нам кажется, проясняют и делают более прозрачными существующие здесь соотношения.

Классическая формулировка эргодической теоремы (точнее, квазиэргодической теоремы) звучит так: точка фазового пространства, изображающая систему, в своем движении (определенном из дифференциальных уравнений механики) сколь угодно близко приближается к любой точке энергетической поверхности системы, при этом время, проводимое изображающей точкой в среднем за большой промежуток времени в какой-нибудь области энергетической поверхности, пропорционально объему этой области *). Тем самым в случае заданного состояния статистические свойства временного ансамбля (который получается усреднением каждой величины по всем временам) оказываются тождественными статистическим свойствам его микроканонического ансамбля. Этот последний представляет собой смесь всех точек, изображающих систему, лежащих на энергетической поверхности, причем кускам поверхности равной площади (ср. прим. *) приписываются равные веса.

Пусть теперь в квантовомеханической формулировке H будет оператором энергии, $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — его собственными функциями **), а W_1 ,

*) В качестве объема, как известно, здесь берется не $(2f - 1)$ -мерная площадь энергетической поверхности, а $2f$ -мерный объем прилегающего к энергетической поверхности слоя, т. е. интеграл от обратного градиента энергии по указанному куску поверхности. — На существенную (и часто недооцениваемую) разницу между двумя половинами приведенной в тексте формулировки квазиэргодической теоремы указывали П. и Т. Эренфесты (т. с., прим. *) на стр. 326): вторая половина неизбежно необходима для обоснования статистической механики Гиббса.

**) Точнее, некоторая полная ортогональная система, образованная из них, — система координат, в которой H — диагонален. (Мы предполагаем, что сплошной спектр отсутствует.)

W_2, \dots — соответствующими собственными значениями. Состояние $\psi = \sum_n a_n \cdot \varphi_n$ эволюционирует с течением времени t (≥ 0) в смысле временного дифференциального уравнения Шредингера следующим образом:

$$\psi_t = \sum_n a_n e^{\frac{2\pi i}{\hbar} W_n t} \cdot \varphi_n = \sum_n a_n(t) \varphi_n.$$

Прежде всего, здесь надо теперь проанализировать несколько подробнее понятие энергетической поверхности. Именно, с течением времени постоянными остаются все $|a_n(t)|^2 = |a_n|^2$, а не только математическое ожидание энергии $(H\psi_t, \psi_t) = \sum_n |a_n(t)|^2 W_n$. Поскольку

эти $|a_n(t)|^2$ характеризуют всю энергетическую статистику *), мы можем сказать так: Закон сохранения энергии классической механики переносится в квантовую механику не просто в форме сохранения только средних значений, но в форме сохранения распределения вероятностей энергии. Если бы мы определили квантовомеханическую «энергетическую поверхность», казалось бы, естественным образом с помощью $\sum_n |a_n|^2 W_n = \text{const}$, то о справедливости эргодической теоремы не могло бы быть и речи — ведь существует бесконечно много «интегралов движения» $|a_1|^2, |a_2|^2, \dots$. Ее надо определить, скорее, посредством $|a_1|^2 = \text{const}_1, |a_2|^2 = \text{const}_2, \dots$

Так возникает вопрос: Будь $a_n = r_n \cdot e^{ia_n}$ ($r_n \geq 0, 0 \leq a_n < 2\pi$), тогда энергетическая поверхность состоит из всех $\psi = \sum_n a_n \cdot \varphi_n$ с $a_n = r_n \cdot e^{ia'_n}$ ($0 \leq a'_n < 2\pi$). Подходит ли тогда $a_n(t) = r_n \cdot e^{i(\frac{2\pi}{\hbar} W_n t + a_n)}$ произвольно близко ко всем a'_n , т. е. $\frac{2\pi}{\hbar} W_n t + a_n$ — к a'_n (конечно по $\text{mod } 2\pi$, причем для всех $n = 1, 2, \dots$), и как велики будут «относительные времена пребывания» в заданных a'_n -интервалах? Мы можем спросить и так: Будет ли $\frac{W_n}{\hbar} t$ сколь угодно близко подходить

для надлежащего t к произвольной системе $\frac{a'_n - a_n}{2\pi}$ ($\text{mod } 1$ для всех $n = 1, 2, \dots$), и каковы будут относительные времена пребывания? Согласно теоремам Кронекера для выполнения первой половины требования необходимой и достаточной является целочисленно-линейная независимость $\frac{W_n}{\hbar}$ между собой, т. е. условие, что не существует

*) Например потому, что они, согласно $(H\psi_t, \psi_t) = \sum_n |a_n(t)|^2 W_n^k$, определяют математические ожидания всех степеней энергии, т. е. все моменты ее статистики.

соотношения $x_1 \frac{W_1}{h} + \dots + x_n \frac{W_n}{h} = 0$ (n произвольно велико, но конечно; x_1, \dots, x_n целочисленны), если только не имеет места равенство $x_1 = \dots = x_n = 0^*$). Из дальнейших теорем Вейля следует, что в этом случае времена пребывания также оказываются правильными, а именно, они пропорциональны произведениям длин интервалов **). Итак, в этой формулировке эргодическая теорема вытекает из того, что между термами $\frac{W_n}{h}$ системы не имеется резонансов ***).

Собственно, мы здесь потребовали даже слишком много: действительно истинным, существенным для всех приложений, ядром эргодической теоремы является, как уже упоминалось выше, соответствие между временным ансамблем и микроканоническим ансамблем, а вовсе не вопрос о том, какой именно путь проделывает на энергетической поверхности точка, изображающая систему. Как мы знаем из З., для этого необходимо лишь соответствие между статистическими операторами этих двух ансамблей (их «настоящий» состав в отношении волновых функций здесь заведомо не может быть установлен).

Пусть теперь ψ_t имеет статистический оператор P_{ψ_t} , тогда речь идет о том, что он один раз усредняется (при фиксированных α_n) по всем t (временной ансамбль), а другой раз — при $t=0$ по всем α_n (мы пишем α_n вместо α'_n , т. е. микроканонический ансамбль). Запишем оператор P_{ψ_t} в виде матрицы в системе координат $\varphi_1, \varphi_2, \dots$

В силу того, что $\psi_t = \sum_n r_n e^{i(\frac{2\pi}{h} W_n t + \alpha_n)} \cdot \varphi_n$, его m, n -компоненты будут равны $r_m r_n e^{i(\frac{2\pi}{h} (W_m - W_n) t + (\alpha_m - \alpha_n))}$. Усредняя ее по всем α_l , получаем 0 при $m \neq n$ и r_m^2 при $m = n$. Чтобы тот же результат

*) Ср. К. Гопескер, Ber. d. Preuß. Akad. d. Wiss. zu Berlin, 1884, S. 1071—1080, 1179—1193, 1271—1299.

**) Ср. Weyl, Math. Ann. 77 (1915).

***) Может показаться странным, что здесь фигурируют $\frac{W_n}{h}$, а не $\frac{W_m - W_n}{h}$, но это связано с некоторой неточностью нашего рассмотрения. А именно, постоянный множитель (с модулем 1) не имеет смысла для волновой функции ψ (например, он выпадает из статистического оператора P_ψ), поэтому мы должны были бы, собственно говоря, налагать указанные выше требования не на сами фазы $\frac{2\pi}{h} W_n t + \alpha_n$, но лишь на их разности, скажем, на $\frac{2\pi}{h} (W_n - W_1) t + (\alpha_n - \alpha_1)$ ($n = 2, 3, \dots$). Тогда мы снова получаем требования из текста, но уже относящиеся к собственным частотам $\frac{W_n - W_1}{h}$ ($n = 2, 3, \dots$).

получился при усреднении по t , должно быть $\frac{2\pi}{h} (W_m - W_n) \neq 0$, т. е.

$W_m \neq W_n$, при $m \neq n$. Это означает: вырождение должно полностью отсутствовать (условие намного более слабое, чем предыдущее!).

Тем самым эргодическая теорема была бы доказана, казалось бы, в удовлетворительном объеме. Тем не менее этот результат не может нас удовлетворить, поскольку здесь ничего не говорится о роли макроскопичности. Ведь мы здесь оперировали с совершенно точно заданными системами, так, например, энергетическая поверхность описывалась точным заданием всех $|a_n|^2$. Для того чтобы подойти к только частично известным системам статистической механики, нам надо еще несколько модифицировать нашу постановку вопроса *).

5. Эта модификация должна состоять в первую очередь в том, что надо макроскопически переосмыслить понятие энергетической поверхности, т. е. надо расширить микроканонический ансамбль до совокупности всех состояний, энергетические статистики которых макроскопически неотличимы от энергетической статистики данных состояний. При таких обстоятельствах соответствие между временными и микроскопическими средними следует требовать лишь для макроскопических величин. Но зато это ослабление влечет за собой существенное усиление, которое становится возможным лишь при макроскопическом способе рассмотрения. А именно, мы покажем, что для любого состояния системы значение любой (макроскопически измеримой) величины не только имеет микроканоническое среднее в качестве временного среднего, но и обладает малой дисперсией, т. е. временные точки, в которых значение отклоняется от среднего не мало, очень редки.

Полезно сравнить это с соответствующими соображениями из классической теории. Там указанную теорему, эквивалентную оправданию статистически-механических методов, разбивают на два шага следующим образом: прежде всего надо показать, что для любой величины временная статистика совпадает с микроканонической, а затем, что для так называемых макроскопических величин последняя имеет малую дисперсию. Первое утверждение как раз и является классической квазиэргодической теоремой, которая не может быть доказана в настоящее время, а второе, напротив, можно легко доказать с помощью комбинаторных вычислений **). Взамен этого, как уже было сказано, мы будем называть эргодической теоремой указанное выше следствие из обеих частей.

*) То, что доказанная только что теорема не может быть правильной эргодической теоремой, видно также из того, что ее предпосылки (невырожденные энергии) являются слишком слабыми: они сохраняют силу для известного контрпримера против классической эргодической теоремы! Ср. III., 3.

**) Ср., в особенности, I, с., прим. *) на стр. 326.

Более точная дискуссия будет приведена в ходе этой работы, здесь же мы укажем только на два следующих обстоятельства: во-первых, в нашей формулировке эргодической теоремы мы потребуем, чтобы намеченное выше временное поведение действительно имело место для каждого начального состояния системы (для любого ψ) **без исключения** (классически можно было бы вполне допустить исключения в частях энергетической поверхности, имеющих меньшую размерность). Во-вторых, надо подчеркнуть, что реальное состояние, с которым мы и работаем, является волновой функцией, т. е. чем-то микроскопическим, — если бы мы здесь действовали макроскопически, то это означало бы введение гипотезы о беспорядке, но мы как раз этого хотим безусловно избежать. То же самое можно сказать и об операторе энергии, который фигурирует в зависящем от времени дифференциальном уравнении Шредингера *), его тоже надо рассматривать точно (микроскопически). (Иначе, конечно, будет при построении энергетической поверхности, что будет видно из дальнейшей дискуссии.) Переходим теперь после сказанного к небольшому разговору об условиях, которые оказываются необходимыми для справедливости эргодической теоремы.

6. Они распадаются на две группы: во-первых, те, которые относятся к (микроскопическому) оператору энергии H , во-вторых, те, которые относятся к подразделению (макроскопической) энергетической поверхности на фазовые ячейки и к величине последних. (Дальше мы точно установим, что следует понимать квантовомеханически под энергетической поверхностью, фазовыми ячейками и другими конструкциями в фазовом пространстве; предварительно же вполне достаточно будет оперировать с этими понятиями так, как это было обычным в доквантовомеханической теории. В частности, под фазовыми ячейками мы понимаем такие подразделения фазового пространства, которые могут быть осуществлены с помощью макроскопических измерений.)

Относительно энергии оказывается: разности термов (собственные колебания) должны отличаться друг от друга, а также и сами термы (отсутствие вырождения!), т. е. если W_1, W_2, \dots являются собственными значениями, то все $W_m - W_n$ ($m \neq n$) должны отличаться друг от друга, а также и все W_n . (Допустимы даже редкие исключения!) Как видно, по своей силе это условие занимает промежуточное положение между двумя найденными в 4. В разумности этого условия мы убедимся в разделе III. 3. этой работы. В частности, мы увидим, что оно нарушается как раз в классических контрпримерах против эргодической теоремы (идеальный газ без соударений, объем, заполнен-

*) Оно гласит $\frac{\partial}{\partial t} \psi_t = \frac{2\pi i}{\hbar} H \psi_t$; в 4. мы воспользовались его явным решением.

ненный излучением без поглощения) и опять восстанавливается известными (но признаваемыми действенными лишь эвристически) контрправилами (введение столкновений, а также поглощений и испусканий соответственно).

Относительно величины фазовых ячеек получается в существенном следующее: *число состояний (квантовых орбит) в каждой фазовой ячейке не только должно быть очень велико, но в среднем должно быть все еще велико по сравнению с числом фазовых ячеек на их энергетической поверхности.* Более подробное разъяснение этого условия оставим до дальнейших обсуждений этой работы, здесь же укажем только на следующее: если совершать предельный переход $\hbar \rightarrow 0$ (так что квантовая механика приближается к классической), но не менять макроскопическую технику измерений, то первое число будет неограниченно возрастать, тогда как второе будет постоянным, так что наше условие выполняется все лучше. Итак, его выполнимость обеспечена во всяком случае, если макроскопическая техника измерений слишком груба, чтобы достигнуть квантовых эффектов (тогда \hbar практически равно 0).

Еще остается сформулировать *H*-теорему (которую мы тоже докажем). Мы можем естественным образом сопоставить каждому состоянию ψ энтропию, а равным образом и его микроканонический ансамбль *), а затем проследим за временным изменением энтропии и сравним ее первоначальное значение с конечным (последнее, как легко показать, всегда \geq начального). Как и в классической механике, здесь также не может быть и речи о постоянном возрастании энтропии и тем менее о преимущественно положительном знаке ее производной (или же отношения разностей): здесь, как и там, остаются в силе возражения, связанные с обратимостью и повторимостью. В духе обсуждения этого обстоятельства, проведенного П. и Т. Эренфестами (ср. I. с., прим. *) на стр. 326), мы склонны скорее видеть существенную часть утверждения *H*-теоремы в следующем: временная средняя энтропии состояния ψ , лишь мало отличается от энтропии микроканонического ансамбля, — и поскольку последняя является верхней гранью для первой, это означает, что энтропия состояния ψ , спускается сколько-нибудь заметно ниже границы лишь очень редко.

Мы увидим, что *H*-теорема справедлива при тех же предположениях, что и эргодическая теорема.

Итак, резюмируя, можно сказать вот что: В квантовой механике эргодическую теорему и *H*-теорему можно доказать во всей строгости и без гипотезы о беспорядке, тем самым устанавливается гарантированная применимость статистически-механических методов к термодинамике без привлечения каких бы то ни было дальнейших

*) Ср. конец I. З., где приводятся подробности относительно связи этой энтропии с энтропией, определенной автором в Gött. Nachr., 11 Nov. 1927, S. 273—291.

гипотез *). Совершенно ясно, конечно, что это связано с тем обстоятельством, что, как и дифференциальные уравнения классической механики, зависящее от времени уравнение Шредингера, лежащее в основе квантовой механики, обладает свойством обратимости и повторимости *), ввиду чего само по себе не может быть достаточным для объяснения необратимых процессов **).

7. Можно было бы сказать еще несколько слов о связи этой работы с другими квантовомеханическими исследованиями вопросов статистической механики и термодинамики. Статьи Шредингера *), а также Нордгейма ****) и Паули ****) описывают макроскопические соотношения на основании предположения о беспорядке, а потому относятся к другому направлению. Одна более ранняя работа автора стоит полностью на микроскопической точке зрения и также преследует другую цель: из предположенной справедливости феноменологического второго закона термодинамики сделать вывод относительно величины энтропии.

Автор хотел бы здесь подчеркнуть, что он считает себя обязанным выразить глубокую благодарность Е. Вигнеру за многочисленные обсуждения, в процессе которых возникли постановки вопросов этой работы.

I. Квантовомеханическая формулировка основных понятий статистической механики Гиббса

1. Как говорилось и было обосновано во введении, мы исходим из того, что вообще все макроскопически возможные наблюдения могут быть совершены одновременно. Их операторы коммутируют, следовательно, между собой, а потому существует полная ортогональная система $\omega_1, \omega_2, \dots$ волновых функций, которые для каждого оператора являются собственными функциями (ср. прим. *) на стр. 328). При этом следует ожидать, что среди $\omega_1, \omega_2, \dots$ имеются группы многих ω_n , для которых макроскопические операторы имеют одни и те же собственные значения: ведь в противном случае проведение

*) Ср. по этому поводу рассуждения Schrödinger'a, Ann. d. Phys. 83, 15 (1927), в особенности в последнем параграфе. Наши результаты позволяют провести его рассуждения без допускаемого им «статистического предположения» (гипотезы о беспорядке), т. е. свести во всей строгости к обычной статистической интерпретации квантовой механики. Тем самым дается ответ на поднятый Шредингером I. с. вопрос, надо ли и в квантовой механике бороться с эргодическими трудностями.

**) Правда, квантовая механика знает один необратимый элементарный процесс, а именно, процесс измерения. Этот процесс необратим (ср. I. с., определение указанных процессов дается там в прим. 2¹), стр. 283), но, имеет ли он какое-нибудь отношение к необратимости реально происходящего, остается невыясненным. В этой работе мы не будем больше останавливаться на этом.

***) L. Nordheim, Proc. Roy. Soc. 119 (1928).

****) W. Pauli, Sommerfeld-Festschrift, 1928, S. 30—45.

всех макроскопически возможных наблюдений позволяло бы добиться полного различия между $\omega_1, \omega_2, \dots$ (т. е. абсолютно точного определения состояний, что, вообще говоря, не так). Эти группы будем обозначать (заменяя применявшуюся до сих пор простую систему индексов $n = 1, 2, \dots$ двойной $p = 1, 2, \dots$ и $\lambda = 1, \dots, s_p$) через $\{\omega_{1,p}, \dots, \omega_{s_p,p}\}$, $p = 1, 2, \dots$, так что для всех макроскопических величин *) группы $\omega_{1,p}, \dots, \omega_{s_p,p}$ представляют собой взаимно вырожденные функции. Поэтому система $\omega_{1,p}, \dots, \omega_{s_p,p}$ равнозначна любой системе $\omega'_{1,p}, \dots, \omega'_{s_p,p}$, которая получается из первой с помощью линейного унитарного преобразования.

Если все состояния одной группы $\{\omega_{1,p}, \dots, \omega_{s_p,p}\}$ смешиваются с весами $1 : \dots : 1$, то получается статистический ансамбль со стати-

стическим оператором $\frac{1}{s_p} E_p = \frac{1}{s_p} \sum_{\lambda=1}^{s_p} P_{\omega_{\lambda,p}}$, причем этот оператор E_p не изменяется при замене $\omega_{\lambda,p}$ на любые $\omega'_{\lambda,p}$ (ср. выше), в чем легко убедиться. Каждый макроскопический оператор имеет $\omega_{\lambda,p}$ в качестве собственных функций, т. е. является линейной комбинацией операторов $P_{\omega_{\lambda,p}}$ с коэффициентами, равными собственным значениям **), а поскольку все $\omega_{\lambda,p}$ с одним и тем же p имеют одно и то же собственное значение, то будет также линейной комбинацией E_p , — отметим это для дальнейшего.

В остальном $\frac{1}{s_p} E_p$ является, как это видно из его построения, статистическим оператором ансамбля, для которого все макроскопические величины имеют значения, относящиеся к p -й группе (при этом все из s_p квантовых орбит обладают одними и теми же весами), — он соответствует таким образом p -й из альтернатив, относящихся к свойствам системы, которые могут быть отличены друг от друга с помощью макроскопических измерений. Тем самым он является эквивалентом «фазовых ячеек» ста-

*) Макроскопической величиной является такая величина, значения которой могут быть точно установлены с помощью макроскопических измерений. Итак, если A может принимать все значения от $-\infty$ до $+\infty$, а макроскопическая неопределенность характеризуется тем, что эти значения можно различить между собой лишь для различных интервалов $k, k+1$ ($k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), то тогда макроскопически измеримой будет лишь $f(A)$, где $f(x)$ является следующей функцией: $f(x) = k$ для $k \leq x < k+1$ ($k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Ср. также дискуссию во введении 2 и прим. *) на стр. 327.

**) Эрмитов оператор с собственными функциями χ_1, χ_2, \dots и с соответствующими собственными значениями w_1, w_2, \dots должен равняться $\sum_n w_{\chi n} P_n$. Ср. также I. с., прим. *) на стр. 330.

тистической механики Гиббса. Число $s_p = \text{Spur } E_p$ (Spur означает шпур, ср. прим. *****) на стр. 330) является числом истинных (микроскопических) состояний, т. е. квантовых орбит в этой ячейке, — его величина является, таким образом, мерой грубости макроскопического способа рассмотрения.

2. Рассмотрим теперь оператор энергии H с собственными функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ и собственными значениями W_1, W_2, \dots соответственно, так что $H = \sum_n W_n P_{\varphi_n}$. Следует подчеркнуть, что H должен быть *точным оператором энергии*, а вовсе не каким-нибудь макроскопическим приближением.

Функции φ_n , в общем, не являются функциями $\omega_{\lambda, p}$ и H не есть линейная комбинация E_p , так как энергия, не будучи макроскопической величиной, не может быть измерена абсолютно точно с помощью макроскопических средств *). Но с известной (незначительной) точностью это все же возможно, т. е. можно подразделить собственные значения энергии W_1, W_2, \dots системы на группы $\{W_{1,a}, \dots, W_{S_a,a}\}$ (мы здесь снова заменяем простую нумерацию W_n, φ_n с $n = 1, 2, \dots$ на двойную $W_{p,a}, \varphi_{p,a}$ с $a = 1, 2, \dots, p = 1, \dots, S_a$) таким образом, что все $W_{p,a}$ с одним и тем же a расположены близко друг к другу и лишь те из них, для которых a отличаются между собой (т. е. полные группы) могут быть различны макроскопически. Как сформулировать теперь, что уже сама принадлежность значений энергии к одной группе $\{W_{1,a}, \dots, W_{S_a,a}\}$ макроскопически измерима?

Мы сделаем это, применив упомянутый выше и неоднократно используемый в 1. с., прим. *), стр. 330, искусственный прием. Пусть $f_a(x)$ — функция, которая для $x = W_{1,a}, \dots, W_{S_a,a}$ (a фиксировано) принимает значение 1, а в остальных случаях — 0. Тогда $f_a(H)$ будет величиной, которая имеет значение 1, когда значение энергии принадлежит к указанной группе, и 0 в остальных случаях, — следовательно, она макроскопически измерима. Из $H = \sum_n W_n P_{\varphi_n}$ следует

$$f_a(H) = \sum_n f_a(W_n) P_{\varphi_n} \quad (\text{ср. 1. с., прим. **}), \quad \text{стр. 329}, \quad \text{так что}$$

$$= \sum_{p=1}^{S_a} P_{\varphi_{p,a}}, \quad \text{а эта последняя группа должна быть линейной ком-}$$

бинацией E_p . Далее $\sum_{p=1}^{S_a} P_{\varphi_{p,a}}$, а также и каждый $E_p = \sum_{\lambda=1}^{S_p} P_{\omega_{\lambda,p}}$ равняется своему квадрату, а произведение любых двух различных E_p

*) Вспомним хотя бы условия наблюдения обычного газа! Конечно, в принципе энергия с дискретным спектром (ср. стр. 332) при благоприятных обстоятельствах измерима с абсолютной точностью: можно, например, рассудить, находится осциллятор в основном состоянии или нет.

равно 0 *); отсюда следует, что в упомянутой линейной комбинации E_p каждый из коэффициентов равен своему собственному квадрату, т. е.

равен 0 или 1. Итак, $\sum_{p=1}^{S_a} P_{\varphi_p, a}$ является просто суммой нескольких E_p , которые можно назвать $E_{1, a}, \dots, E_{N_a, a}$:

$$\sum_{p=1}^{S_a} P_{\varphi_p, a} = \sum_{v=1}^{N_a} E_{v, a}.$$

(Взяв шпур от этого равенства, получим $S_a = \sum_{v=1}^{N_a} s_{v, a}$.) Поскольку,

согласно сказанному выше, произведение сумм $\sum_{v=1}^{N_a} E_{v, a}$ и $\sum_{v=1}^{N_b} E_{v, b}$ ($a \neq b$) равно сумме слагаемых E_p , общих обеим суммам, и поскольку,

с другой стороны, это произведение равно произведению сумм $\sum_{p=1}^{S_a} P_{\varphi_p, a}$

и $\sum_{p=1}^{S_b} P_{\varphi_p, b}$, которое обращается в нуль, то сумма общих E_p равна 0.

Итак, общих слагаемых нет, потому что сумма нескольких E_p , т. е. нескольких P_{ω_n} , никогда не исчезает **). Наконец, $E_{v, a}$ исчерпывают E_p (до сих пор мы знали только, что они образуют взаимно однозначную систему индексов некоторого подмножества), что, согласно только что сделанному замечанию, будет гарантировано, если только

будет доказано равенство $\sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} E_{v, a} = \sum_{p=1}^{\infty} E_p$. Левая часть является суммой всех $E_{v, a}$, т. е. всех $P_{\varphi_p, a}$, т. е. 1 (в случае полной ортогональной системы χ_1, χ_2, \dots сумма всех P_{χ_n} равняется 1 ***), а φ_p, a образуют полную ортогональную систему); правая часть является суммой всех E_p , т. е. суммой всех $P_{\omega_{\lambda}},$, т. е. тоже 1 (ω_{λ}, p также

*) Это будет доказано, если мы сможем показать, что для произвольных двух (но различных) элементов φ, ψ некоторой ортогональной системы функций имеют место соотношения $P_{\varphi}^2 = P_{\varphi}, P_{\varphi}P_{\psi} = 0$. Пусть f — какая-нибудь волновая функция, тогда (ср. введение, 3.)

$$P_{\varphi}^2 f = ((f, \varphi) \cdot \varphi, \varphi) \cdot \varphi = (f, \varphi) \cdot (\varphi, \varphi) \cdot \varphi = (f, \varphi) \cdot \varphi = P_{\varphi} f,$$

$$P_{\varphi} P_{\psi} f = ((f, \psi) \cdot \psi, \varphi) \cdot \varphi = (f, \psi) \cdot (\psi, \varphi) \cdot \varphi = 0.$$

**) Из $P_{\omega'} + P_{\omega''} + \dots = 0$ (ω', ω'', \dots взаимно ортогональны), если умножить его на $P_{\omega'}$, следует равенство $P_{\omega'} = 0$, что заведомо неверно.

***) Если привлечь матричное определение оператора P_{χ} (введение, 3.), то можно убедиться, что это тождественно обычной форме соотношений полноты. Ср. также I. с., прим. *) на стр. 330.

образуют полную ортогональную систему), — вместе с тем все доказано.

Таким образом, $E_{v,a}$, $s_{v,a}$ с $a = 1, 2, \dots, v = 1, \dots, N_a$ — это просто заново перенумерованные E_p , s_p с $p = 1, 2, \dots$. Соответственно будем писать $\omega_{\lambda,v,a}$ вместо $\omega_{\lambda,p}$. Положим

$$\Delta_a = \sum_{p=1}^{S_a} P_{\varphi_p, a} = \sum_{v=1}^{N_a} E_{v,a}.$$

Как видно, $\frac{1}{S_a} \Delta_a$ является смесью состояний $\varphi_{1,a}, \dots, \varphi_{S_a,a}$ с весами $1 : \dots : 1$ или же смесью обсуждавшихся выше смесей $\frac{1}{s_{1,a}} E_{1,a}, \dots, \frac{1}{s_{N_a,a}} E_{N_a,a}$, соответствующих фазовым ячейкам с весами $s_{1,a} : \dots : s_{N_a,a}$.

Вполне понятно, с другой стороны, что является аналогом этих представлений в гиббсовой теории: $\frac{1}{S_a} \Delta_a$ соответствует энегетической поверхности, т. е. микроканоническому ансамблю, N_a является числом фазовых ячеек $E_{v,a}$ на энегетической поверхности и $S_a = \text{Sprg } \Delta_a$ является числом истинных состояний, т. е. стационарных квантовых орбит на энегетической поверхности.

Макроскопически возможные измерения энергии разбивают тем самым множество мыслимых состояний на энегетические поверхности, соответствующие Δ_a , $a = 1, 2, \dots$; дальнейшие измерения энергии (которые разбили бы Δ_a на $\varphi_{p,a}$, $p = 1, \dots, S_a$) с этими средствами невозможны. Если же дальнейшие измерения все-таки макроскопически возможны, то они должны относиться к таким величинам, операторы которых не коммутируют с H , т. е. к величинам, которые не могут быть измерены одновременно (с микроскопической) энергией. На классическом языке это означает, что они относятся к неинтегралам движения, к изменяющимся во времени величинам *). Эти измерения разбивают энегетическую поверхность Δ_a на фазовые ячейки $E_{v,a}$, $v = 1, \dots, N_a$. Дальнейшее разбиение (которое разбивало бы $E_{v,a}$ на $\omega_{\lambda,v,a}$; $\lambda = 1, \dots, s_{v,a}$) макроскопически вообще невозможно.

Тем самым величина N_a является мерой того, насколько сильно пересекаются макроскопические методы измерения величин, неизмеримых одновременно с энергией, т. е. в какой мере неточность макроскопических измерений энергии обусловлена естественным образом

*) Например, в случае газа, заключенного в сосуде K , полная энергия молекул, находящихся в левой половине K , с известной точностью макроскопически измерима, но она не является интегралом и колеблется во времени.

соотношениями неопределенностей. Напротив, величина $s_{v,a}$ (т. е. величина фазовых ячеек $E_{v,a}$) является мерой неточности макроскопических методов как таковых, т. е. вытекающей из их неполноты. Неточность, связанная с N_a , компенсируется знанием неинтегралов, она не является слабой стороной нашей измерительной аппаратуры, но зато неточность, связанная с $s_{v,a}$, таковой является.

Наконец, $S_a = \sum_{v=1}^{N_a} s_{v,a}$ является мерой для произведения обеих неточностей: для полной, настоящей неточности измерения энергии.

3. Пусть теперь задано произвольное состояние ψ (волновая функция ψ нормирована, т. е. $|\psi|^2 = (\psi, \psi) = 1$). Вероятность того, что при макроскопическом измерении в этом состоянии будет получено значение из фазовой ячейки $E_{v,a}$, равняется, как известно, сумме вероятностей переходов из этого состояния в состояния, описываемые собственными функциями $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{S_{v,a}}$, образующими $E_{v,a}$, т. е.

$$\sum_{\lambda=1}^{S_{v,a}} |(\psi, \omega_{\lambda}, v, a)|^2 = \sum_{\lambda=1}^{S_{v,a}} (P_{\omega_{\lambda}, v, a} \psi, \psi) = (E_{v,a} \psi, \psi).$$

Можно сказать, что настолько плотно занята ячейка $E_{v,a}$ в состоянии ψ . Для того чтобы значение энергии относилось к группе $\{W_{1,a}, \dots, W_{S_a,a}\}$, получается соответственно выражение

$$\sum_{\rho=1}^{S_a} |(\psi, \varphi_{\rho}, a)|^2 = \sum_{\rho=1}^{S_a} (P_{\varphi_{\rho}, a} \psi, \psi) = (\Delta_a \psi, \psi).$$

Это является также числом заполнения энергетической поверхности Δ_a . В духе этих представлений имеем

$$\sum_{v=1}^{N_a} (E_{v,a} \psi, \psi) = (\Delta_a \psi, \psi), \quad \sum_{a=1}^{\infty} (\Delta_a \psi, \psi) = (\psi, \psi) = 1.$$

Теперь мы можем определить микроканонический ансамбль, принадлежащий состоянию ψ , т. е. задать его статистический оператор. Если бы одно только $(\Delta_a \psi, \psi)$ равнялось 1, а все остальные были бы равны 0 *), то мы должны были бы, конечно, выбрать в качестве статистического оператора оператор $\frac{1}{S_a} \Delta_a$, рассматривающийся уже в 2. **). Если же несколько (или все) $(\Delta_a \psi, \psi) \neq 0$, то надо определять

*) Отметим, что все наши «числа заполнения» по своему построению ≥ 0 .

**) В 1. с., прим. *) на стр. 330 приводились общие основания для того, чтобы всегда этот статистический оператор принадлежал тому статистическому ансамблю, о котором известно лишь то, что его энергия лежит в a -й группе.

по-другому, а именно установим, что тогда должна браться смесь $\frac{1}{S_1} \Delta_1, \frac{1}{S_2} \Delta_2, \dots$ с весами $(\Delta_1 \psi, \psi) : (\Delta_2 \psi, \psi) : \dots$. Микроканонический ансамбль будет иметь тогда следующий статистический оператор:

$$U_\psi = \sum_{a=1}^{\infty} \frac{(\Delta_a \psi, \psi)}{S_a} \Delta_a.$$

Собственно, оправданием этого определения является лишь последующий успех: эргодическая теорема и H -теорема справедливы лишь в этом случае. (Во всех практических случаях, конечно, все $(\Delta_a \psi, \psi)$, кроме одного-единственного, очень малы.)

Остается еще определить энтропии для ψ и U_ψ (самого состояния и относящегося к нему (виртуального) микроканонического ансамбля). Не имеет смысла пользоваться здесь выражениями для энтропии, данными автором, так как они вычислены с точки зрения наблюдателя, который может проделать все принципиально возможные измерения, т. е. безотносительно к макроскопии (например, каждое состояние («чистый случай») имеет там энтропию 0 и лишь смеси имеют энтропию > 0 !). Если принять во внимание, что наблюдатель способен измерять только в макроскопическом смысле, то придем к другим выражениям для энтропии (имеющим большие значения, так как наблюдатель теперь менее удачлив и при определенных обстоятельствах может отнимать у системы лишь меньшую механическую работу); но теорию можно построить также и в этом случае. Е. Вигнер рассмотрел, каким образом надо поступать *). Формулы для энтропий $S(\psi)$, $S(U_\psi)$ состояния ψ и микроканонического ансамбля U_ψ соответственно имеют вид

$$S(\psi) = - \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} (E_{v,a} \psi, \psi) \ln \frac{(E_{v,a} \psi, \psi)}{s_{v,a}},$$

$$S(U_\psi) = - \sum_{a=1}^{\infty} (\Delta_a \psi, \psi) \ln \frac{(\Delta_a \psi, \psi)}{S_a} **.$$

Впрочем, эти формулы для энтропии тождественны с обычными формулами, основанными на Больцмановском определении энтропии (с использованием формулы Стирлинга). Стоит лишь заметить, что

*) Е. Вигнер устно сообщил автору относящиеся сюда результаты, до сих пор еще не опубликованные. Здесь будут использованы лишь формулы, требуемые для наших целей, нет необходимости обсуждать общую теорию.

**) Мы опустили обычный множитель k (постоянная Больцмана), т. е. за единицу температуры принимается эрг на степень свободы.

$(E_{v,a}\psi, \psi)$, $(\Delta_a\psi, \psi)$ являются числами заполнения фазовых ячеек, энергетических поверхностей соответственно, а $s_{v,a}$, S_a — числа находящихся в них квантовых орбит, т. е. их так называемые априорные веса.

II. Проведение доказательств

1. Временнаá эволюция ψ_t исходного состояния ψ определяется из зависящего от времени дифференциального уравнения Шредингера

$$\psi_0 = \psi, \quad \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = \frac{2\pi i}{\hbar} H \psi_t$$

$(H$ — оператор энергии, $= \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{\rho=1}^{S_a} W_{\rho,a} \cdot P_{\varphi_{\rho,a}})$. Таким образом,

если $\psi = \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{\rho=1}^{S_a} r_{\rho,a} e^{i\alpha_{\rho,a} \cdot \varphi_{\rho,a}}$ ($r_{\rho,a} \geq 0$, $0 \leq \alpha_{\rho,a} < 2\pi$),

то будем иметь

$$\psi_t = \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{\rho=1}^{S_a} r_{\rho,a} e^{i \left(\frac{2\pi}{\hbar} W_{\rho,a} t + \alpha_{\rho,a} \right)} \cdot \varphi_{\rho,a}.$$

Положим для краткости

$$x_{v,a} = (E_{v,a}\psi_t, \psi_t), \quad u_a = (\Delta_a\psi_t, \psi_t) = (\Delta_a\psi, \psi)$$

(оба последних выражения равны друг другу, потому что

$$(\Delta_a\psi_t, \psi_t) = \sum_{\rho=1}^{S_a} (P_{\varphi_{\rho,a}}\psi_t, \psi_t) = \sum_{\rho=1}^{S_a} |(\psi_t, \varphi_{\rho,a})|^2 = \sum_{\rho=1}^{S_a} r_{\rho,a}^2$$

не зависит от t). Как видно, $\sum_{v=1}^{N_a} x_{v,a} = u_a$, $\sum_{a=1}^{\infty} u_a = 1$, $x_{v,a}$ зависит от t , а u_a не зависит *). Из определений энтропии нам известно, что $x_{v,a}$, u_a неотрицательны и что имеют место соотношения

$$S(\psi_t) = - \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} x_{v,a} \ln \frac{x_{v,a}}{s_{v,a}}, \quad S(u_{\psi}) = - \sum_{a=1}^{\infty} u_a \ln \frac{u_a}{S_a}.$$

*) Так что микроканонический ансамбль $U_{\psi} = \sum_{a=1}^{\infty} \frac{u_a}{S_a} \Delta_a$ также не изменяется при замене ψ на ψ_t .

Так как сумма всех $x_{v,a}$, как и всех u_a , равна 1, то все они ≥ 0 , ≤ 1 и вместе с тем обе энтропии всегда ≥ 0 . Займемся теперь подробнее соотношением между их величинами.

Имеем $0 \leq x_{v,a} \leq u_a$; заменим $x_{v,a}$ переменной z и примем сначала

$0 \leq z \leq \frac{2s_{v,a}}{S_a} u_a$, так что $\left| \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right| \leq 1$. Тогда будет

$$\begin{aligned} -z \ln \frac{z}{s_{v,a}} &= -\frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \left(1 + \left[\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right] \right) \left(\ln \frac{u_a}{S_a} + \right. \\ &\quad \left. + \ln \left(1 + \left[\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right] \right) \right) = -\frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \left(1 + \left[\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right] \right) \times \\ &\quad \times \left(\ln \frac{u_a}{S_a} + \left[\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right] - \frac{1}{2} \left[\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right]^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{3} \left[\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right]^3 - + \dots \right) = -\frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \ln \frac{u_a}{S_a} - \\ &\quad - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \left(\ln \frac{u_a}{S_a} + 1 \right) \left[\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right] - \\ &\quad - \frac{s_{v,a} u_a}{1 \cdot 2 \cdot S_a} \left[\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right]^2 + \frac{s_{v,a} u_a}{2 \cdot 3 \cdot S_a} \left[\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right]^3 - + \dots \end{aligned}$$

В силу $\frac{1}{1 \cdot 2} + \frac{1}{2 \cdot 3} + \dots = 1$, сумма последних членов по абсолютной величине $\leq \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \left[\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1 \right]^2$, поэтому можем написать

$$\begin{aligned} \left| -\frac{s_{v,a}}{S_a} \cdot u_a \ln \frac{u_a}{S_a} - \left(\ln \frac{u_a}{S_a} + 1 \right) \left[z - \frac{s_{v,a}}{S_a} u_a \right] + z \ln \frac{z}{s_{v,a}} \right| &\leq \\ &\leq \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} \left[z - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right]^2. \end{aligned}$$

Чтобы доказать это для остальных значений z , сравним левую часть (без $| \dots |$) с половиной правой. Для $z = \frac{s_{v,a} u_a}{S_a}$ обе исчезают, вообще же производные равны

$$-\left(\ln \frac{u_a}{S_a} + 1 \right) + \left(\ln \frac{z}{s_{v,a}} + 1 \right) = \ln \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z$$

и

$$\frac{S_a}{s_{v,a} u_a} \left[z - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right] = \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} z - 1,$$

Первое выражение, очевидно, всегда \leq второго и ≤ 0 для $z \geq \frac{s_{v,a} u_a}{S_a}$, поэтому левая сторона \geq , чем половина правой для $z \geq \frac{s_{v,a} u_a}{S_a}$, но она всегда ≤ 0 . Тем самым имеем всегда

$$0 \leq -\frac{s_{v,a}}{S_a} \cdot u_a \ln \frac{u_a}{S_a} - \left(\ln \frac{u_a}{S_a} + 1 \right) \left[z - \frac{s_{v,a}}{S_a} u_a \right] + z \ln \frac{z}{s_{v,a}} \leq \\ \leq \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} \left[z - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right]^2.$$

Положим теперь $z = x_{v,a}$ и просуммируем по всем $v = 1, \dots, N_a$; в силу $\sum_{v=1}^{N_a} s_{v,a} = S_a$, $\sum_{v=1}^{N_a} x_{v,a} = u_a$ получим

$$0 \leq -u_a \ln \frac{u_a}{S_a} + \sum_{v=1}^{N_a} x_{v,a} \ln \frac{x_{v,a}}{s_{v,a}} \leq \sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} \left[x_{v,a} - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right]^2.$$

Если теперь просуммировать еще по $a = 1, 2, \dots$, то будет

$$0 \leq S(U_\varphi) - S(\psi_t) \leq \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} \left[x_{v,a} - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right]^2.$$

Эта оценка позволит нам доказать H -теорему. Перейдем теперь к эргодической теореме. Окажется, что и для нее дело сводится к оценке того же выражения.

2. Пусть A — макроскопически наблюдаемая величина, т. е.

$$A = \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \eta_{v,a} E_{v,a}.$$

Функции $\omega_{\lambda,v,a}$ фазовой ячейки $E_{v,a}$ являются собственными функциями A , соответствующими собственным значениям $\eta_{v,a}$, т. е. $\eta_{v,a}$ является значением A в фазовой ячейке $E_{v,a}$.

В состоянии ψ_t и в микроканоническом ансамбле U_φ величина A будет иметь математические ожидания

$$(A\psi_t, \psi_t) = \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \eta_{v,a} (E_{v,a}\psi_t, \psi_t) = \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \eta_{v,a} x_{v,a}$$

и

$$\text{Spur}(\mathbf{AU}_\psi) = \text{Spur} \left(\sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \eta_{v,a} \mathbf{E}_{v,a} \cdot \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{u_a}{S_a} \mathbf{E}_{v,a} \right) = \\ = \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \eta_{v,a} \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} *)$$

соответственно. Назовем их $E_A(\psi)$ и $E_A(U_\psi)$, тогда можем дать оценку (привлекая неравенство Шварца):

$$(E_A(\psi_k) - E_A(U_\psi))^2 = \left(\sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \eta_{v,a} \left[x_{v,a} - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right] \right)^2 = \\ = \left(\sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \sqrt{\frac{s_{v,a} u_a}{S_a}} \eta_{v,a} \cdot \sqrt{\frac{S_a}{s_{v,a} u_a}} \left[x_{v,a} - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right] \right)^2 \equiv \\ \equiv \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \eta_{v,a}^2 \cdot \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} \left[x_{v,a} - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right]^2.$$

Назовем первый множитель $\bar{\eta}^2$, в силу

$$\frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \geq 0, \quad \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} = 1, \quad \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \eta_{v,a}^2 = \bar{\eta}^2,$$

это — среднее значение значений $\eta_{v,a}^2$ величины A^2 , а именно, микроканоническое математическое ожидание: U_ψ как раз является смесью $\frac{1}{S_a} \Delta_a (a = 1, 2, \dots)$ с весами u_a , т. е. смесью $\frac{1}{s_{v,a}} \mathbf{E}_{v,a} (a = 1, 2, \dots; v = 1, \dots, N_a)$ с весами $\frac{s_{v,a} u_a}{S_a}$ и A^2 , как мы знаем, имеет в $\frac{1}{s_{v,a}} \mathbf{E}_{v,a}$ значение $\eta_{v,a}^2$. Поэтому в любом случае $\bar{\eta}$ является разумной мерой порядка величины A . Итак, имеем

$$(E_A(\psi_k) - E_A(U_\psi)) \leq \bar{\eta}^2 \cdot \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} \left[x_{v,a} - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right]^2.$$

^{*)} Число членов уменьшается благодаря тому, что $\mathbf{E}_{v,a} \mathbf{E}_{v,b} = 0$, если только не имеют места равенства $v = \mu$, $a = b$, а в этом последнем случае произведение равно $\mathbf{E}_{v,a}$ и его шпур равен $s_{v,a}$.

3. Усредним теперь по времени t , что будем обозначать через M_t . Тогда

$$M_t \{ |S(\psi) - S(\psi_t)| \} \leq M_t \left\{ \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} \left[x_{v,a} - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right]^2 \right\},$$

$$M_t \{ (E_A(\psi) - E_A(\psi_t))^2 \} \leq \overline{\eta^2} M_t \left\{ \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a} u_a} \left[x_{v,a} - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} \right]^2 \right\}.$$

Тем самым эргодическая теорема и H -теорема будут доказаны единственным маком, как только мы покажем, что $M_t \{ \dots \}$, стоящие справа, равномерно малы для всех начальных состояний ψ (т. е. для всех

$r_{\rho,a}, \alpha_{\rho,a}, \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{\rho=1}^{S_a} r_{\rho,a}^2 = |\psi|^2 = 1$). (Заметим, что в $x_{v,a}$ входят t , $r_{\rho,a}, \alpha_{\rho,a}$, в u_a входит лишь $r_{\rho,a}$, все остальное — константы.)

Чтобы это показать, подсчитаем сначала $x_{v,a}$. Будет

$$\begin{aligned} x_{v,a} &= (E_{v,a}\psi_t, \psi_t) = \left(\sum_{b=1}^{\infty} \sum_{\rho=1}^{S_b} r_{\rho,b} e^{i \left(\frac{2\pi}{h} W_{\rho,b} t + \alpha_{\rho,b} \right)} \cdot E_{v,a} \varphi_{\rho,b}, \right. \\ &\quad \left. \sum_{b=1}^{\infty} \sum_{\sigma=1}^{S_b} r_{\rho,b} e^{i \left(\frac{2\pi}{h} W_{\rho,b} t + \alpha_{\rho,b} \right)} \cdot \varphi_{\rho,b} \right)^* = \\ &= \sum_{\rho,\sigma=1}^{S_a} r_{\rho,a} r_{\sigma,a} e^{i \left(\frac{2\pi}{h} (W_{\rho,a} - W_{\sigma,a}) t + (\alpha_{\rho,a} - \alpha_{\sigma,a}) \right)} \cdot (E_{v,a} \varphi_{\rho,a}, \varphi_{\sigma,a}) \end{aligned}$$

и дальше (мы учитываем, что $\sum_{\rho=1}^{S_a} r_{\rho,a}^2 = u_a$)

$$\begin{aligned} x_{v,a} - \frac{s_{v,a} u_a}{S_a} &= \sum_{\substack{\rho,\sigma=1 \\ \rho \neq \sigma}}^{S_a} r_{\rho,a} r_{\sigma,a} e^{i \left(\frac{2\pi}{h} (W_{\rho,a} - W_{\sigma,a}) t + (\alpha_{\rho,a} - \alpha_{\sigma,a}) \right)} \times \\ &\quad \times (E_{v,a} \varphi_{\rho,a}, \varphi_{\sigma,a}) + \sum_{\rho=1}^{S_a} r_{\rho,a}^2 \left\{ (E_{v,a} \varphi_{\rho,a}, \varphi_{\rho,a}) - \frac{s_{v,a}}{S_a} \right\}. \end{aligned}$$

*) Число членов уменьшится из-за того, что $(E_{v,a} \varphi_{\rho,b}, \varphi_{\sigma,c}) = (\varphi_{\rho,b}, E_{v,a} \varphi_{\sigma,c}) = 0$, если только не имеет места равенство $a=b=c$. Достаточно показать, что $E_{v,a} \varphi_{\rho,b} = 0$ при $a \neq b$ или же (в силу $E_{v,a} \Delta_a = E_{v,a}$, см. I, 2.) $\Delta_a \varphi_{\rho,b} = 0$. Это следует из $\Delta_a = \sum_{\sigma=1}^{S_a} P_{\varphi_{\sigma,a}}$, так как $\varphi_{\rho,b}$ ортогонально ко всем $\varphi_{\sigma,a}$.

Это выражение надо возвести в квадрат и усреднить по t , тогда выпадут все члены с $e^{ic \cdot t}$, где $c \neq 0$. Если поэтому выполняется

$$\text{при } \rho \neq \sigma \quad \frac{2\pi}{h} (W_\rho - W_\sigma) \neq 0,$$

$$\text{при } \rho \neq \sigma, \rho' \neq \sigma' \quad \frac{2\pi}{h} (W_\rho - W_\sigma) - \frac{2\pi}{h} (W_{\rho'} - W_{\sigma'}) \neq 0,$$

если только не $\rho \neq \rho'$, $\sigma \neq \sigma'$, — т. е. если для каждого фиксированного a все $W_{\rho, a}$ ($\rho = 1, 2, \dots$) отличны друг от друга, и равным образом все $W_{\rho, a} - W_{\sigma, a}$ ($\rho \neq \sigma$, $\rho, \sigma = 1, 2, \dots$), — то мы получим

$$M_t \left(\left[x_{v, a} - \frac{s_{v, a} u_a}{S_a} \right]^2 \right) = \sum_{\substack{\rho, \sigma=1 \\ \rho \neq \sigma}}^{S_a} r_{\rho, a}^2 r_{\sigma, a}^2 |(\mathbf{E}_{v, a} \varphi_{\rho, a}, \varphi_{\sigma, a})|^2 + \\ + \left(\sum_{\rho=1}^{S_a} r_{\rho, a}^2 \left\{ (\mathbf{E}_{v, a} \varphi_{\rho, a}, \varphi_{\rho, a}) - \frac{s_{v, a}}{S_a} \right\} \right)^2.$$

Положим теперь

$$\max_{\rho \neq \sigma, \rho, \sigma=1, \dots, S_a} (|(\mathbf{E}_{v, a} \varphi_{\rho, a}, \varphi_{\sigma, a})|^2) = M_{v, a},$$

$$\max_{\rho=1, \dots, S_a} \left(\left\{ (\mathbf{E}_{v, a} \varphi_{\rho, a}, \varphi_{\rho, a}) - \frac{s_{v, a}}{S_a} \right\}^2 \right) = N_{v, a},$$

где $M_{v, a}$, $N_{v, a}$ — константы, т. е. не зависят от t , $r_{\rho, a}$ и $\alpha_{\rho, a}$ (т. е. от ψ_t). В силу $\sum_{\rho=1}^{S_a} r_{\rho, a}^2 = u_a^2$ будет тогда

$$M_t \left(\left[x_{v, a} - \frac{s_{v, a} u_a}{S_a} \right]^2 \right) = \sum_{\substack{\rho, \sigma=1 \\ \rho \neq \sigma}}^{S_a} r_{\rho, a}^2 r_{\sigma, a}^2 M_{v, a} + \left(\sum_{\rho=1}^{S_a} r_{\rho, a}^2 \sqrt{N_{v, a}} \right)^2 \leqq \\ \leqq u_a^2 \cdot (M_{v, a} + N_{v, a}),$$

и поэтому

$$M_t \left\{ \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{S_a} \frac{S_a}{s_{v, a} u_a} \left[x_{v, a} - \frac{s_{v, a} u_a}{S_a} \right]^2 \right\} \leqq \sum_{a=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a u_a}{s_{v, a}} (M_{v, a} + N_{v, a}).$$

В силу $\sum_{a=1}^{\infty} u_a = 1$ это также $\leqq \max_{a=1, 2, \dots} \left(\sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v, a}} (M_{v, a} + N_{v, a}) \right)$, при этом достаточно ограничить $\max_{a=1, 2, \dots}$ такими a , для которых $u_a \neq 0$.

т. е. энергетические поверхности которых на самом деле входят в микроканонический ансамбль. Тем самым цель будет достигнута, если мы покажем, что

$$\sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a}} (M_{v,a} + N_{v,a})$$

мало для таких a , причем тогда наш результат будет иметь место для всех таких ψ : поскольку названное выражение является константой, т. е. не зависит от $\psi(t, r_{\rho,a}, \alpha_{\rho,a})$ — в него входят лишь $E_{v,a}$ (и тем самым $S_a, N_a, s_{v,a}, \Delta_a$, равно как и $\omega_{\lambda,v,a}$). Для того чтобы оценить это выражение, надо оценить $M_{v,a}, N_{v,a}$.

4. Мы считаем H , а вместе с ним $W_{\rho,a}, \varphi_{\rho,a}$ фиксированными (и удовлетворяющими условиям из 3.*)), так же как и $S_a, N_a, s_{v,a}$ и Δ_a , и варьируем лишь $E_{v,a}$ внутри этих границ. Это означает, что мы варьируем ортогональную систему $\omega_{\lambda,v,a}$ ($v=1, \dots, N_a; \lambda=1, \dots, s_{v,a}$),

которая связана лишь условием $\sum_{v=1}^{N_a} \sum_{\lambda=1}^{s_{v,a}} P_{\omega_{\lambda,v,a}} = \Delta_a$, и полагаем

$E_{v,a} = \sum_{\lambda=1}^{s_{v,a}} P_{\omega_{\lambda,v,a}}$, $v=1, \dots, N_a$. Заметим, что все такие ортого-

нальные системы $\omega_{\lambda,v,a}$ возникают из одной из них, скажем из $\bar{\omega}_{\lambda,v,a}$, с помощью линейных унитарных преобразований (поскольку a фикси-)

ровано, в $\sum_{v=1}^{N_a} s_{v,a} = S_a$ измерениях)! (Можно вспомнить, например, матричное определение P_{ω} , введение, 3.) $M_{v,a}, N_{v,a}$ зависят тогда еще лишь от $\omega_{\lambda,v,a}$ и их никоим образом нельзя сделать настолько малыми, как это нам нужно при каждом выборе системы (этого нельзя также избежать с помощью каких бы то ни было разумных условий на $S_a, N_a, s_{v,a}$). Если, например, $\omega_{\lambda,v,a}$ совпадают с $\varphi_{\rho,a}$ (a фиксировано, обеих имеется по S_a штук), то мы видим, что

*). Эти условия можно слегка ослабить. Так, можно было бы полностью отказаться от различия самих $W_{\rho,a}$ и потребовать от $W_{\rho,a} - W_{\sigma,a}$ только следующее: должно существовать такое разбиение пар ρ, σ с $\rho \neq \sigma$, $\rho, \sigma = 1, \dots, S_a$ на k групп, что внутри каждой из этих групп разности $W_{\rho,a} - W_{\sigma,a}$ отличаются друг от друга, — будет ли k для всех a фиксирован-ным числом и будут ли далее достаточно хорошо выполнены указанные ниже условия относительно соотношений между величинами $S_a, N_a, s_{v,a}$, не играет никакой роли. Это означает: небольшие нарушения наших условий не причиняют вреда. Мы не будем останавливаться на этом более подробно. (В частности, отказ от первого условия не дает большого выигрыша: ведь из $W_{\rho,a} = W_{\sigma,a}, W_{\rho',a} = W_{\sigma',a}$ сейчас же следует, что $W_{\rho,a} - W_{\sigma,a} = W_{\rho',a} - W_{\sigma',a}$)

любое $(E_{v, \varphi_p, a}, \varphi_a, a)$ принимает среди прочих и значение 1, так что будет $N_{v, a} \geq \left(1 - \frac{s_{v, a}}{S_a}\right)^2 \geq \frac{1}{4}$ (если, что всегда имеет место, все

$$s_{v, a} \leq \frac{1}{2} S_a), \text{ и потому } \sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v, a}} (M_{v, a} + N_{v, a}) \geq N_a \cdot 2 \cdot \frac{1}{4} = \frac{N_a}{2},$$

т. е. для больших N_a произвольно велико. Неблагоприятный результат в этом случае зависит, естественно, от того, что подобный выбор $\omega_{\lambda, v, a}$ вообще не является разумным: $E_{v, a}$ имеют тогда те же собственные функции, что и H , а потому перестановки с ним, — а этого не может быть (ср. I.2.)!

Между тем такое поведение является лишь сингулярным и исключительным, для преобладающего большинства систем $\omega_{\lambda, v, a}$, о которых шла речь, $M_{v, a}$, $N_{v, a}$ имеют правильный порядок величины. Но прежде чем доказывать это, мы хотим (неточно!) сориентироваться в том, чего мы могли бы ожидать в лучшем случае для $M_{v, a}$, $N_{v, a}$. С этой целью мы поступим так: вместо того чтобы усреднить

$$M_{v, a} = \max_{p \neq \sigma, p, \sigma = 1, \dots, S_a} (|E_{v, a} \varphi_p, a, \varphi_\sigma, a|^2),$$

$$N_{v, a} = \max_{p=1, \dots, S_a} \left(\left\{ (E_{v, a} \varphi_p, a, \varphi_p, a) - \frac{s_{v, a}}{S_a} \right\}^2 \right)$$

по всем возможным системам $\omega_{\lambda, v, a}$ (т. е. установить, какие значения преимущественно принимаются; как определяется усреднение и как оно осуществляется, будет детально показано в приложении; ср. также дискуссию в III.1.), мы усредним сами $|E_{v, a} \varphi_p, a, \varphi_p, a|^2$ ($p \neq \sigma, p, \sigma = 1, \dots, S_a$) и $\left\{ (E_{v, a} \varphi_p, a, \varphi_p, a) - \frac{s_{v, a}}{S_a} \right\}^2$ ($p = 1, \dots, S_a$), а затем возьмем максимум. Мы заменяем, таким образом, среднее от максимума максимумом среднего — так получаются неправильные, причем слишком заниженные (т. е. слишком благоприятные) числа, но для первой ориентировки этим можно удовлетвориться.

Как будет показано в приложении к этой работе, средние от $|E_{v, a} \varphi_p, a \varphi_\sigma, a|^2$ ($p \neq \sigma$), $(E_{v, a} \varphi_p, a, \varphi_p, a)$, $\left\{ (E_{v, a} \varphi_p, a, \varphi_p, a) - \frac{s_{v, a}}{S_a} \right\}^2$ равны соответственно $\frac{s_{v, a} (S_a - s_{v, a})}{S_a (S_a^2 - 1)}$, $\frac{s_{v, a}}{S_a}$, $\frac{s_{v, a} (S_a - s_{v, a})}{S_a^2 (S_a + 1)}$, так что если $s_{v, a} \ll S_a$ (как и бывает на самом деле), то будем иметь для средних $\sim \frac{s_{v, a}}{S_a^2}$, $\frac{s_{v, a}}{S_a}$, $\frac{s_{v, a}}{S_a^2}$. Подставим поэтому в виде опыта

вместо $M_{v,a}$, $N_{v,a}$ величину $\frac{s_{v,a}}{S_a^2}$, тогда

$$\sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a}} (M_{v,a} + N_{v,a}) = 2 \sum_{v=1}^{N_a} \frac{1}{S_a} = \frac{2N_a}{S_a}.$$

$$\sum_{v=1}^{N_a} s_{v,a}$$

Это мало, если $\frac{N_a}{S_a}$ мало, т. е. если $\frac{\sum_{v=1}^{N_a} s_{v,a}}{N_a} = \frac{S_a}{N_a}$ велико. Итак, $s_{v,a}$ значит, фазовые ячейки должны в среднем быть большими. Этот результат совершенно разумен, мы перейдем поэтому к корректному усреднению $M_{v,a}$, $N_{v,a}$ по $\omega_{\lambda,v,a}$.

5. Для средних от $M_{v,a}$, $N_{v,a}$ по всем $\omega_{\lambda,v,a}$

$$\left(\text{при } \sum_{v=1}^{N_a} \sum_{\lambda=1}^{s_{v,a}} P_{\omega_{\lambda,v,a}} = \Delta_a \right)$$

в приложении будут найдены верхние границы $\frac{\ln S_a}{S_a}$ и $\frac{9s_{v,a} \ln S_a}{S_a^2}$

соответственно. Как видно, они в $\frac{S_a \ln S_a}{s_{v,a}}$ и соответственно в $9 \ln S_a$

раз больше использовавшихся в 4. чисел (полагаем $1 \ll s_{v,a} \ll S_a$!), в частности, первая оценка существенно хуже второй. Возможно, что наши оценки допускают существенное улучшение и могут быть приближены к оценкам из 4., — это следует подчеркнуть, чтобы правильно оценить условия, которые мы получим для соотношения между величинами S_a , N_a , $s_{v,a}$: они во всяком случае достаточны, но возможно не необходимы.

Подставляя приведенные выше выражения, для среднего от

$$\sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a}} (M_{v,a} + N_{v,a})$$

находим, что оно

$$\leq \sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a}} \left(\frac{\ln S_a}{S_a} + \frac{9s_{v,a} \ln S_a}{S_a^2} \right) = \ln S_a \cdot \left(\frac{9N_a}{S_a} + \sum_{v=1}^{N_a} \frac{1}{s_{v,a}} \right).$$

Введем арифметическое и гармоническое средние от $s_{v,a}$ ($v=1, \dots, N_a$):

$$\bar{s}_a = \frac{1}{N_a} \sum_{v=1}^{N_a} s_{v,a} = \frac{S_a}{N_a}, \quad \overline{\frac{1}{s_a}} = \frac{1}{N_a} \sum_{v=1}^{N_a} \frac{1}{s_{v,a}},$$

тогда указанное выше выражение равно $\ln S_a \cdot \left(\frac{9}{\bar{s}_a} + \frac{N_a}{\bar{s}_a} \right)$. Поскольку $\bar{s} \leq \bar{s}_a$ и $N_a \gg 1$ (это выражает оправданное допущение, что на энергетической поверхности лежит много фазовых ячеек), то это $\sim \ln S_a \cdot \frac{N_a}{\bar{s}_a}$. Когда это выражение мало?

Во всяком случае должно быть $\bar{s}_a \geq \bar{s} \geq N_a$, $\ln \bar{s}_a \geq \ln N_a$, так что $\ln S_a = \ln \bar{s}_a + \ln N_a$, можно заменить на $\ln \bar{s}_a$. Итак, условием будет

$$\ln \bar{s}_a \cdot \frac{N_a}{\bar{s}_a} \ll 1, \quad \frac{N_a}{\bar{s}_a} \ll \frac{1}{\ln \bar{s}_a},$$

т. е.

$$\sum_{v=1}^{N_a} \frac{1}{s_{v,a}} \ll \frac{1}{\ln \bar{s}_a}.$$

Это означает, что $s_{v,a}$ должны быть велики и по отношению к их числам N_a (т. е. фазовые ячейки по отношению к их числу на энергетической поверхности), а не только, как в 4., просто велики. Чем это означает более точно в применении к распределению $s_{v,a}$, будет еще показано.

Следует еще раз указать на предварительный характер наших оценок. Возможно, что данное выше усиление требования относительно величины фазовых ячеек необходимо на самом деле для того, чтобы эргодическая теорема и H -теорема были справедливы. Может оказаться также, что оно вытекает лишь из неполноты наших методов оценки, так что в действительности достаточно уже условия $\bar{s}_a \gg 1$ из 4.. Было бы интересно внести ясность в этот вопрос.

III. Обсуждение результатов

1. Подведем итог достигнутому до сих пор. Мы показали:

Пусть ψ — некоторое состояние, ψ_t — состояние, вытекающее из него с течением времени $t (\geq 0)$, U_ψ — его микроканонический ансамбль (ср. I. 3.), H — оператор энергии, $W_{\rho,a}$ — его собственные значения ($a = 1, 2, \dots$; $\rho = 1, \dots, S_a$; макроскопически различимы лишь собственные состояния с различными a , ср. I. 2.) — как ψ так и H являются точными (не макроскопическими!) выражениями. Относительно H мы делаем допущение, что (при фиксированном a) все $W_{\rho,a}$ различны между собой, а также все разности $W_{\rho,a} - W_{\sigma,a}$, т. е. что H не обладает вырождением внутри макроскопически неразличной группы термов и резонансами с другими (виртуальными) такими же

системами *). (Не слишком частые нарушения этого запрета допустимы.) Тогда для математического ожидания каждой макроскопически измеримой величины A и для энтропии в среднем по времени имеют место

$$M_t \{ (E_A(\psi) - E_A(\psi_t))^2 \} \leq \bar{\eta}^2 \cdot \operatorname{Max}_{a=1, 2, \dots} \left(\sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a}} (M_{v,a} + N_{v,a}) \right),$$

$$M_t \{ |S(\psi) - S(\psi_t)| \} \leq \operatorname{Max}_{a=1, 2, \dots} \left(\sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a}} (M_{v,a} + N_{v,a}) \right).$$

[Ср. II.3.; достаточно образовывать Max лишь по тем a (макроскопические), энергетические поверхности которых входят в микроканонический ансамбль $\psi_a = (\Delta_a \psi, \psi) \neq 0$ — на практике чаще всего это сводится к лишь одному a . $\bar{\eta}^2$ является микроканоническим средним от A^2 , т. е. является мерой порядка его величины.]

Эргодическая теорема и H -теорема справедливы, таким образом,

без исключений (т. е. для всех ψ), если эти $\sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a}} (M_{v,a} + N_{v,a})$

малы. Относительно выполнимости этого условия, в которое помимо $S_a, N_a, s_{v,a}$ (и Δ_a) входит также $\omega_{\lambda, v, a}$ (в $M_{v,a}$ и $N_{v,a}$), можно сказать следующее: Если имеет место

$$\sum_{v=1}^{N_a} \frac{1}{s_{v,a}} \ll \frac{1}{\ln \bar{s}_a} \quad \left(\bar{s}_a = \frac{1}{N_a} \sum_{v=1}^{N_a} s_{v,a} = \frac{S_a}{N_a} \right),$$

т. е. если фазовые ячейки $E_{v,a}$ велики по отношению к их числу на энергетической поверхности Δ_a , то это условие выполняется для подавляющего большинства $\omega_{\lambda, v, a}$, т. е. среднее по $\omega_{\lambda, v, a}$ от $\sum_{v=1}^{N_a} \frac{S_a}{s_{v,a}} (M_{v,a} + N_{v,a})$ мало **).

Итак, истинное условие справедливости обеих теорем может нарушаться и при $\sum_{v=1}^{N_a} \frac{1}{s_{v,a}} \ll \frac{1}{\ln \bar{s}_a}$, т. е. даже и в этом случае

*) Именно, если $W_{\rho, a} - W_{\sigma, a} = W_{\rho', a} - W_{\sigma', a}$, то состояние $\varphi_{\rho, a}$ первой и состояние $\varphi_{\sigma', a}$ второй системы имеют ту же суммарную энергию, что и состояние $\varphi_{\rho', a}$ первой и $\varphi_{\sigma, a}$ второй системы.

**) Заметим: мы доказали не то, что для каждого данного ψ или A эргодическая теорема и H -теорема имеют место для большинства $\omega_{\lambda, v, a}$, а то, что для большинства $\omega_{\lambda, v, a}$ они вообще справедливы, т. е. для всех ψ и A . Последнее, естественно, намного больше, чем первое.

можно так искусно выбрать макроскопическую измерительную технику (ω_{λ}, v, a), что обе теоремы не будут справедливы. Но для подавляющего большинства макроскопических точек зрения обе теоремы справедливы без исключений (т. е. для всех ψ и A).

2. Присмотримся внимательнее к условию $\sum_{v=1}^{N_a} \frac{1}{s_{v,a}} \ll \frac{1}{\ln s_a}$.

Если бы все $s_{v,a}$ (a фиксировано!) были примерно равны, то это условие означало бы, что $\frac{N_a}{s_a} \ll \frac{1}{\ln s_a}$, $\frac{\bar{s}_a}{\ln s_a} \gg N_a$, т. е. немногим больше, чем $\bar{s}_a \gg N_a$, т. е. утверждение, что фазовые ячейки велики по сравнению с их числом на энергетической поверхности. Если же среди $s_{v,a}$ попадаются существенно различные, то нужна максимальная осторожность: одно-единственное $s_{v,a}$, которое не $\gg 1$, уже приводит к тому, что $\sum_{v=1}^{N_a} \frac{1}{s_{v,a}}$ не $\ll 1$, т. е. к нарушению нашего

условия. С другой стороны, $s_{v,a}$ сильно отличаются друг от друга: ибо $\ln s_{v,a}$ надо считать энтропией смеси $\frac{1}{s_{v,a}} E_{v,a}$, которая характеризует общую систему, находящуюся в фазовой ячейке $E_{v,a}$ *), — и достаточно представить себе соотношения из теории газов, чтобы понять, что на энергетической поверхности, вообще говоря, лежат фазовые ячейки с существенно различными энтропиями. (Как раз их наличие делает из H -теоремы глубокое утверждение!) Если самая большая из встречающихся (макроскопически воспринимаемая!) разница энтропий равна σ , то всегда $|\ln s_{\mu,a} - \ln s_{v,a}| \leq \sigma$, так что

$$s_{v,a} \geq \bar{s}_a e^{-\sigma}, \quad \sum_{v=1}^{N_a} \frac{1}{s_{v,a}} \leq \frac{e^{\sigma} N_a}{\bar{s}_a},$$

ввиду чего надо потребовать, чтобы $\frac{\bar{s}_a}{\ln s_a} \gg e^{\sigma} N_a$.

Впрочем, это соотношение показывает, что опасность оказывается только кажущейся: в силу малости h , которое входит в левую часть (при $h \rightarrow 0$, $s_a \rightarrow \infty$, ср. введение, 6.), но не в правую, это соотношение при нормальных обстоятельствах выполняется. Нам кажется, что здесь нет нужды вдаваться в дальнейшие подробности.

*) Это следует, с одной стороны, из приведенных выше рассуждений, а с другой — это ясно также и из смысла больцмановского определения энтропии: ведь фазовая ячейка $E_{v,a}$ содержит $s_{v,a}$ состояний.

3. Остается еще разобраться в смысле условий на собственные значения H , приведя известные классические примеры и контрпримеры к эргодической теореме и H -теореме.

Пусть K — ящик, в котором беспорядочно движутся N частиц k_1, \dots, k_N , т. е. какой-то газ; примем альтернативно, что:

α) между частицами нет никаких взаимодействий, так что даже соударений никогда не бывает (это значит, что они могут беспрепятственно проходить друг через друга);

β) имеются взаимодействия и соударения.

В случае **α)** оба предложени, как известно, не справедливы (так как любое распределение скоростей, а не только максвелловское, может существовать произвольно долгое время), в случае **β)** надеются, напротив, что они имеют место. (Совершенно аналогична ситуация в случае излучения в полости, в которой имеется лишь отражение.) Как следует понимать такое поведение с точки зрения наших условий?

Поскольку в отношении $S_a, N_a, s_{v,a}$ и $E_{v,a}$ едва ли имеется какое-нибудь различие между **α)** и **β)**, то в качестве причины этого различия остается H -условие. Будем рассматривать сначала каждую частицу в K саму по себе, тогда ее собственные значения энергии будут $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots$ *). Собственными значениями энергии всего K будут

тогда в случае **α)** все $\sum_{v=1}^{\infty} z_v \epsilon_v$ ($z_v = 0, 1, \dots, \sum_{v=1}^{\infty} z_v = N$), в случае **β)**

они еще немного изменятся — тем меньше, чем слабее взаимодействие. В силу тождественности частиц здесь собственно возникает, вообще говоря, $N!$ -кратное «обменное вырождение»**), т. е. нарушение первого условия на собственные значения энергии. Поскольку, однако, имеет место или статистика Ферми — Дирака, или же статистика Бозе — Эйнштейна, т. е. допустимы только антисимметричные, соответственно симметричные во всех частицах волновые функции***), то эти вырождения снова отпадают****). Таким образом, здесь не возникает трудностей. Напротив, в случае **α)** существует ряд соотношений вида, запрещенного вторым условием:

$$(\epsilon_1 + \epsilon_3 + \dots) - (\epsilon_2 + \epsilon_3 + \dots) = (\epsilon_1 + \epsilon_4 + \dots) - (\epsilon_2 + \epsilon_4 + \dots) \text{ и т. д.}$$

*) Мы считаем k_1, \dots, k_N тождественными и принципиально неразличимыми между собой. Если же они различны, то каждая частица k_n ($n = 1, \dots, N$) обладает своим собственным, отличным от других спектром термов $\epsilon_{n1}, \epsilon_{n2}, \dots$. Обсуждение остается тогда таким же, как в тексте, только не будет требующей рассмотрения опасности вырождения, **α)** снова будет противоречить второму условию на собственные значения H , а **β)** не будет.

) В случае **α), в случае же **β)** порядки вырождения совпадают с порядками неприводимых представлений симметрической группы из N элементов. Ср. E. Wigner, Zs. f. Phys. 40 и 43 (1927).

***) Ср. W. Heisenberg, Zs. f. Phys. 41 (1927), а также P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. (A) 112 (1926).

****) В случае статистики Ферми — Дирака допустимы, конечно, лишь $z_v = 0, 1$, но это не вредит нашим соображениям.

В случае β) это невозможно, так как четыре заданных терма K возмущаются совершенно по-разному, причем это утверждение, очевидно, нисколько не зависит от абсолютной величины возмущения (т. е. взаимодействия).

Таким образом, внутренняя причина различного характера случаев α) и β) лежит в поведении по отношению к условию

$$W_{\rho, a} - W_{\sigma, a} \neq W_{\rho', a} - W_{\sigma', a}.$$

Приложение

1. Надо вывести использованные в II. 4., 5. свойства распределений $|(\mathbf{E}_{v, a} \varphi_{\rho, a}, \varphi_{\sigma, a})|^2$ ($\rho \neq \sigma$) и $(\mathbf{E}_{v, a} \varphi_{\rho, a}, \varphi_{\rho, a})$. Сначала, однако, нам следует разъяснить, как здесь вообще можно говорить о статистическом распределении.

В II. 4. мы указывали на то, что все величины, зависящие от $\mathbf{E}_{v, a}$, зависят, в конце концов, от $\omega_{\lambda, v, a}$, а также на то, что под усреднением мы понимаем усреднение по этим $\omega_{\lambda, v, a}$: поскольку S_a ,

$N_a, s_{v, a}$ и Δ_a заданы, они подчиняются условию $\sum_{v=1}^{N_a} \sum_{\lambda=1}^{s_{v, a}} P_{\omega_{\lambda, v, a}} = \Delta_a$

и, со своей стороны, определяют $\mathbf{E}_{v, a}$ по формуле $\sum_{\lambda=1}^{s_{v, a}} P_{\omega_{\lambda, v, a}} = \mathbf{E}_{v, a}$.

Дальше мы упоминали, что все такие системы получаются из одной из них, скажем $\bar{\omega}_{\lambda, v, a}$, с помощью линейных унитарных преобразований. Так что, избрав каким-то образом $\omega_{\lambda, v, a}$, можно с равным успехом сказать, что мы усредняем по множеству унитарных матриц пре-

образования $\left[\text{в } \sum_{v=1}^{N_a} s_{v, a} = S_a \text{ измерениях, они переводят } \bar{\omega}_{\lambda, v, a} \text{ в } \omega_{\lambda, v, a} \right.$ (a фиксировано!). Следовало бы обозначать эти матрицы через

$\{\xi_{\lambda, v, \lambda', v'}\}$, используя для строк двойные индексы λ, v , и равным образом для столбцов λ', v' , в соответствии с системой индексов для $\omega_{\lambda, v, a}$ и $\bar{\omega}_{\lambda, v, a}$ (ведь должно быть $\omega_{\lambda, v, a} = \sum_{\lambda'=1}^{N_a} \sum_{v'=1}^{s_{v, a}} \xi_{\lambda, v, \lambda', v'} \bar{\omega}_{\lambda', v', a}$),

но мы предпочтаем ввести один текущий индекс, т. е. писать $\xi_{\rho/\rho'} (\rho, \rho' = 1, \dots, S_a)$. Теперь мы должны объяснить, как следует усреднять по множеству S_a -мерных унитарных матриц $\{\xi_{\rho/\rho'}\}$.

Мы желаем усреднять так, чтобы при этом ни одной из систем отсчета $\omega_{\lambda, v, a}$ не отдавалось предпочтения перед другими. Если теперь $\omega_{\lambda, v, a}$ означает какую-нибудь другую из таких систем отсчета,

$\bar{\omega}_{\lambda, \nu, a} = \sum_{\lambda=1}^{N_a} \sum_{\nu=1}^{s_a} \tilde{\xi}_{\lambda, \nu/\lambda', \nu'} \bar{\omega}_{\lambda', \nu', a}$ (запишем теперь также и $\tilde{\xi}_{p/p'}$ вместо $\tilde{\xi}_{\lambda, \nu/\lambda', \nu'}$), то между матрицами $\{\xi_{p/p'}\}$ и $\{\tilde{\xi}_{p/p'}\}$ (той же системы $\omega_{\lambda, \nu, a}$) в отношении к $\bar{\omega}_{\lambda, \nu, a}$ и соответственно $\omega_{\lambda, \nu, a}$ существует соотношение $\{\xi_{p/p'}\} = \{\xi_{p/p'}\} \{\tilde{\xi}_{p/p'}\}$, т. е.

$$\xi'_{p/p''} = \sum_{p'=1}^{s_a} \xi_{p/p'} \tilde{\xi}_{p'/p''}.$$

Итак, метод усреднения должен быть таким, чтобы он был инвариантным по отношению к преобразованиям указанной выше формы $\{\xi_{p/p'}\} \rightarrow \{\xi'_{p/p'}\}$ (для любой фиксированной унитарной матрицы $\{\tilde{\xi}_{p/p'}\}$). Но подобный метод усреднения по унитарной группе существует, причем он полностью определяется наложенным требованием; он был разработан Вейлем *). Мы, однако, не будем пользоваться здесь его общими формулами, единственное, что нам понадобится для достижения цели, — это свойства инвариантности этого метода усреднения. Упомянем еще, что (как показано в I. с.) указанный метод усреднения инвариантен также по отношению к преобразованию $\{\xi_{p/p'}\} \rightarrow \{\xi''_{p/p'}\}$, которое определяется соотношением $\{\xi''_{p/p'}\} = \{\tilde{\xi}_{p/p'}\} \{\xi_{p/p'}\}$, т. е.

$$\xi''_{p/p} = \sum_{p'=1}^{s_a} \tilde{\xi}_{p/p'} \xi_{p'/p''}.$$

Во-вторых, сделаем еще несколько формальных упрощений. Так как порядок нумерации $\nu = 1, \dots, N_a$ не имеет значения, то достаточно рассмотреть $E_{1, a}$. Заменой индексов λ, ν через p мы можем распорядиться так, что $\lambda, 1$ перейдет в $p = 1, \dots, s_{1, a}$. Выберем затем систему отсчета $\bar{\omega}_{\lambda, \nu, a}$: пусть это будет система $\varphi_{p, a}$, чем одновременно достигается перенумерация. Имеем тогда

$$(E_{1, a} \varphi_{p, a}, \varphi_{\sigma, a}) = \sum_{\tau=1}^{s_{1, a}} (P_{\omega_{\tau, a} \varphi_{p, a}, \varphi_{\sigma, a}}) = \\ = \sum_{\tau=1}^{s_{1, a}} (\varphi_{p, a}, \omega_{\tau, a}) (\omega_{\tau, a}, \varphi_{\sigma, a}) = \sum_{\tau=1}^{s_{1, a}} \xi_{\tau/p}^* \xi_{\tau/\sigma}.$$

И, наконец, опустим излишние индексы ν, a , так что $S_a, N_a, s_{1, a}, \Delta_a, E_{1, a}, \varphi_{p, a}, M_{1, a}, N_{1, a}$ перейдут в $S, N, s, \Delta, E, \varphi_p, M, N$.

*) H. Weyl, Math. Zs. 23 (1925).

Итак, вот наша задача: исследовать с помощью очерченного выше метода усреднения распределения величин

$$|(\mathbf{E}\varphi_{\rho}, \varphi_{\sigma})|^2 = \left| \sum_{\tau=1}^s \xi_{\tau/\rho}^* \xi_{\tau/\sigma} \right|^2 \quad (\rho \neq \sigma)$$

и

$$(\mathbf{E}\varphi_{\rho}, \varphi_{\rho}) = \sum_{\tau=1}^s |\xi_{\tau/\rho}|^2,$$

где $|\xi_{\rho/\rho'}|$ пробегает все S -мерные унитарные матрицы.

2. Прежде всего одно вспомогательное рассуждение. Установим распределение значений $\sum_{\rho=1}^s x_{\rho}^2$, когда вектор $\{x_1, \dots, x_S\}$ пробегает поверхность единичной сферы $\sum_{\rho=1}^s x_{\rho}^2 = 1$, причем сначала для вещественных x_{ρ} . То есть мы определим $W(u)$, где $W(u) du$ является (геометрической) вероятностью для $u \leq \sum_{\rho=1}^s x_{\rho}^2 \leq u + du$ ($0 \leq u \leq 1$) *). Простое геометрическое рассмотрение, которое мы здесь не станем воспроизводить, показывает, что $W(u)$ пропорционально выражению $u^{\frac{s}{2}-1} (1-u)^{\frac{S-s}{2}-1}$, а не зависящий от u фактор пропорциональности определяется из

$$\int_0^1 W(u) du = 1.$$

Если теперь x_1, \dots, x_S могут быть комплексными и, следовательно, надо рассматривать

$$u \leq \sum_{\rho=1}^s |x_{\rho}|^2 \leq u + du \quad \text{и} \quad \sum_{\rho=1}^s |x_{\rho}|^2 = 1,$$

то стоит лишь сообразить, что все остается по-старому, если действительные и мнимые части x_{ρ} рассматривать как вещественные декартовы координаты. При этом нужно лишь s, S заменить на $2s, 2S$. Тогда $W(u)$ будет пропорционально $u^{s-1} (1-u)^{S-s-1}$, а фактор пропорциональности определяется из нормировки как $\frac{(S-1)!}{(s-1)!(S-s-1)!}$.

*) Речь идет об определении площади s -мерного сегмента на S -мерной единичной сфере.

Следовательно, среднее от $\left(\sum_{\rho=1}^s |x_{\rho}|^2 \right)^n$ будет равно

$$\begin{aligned} & \int_0^1 \frac{(S-1)!}{(s-1)!(S-s-1)!} u^{s-1} (1-u)^{S-s-1} \cdot u^n \cdot du = \\ & = \frac{(S-1)!}{(s-1)!(S-s-1)!} \int_0^1 u^{s+n-1} (1-u)^{S-s-1} du = \\ & = \frac{(S-1)!}{(s-1)!(S-s-1)!} \frac{(s+n-1)!(S-s-1)!}{(S+n-1)!} = \frac{s(s+1)\dots(s+n-1)}{S(S+1)\dots(S+n-1)}. \end{aligned}$$

3. Возвращаясь к унитарным $\{\xi_{\rho/\rho'}\}$, запишем для краткости $e_{\rho, \sigma} = \sum_{\tau=1}^s \xi_{\tau/\rho}^* \xi_{\tau/\sigma}$. В силу приведенных в **1.** оснований, все $e_{\rho, \sigma}$ ($\rho \neq \sigma$) имеют одно и то же распределение вероятностей, а равным образом и все $e_{\rho, \rho}^*$.

В $e_{\rho, \rho} = \sum_{\tau=1}^s |\xi_{\tau/\rho}|^2$ входит лишь ρ -й столбец матрицы $\{\xi_{\rho/\rho'}\}$, по нему можно усреднить так, как это было проделано в **2.** по единичной сфере (это легко следует из свойств инвариантности наших средних). Поэтому будет (через \mathfrak{M} мы обозначаем среднее)

$$\mathfrak{M}(e_{\rho, \rho}) = \frac{s}{S},$$

$$\mathfrak{M}(e_{\rho, \rho}^2) = \frac{s(s+1)}{S(S+1)},$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}\left(\left(e_{\rho, \rho} - \frac{s}{S}\right)^2\right) &= \mathfrak{M}(e_{\rho, \rho}^2) - \frac{2s}{S} \mathfrak{M}(e_{\rho, \rho}) + \frac{s^2}{S^2} = \\ &= \frac{s(s+1)}{S(S+1)} - \frac{s^2}{S^2} = \frac{s(S-s)}{S^2(S+1)}. \end{aligned}$$

Дальше из $E^2 = E$ выводим

$$e_{\rho, \rho} = \sum_{\sigma=1}^s |e_{\rho, \sigma}|^2 = e_{\rho, \rho}^2 + \sum_{\substack{\rho, \sigma=1 \\ \rho \neq \sigma}}^s |e_{\rho, \sigma}|^2.$$

^{*)} Перестановка строк и столбцов принадлежит к введенным там преобразованиям.

В силу равенства всех $\mathfrak{M}(|e_{\rho, \sigma}|^2)$ ($\rho \neq \sigma$) будет поэтому

$$\begin{aligned}\mathfrak{M}(|e_{\rho, \sigma}|^2) &= \frac{1}{S-1} (\mathfrak{M}(e_{\rho, \rho}) - \mathfrak{M}(e_{\rho, \rho}^2)) = \\ &= \frac{1}{S-1} \left(\frac{s}{S} - \frac{s(s+1)}{S(S+1)} \right) = \frac{s(S-s)}{S(S^2-1)}.\end{aligned}$$

Тем самым использованные в II. 4. средние значения найдены, причем в согласии с данными там значениями.

Теперь остается лишь исследовать распределения $|e_{\rho, \sigma}|^2$ ($\rho \neq \sigma$) и $(e_{\rho, \rho} - \frac{s}{S})^2$, чтобы определить средние M, N из II. 5..

4. Последнее проще всего: мы уже знаем, что $u \leqq e_{\rho, \rho} \leqq u + du$ ($0 \leqq u \leqq 1$) имеет вероятность $W(u) du$ (ср. 2.). Пусть a — некоторое число > 0 , $\ll \frac{s^2}{S^2}$, тогда вероятность, что $(e_{\rho, \rho} - \frac{s}{S})^2 \geqq a$ (заметим, что левая сторона заведомо $\leqq 1$, так как $0 \leqq e_{\rho, \rho} \leqq 1$) будет равна

$$\begin{aligned}&\left(\int_0^{\frac{s}{S} - \sqrt{a}} + \int_{\frac{s}{S} + \sqrt{a}}^1 \right) W(u) du = \\ &= \frac{(S-1)!}{(s-1)!(S-s-1)!} \left(\int_0^{\frac{s}{S} - \sqrt{a}} + \int_{\frac{s}{S} + \sqrt{a}}^1 \right) u^{s-1} (1-u)^{S-s-1} du.\end{aligned}$$

Логарифмическая производная подинтегрального выражения равна

$$\frac{s-1}{u} - \frac{S-s-1}{1-u} = \frac{1}{u(1-u)} ([s-1] - [S-2]u),$$

так что оно постоянно возрастает при приближении к $u = \frac{s-1}{S-2}$.

Это значение $< \frac{s}{S}$, причем на $\frac{s}{S} - \frac{s-1}{S-1} + \frac{S-2s}{S(S-1)} \leqq \frac{1}{S}$; поэтому если $a \geqq \frac{1}{S^2}$, то оно лежит в интервале $\frac{s}{S} \pm \sqrt{a}$. В области интегрирования подынтегральное выражение достигает поэтому своего максимума при $u = \frac{s}{S} \pm \sqrt{a}$ (мы не различаем где). Поэтому мы

можем оценить все выражение, оно будет

$$\leq \frac{(S-1)!}{(s-1)!(S-s-1)!} \left(\frac{s}{S} \pm \sqrt{a} \right)^{s-1} \left(1 - \frac{s}{S} \mp \sqrt{a} \right)^{S-s-1}.$$

Воспользуемся теперь тем, что $1 \ll s \ll S$, тогда первый множитель (на основании формулы Стирлинга) будет $\sim \sqrt{\frac{s}{2\pi}} \left(\frac{s}{S} \right)^{-s} \left(1 - \frac{s}{S} \right)^{S-s}$. а второй $\sim \frac{S}{s} \left(\frac{s}{S} \pm \sqrt{a} \right)^s \left(1 - \frac{s}{S} \mp \sqrt{a} \right)^{S-s}$. Поэтому все выражение будет

$$\sim \frac{S}{\sqrt{2\pi s}} \left(1 \pm \frac{s}{S} \sqrt{a} \right)^s \left(1 \mp \frac{s}{S-s} \sqrt{a} \right)^{S-s} = \\ = \frac{S}{\sqrt{2\pi s}} e^{s \ln \left(1 \pm \frac{s}{S} \sqrt{a} \right) + (S-s) \ln \left(1 \mp \frac{s}{S-s} \sqrt{a} \right)}.$$

Экспонента будет

$$\leq \pm s \frac{S \sqrt{a}}{s} - s \frac{S^2 a}{2s^2} \pm s \frac{S^2 a \sqrt{a}}{3s^3} \mp (S-s) \frac{S}{S-s} \sqrt{a} = \\ = - \frac{S^2 a}{2s} \pm \frac{S^3 a \sqrt{a}}{3s^2}.$$

В силу $\frac{s \sqrt{a}}{S} \ll 1$ второй член мал по сравнению с первым, так что наше выражение $\leq \frac{S}{\sqrt{2\pi s}} e^{-\Theta \frac{S^2 a}{2s}}$ (Θ — какое-то число < 1).

Это относилось к вероятности, что $\left(e_{p,p} - \frac{s}{S} \right)^2 \geq a$ для фиксированного $p = 1, \dots, S$. Вероятность того, что это будет иметь место для произвольного p [т. е. для $N = \max_{p=1, \dots, S} \left(\left(e_{p,p} - \frac{s}{S} \right)^2 \geq a \right)$],

в крайнем случае в S раз больше, таким образом $\leq \frac{S^2}{\sqrt{2\pi s}} e^{-\Theta \frac{S^2 a}{2s}}$.

Среднее значение N мы оцениваем теперь в двух областях: для значений ≥ 0 , $\leq a$ вероятность во всяком случае ≤ 1 , для значений же $\geq a$, ≤ 1 имеет место указанная граница. Итак,

$$\mathfrak{M}(N) \leq a + \frac{S^2}{\sqrt{2\pi s}} e^{-\Theta \frac{S^2 a}{2s}}.$$

В качестве a можно выбрать любое число $\geq \frac{1}{S^2}$, $\ll \frac{s^2}{S^2}$, мы положим $a = \frac{8s \ln S}{\Theta S^2}$. (Это дает все, если $s \gg \ln S$, что безусловно должно

выполняться в силу заключительного условия из II. 5.*.) Тогда наша верхняя граница будет

$$\frac{8s \ln S}{\theta \cdot S^2} + \frac{S^2}{V^{2\pi s}} e^{-4 \ln S} = \frac{8s \ln S}{\theta \cdot S^2} + \frac{1}{V^{2\pi s} S^2} \sim \frac{8s \ln S}{\theta \cdot S^2}.$$

Так что если предпосылки $1 \ll s \ll S$ выполнены достаточно сильно, то указанное среднее будет заведомо $\leq \frac{9s \ln S}{S^2}$.

5. Остается еще обсудить распределение $|e_{\rho, \sigma}|^2$ ($\rho \neq \sigma$). Обозначим ρ -й и σ -й столбцы $\{\xi_{\tau/\tau'}\}$ через $\xi = \{\xi_{1/\rho}, \dots, \xi_{S/\rho}\}$, $\eta = \{\xi_{1/\sigma}, \dots, \xi_{S/\sigma}\}$, и пусть $\tilde{\xi} = \{\xi_{1/\rho}, \dots, \xi_{s/\rho}, 0, \dots, 0\}$. (Воспользуемся для таких векторов $\zeta = \{\zeta_1, \dots, \zeta_S\}$, $\chi = \{\chi_1, \dots, \chi_S\}$ также символами $(\zeta, \chi) = \sum_{\tau=1}^S \zeta_{\tau} \chi_{\tau}^*$,

$|\zeta| = V(\zeta, \zeta) = \sqrt{\sum_{\tau=1}^S |\zeta_{\tau}|^2}$.) Будет: $|e_{\rho, \sigma}|^2 = |(\tilde{\xi}, \eta)|^2$, причем векторы ξ, η как столбцы унитарной матрицы подчиняются условиям $|\xi| = 1$, $|\eta| = 1$, $(\xi, \eta) = 0$ (т. е. оба лежат на единичной сфере и ортогональны друг к другу).

Разложим $\tilde{\xi}$ на компоненты — параллельную ξ и ортогональную ξ : $\tilde{\xi} = (\tilde{\xi}, \xi) \cdot \xi + \tilde{\xi}'$. Тогда равным образом будет: $|e_{\rho, \sigma}|^2 = |(\tilde{\xi}', \eta)|^2$. При фиксированном ξ (и $\tilde{\xi}, \tilde{\xi}'$) мы имеем, таким образом, два вектора, ортогональные к ξ , а именно $\tilde{\xi}'$ и η , из которых первый фиксирован, а второй свободно меняется на поверхности $(S - 1)$ -мерной единичной сферы. Введем какую-нибудь $(S - 1)$ -мерную декартову систему координат, и пусть $\eta = (y_1, \dots, y_{S-1})$. Из унитарной инвариантности нашего построения среднего следует, что усреднение (при фиксированном $\xi = \{\xi_{1/\rho}, \dots, \xi_{S/\rho}\}$) надо проводить в точности так, как если бы η усреднялось в смысле 2. по $(S - 1)$ -мерной единичной сфере. Дальше, в силу унитарной инвариантности, среднее зависит лишь от длины, $|\tilde{\xi}'|$, вектора $\tilde{\xi}'$, поэтому можно заменить его на $\tilde{\xi}' = \{|\tilde{\xi}'|, 0, \dots, 0\}$ ($(S - 1)$ -мерный!). В силу этого мы хотим

*) Из $\sum_{v=1}^{N_a} \frac{1}{s_{v, a}} \ll \frac{1}{\ln s_a}$ следует $s_{v, a} \gg \ln s_a$. Записанное иначе (ср. там): $\frac{N_a \ln s_a}{s_a} \ll 1$, $\frac{s_a \ln s_a}{s_a s_a} \ll 1$, так что сначала верно $\frac{s_a}{s_a^2} \leq 1$,

$\bar{s}_a \geq V s_a$, $\ln s_a \geq \frac{1}{2} \ln s_a$. Тем самым должно быть $s_{v, a} \gg \ln s_a$, т. е. $s \gg \ln s$.

определить сначала распределение $|\tilde{\xi}, \eta|^2 = |\tilde{\xi}|^2 \cdot |y_1|^2$ для $|\eta|^2 = \sum_{\pi=1}^{S-1} |y_\pi|^2 = 1$. То, что эта величина $\geq u, \leq u + du$ ($0 \leq u \leq |\tilde{\xi}|^2$), означает, что $\frac{u}{|\tilde{\xi}|^2} \leq |y_1|^2 \leq \frac{u}{|\tilde{\xi}|^2} + \frac{du}{|\tilde{\xi}|^2}$ и обладает вероятностью $W\left(\frac{u}{|\tilde{\xi}|^2}\right) \frac{du}{|\tilde{\xi}|^2}$, где в $W(u)$ из 2. надо s, S заменить на 1, $S - 1$. Итак, коэффициент при du будет

$$\frac{S-1}{|\tilde{\xi}|^{2(S-1)}} (|\tilde{\xi}|^2 - u)^{S-2}.$$

Но до сих пор ξ было фиксировано, теперь надо усреднить его (конечно, тоже в смысле 2.) по (S -мерной) единичной сфере. В выражение для распределения $|e_{\rho, \sigma}|^2$ при фиксированном ξ входит лишь $|\tilde{\xi}|^2$, а это равно (так как $\tilde{\xi}$ ортогонально к $\xi - \tilde{\xi}$ и к $\tilde{\xi} = \tilde{\xi} - (\xi, \tilde{\xi}) \cdot \tilde{\xi}$)

$$|\tilde{\xi}|^2 = (\tilde{\xi}, \tilde{\xi}) = (\xi, \tilde{\xi}),$$

$$|\tilde{\xi}|^2 = |(\xi, \tilde{\xi}) \cdot \xi|^2 + |\tilde{\xi}|^2 = |\tilde{\xi}|^4 + |\tilde{\xi}|^2,$$

$$|\tilde{\xi}|^2 = |\tilde{\xi}|^2(1 - |\tilde{\xi}|^2).$$

Поскольку $\xi = \{\xi_{1\rho}, \dots, \xi_{S\rho}\}$ изменяется на единичной сфере, то $w \leq |\tilde{\xi}|^2 \leq w + dw$ ($0 \leq w \leq 1$), т. е. $w \leq \sum_{\tau=1}^s |\xi_{\tau\rho}|^2 \leq w + dw$, обладает вероятностью $\frac{(S-1)!}{(s-1)!(S-s-1)!} w^{s-1} (1-w)^{S-s-1} dw$. Для того чтобы получить полную плотность вероятности для $|e_{\rho, \sigma}|^2$ в точке u , мы должны поэтому проинтегрировать

$$\begin{aligned} & \frac{(S-1)!}{(s-1)!(S-s-1)!} w^{s-1} (1-w)^{S-s-1} \times \\ & \times \frac{S-1}{(w(1-w))^{S-1}} (w(1-w) - u)^{S-2} \cdot dw = \\ & = \frac{(S-1)!(S-1)}{(s-1)!(S-s-1)!} \cdot \frac{(w(1-w) - u)^{S-2}}{w^{S-s}(1-w)^s} \cdot dw \end{aligned}$$

по всем $w \geq 0, \leq 1$ с $u \leq w(1-w)$. Вследствие этого надо учитывать для u вообще лишь значения $\leq \frac{1}{4}$. Мы определим сейчас же вероятность, что $|e_{\rho, \sigma}|^2 \geq a$ (согласно только что сказанному $0 \leq a \leq \frac{1}{4}$), для этого приведенное выражение надо проинтегриро-

вать по всем u, w с $a \leq u \leq w(1-w)$, т. е. по $\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - a} \leq w \leq \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - a}$, $a \leq u \leq w(1-w)$. Мы можем провести интегрирование по u :

$$\begin{aligned} & \frac{(S-1)!(S-1)}{(s-1)!(S-s-1)!} \int_{\frac{1}{2}-\sqrt{\frac{1}{4}-a}}^{\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}-a}} \int_a^{w(1-w)} \frac{(w(1-w)-u)^{S-2}}{w^{S-s}(1-w)^s} du dw = \\ & = \frac{(S-1)!}{(s-1)!(S-s-1)!} \int_{\frac{1}{2}-\sqrt{\frac{1}{4}-a}}^{\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}-a}} \frac{(w(1-w)-a)^{S-2}}{w^{S-s}(1-w)^s} dw. \end{aligned}$$

Разложим интеграл на две части, $\int_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}-a}}$ и $\int_{\frac{1}{2}-\sqrt{\frac{1}{4}-a}}^{\frac{1}{2}}$, и введем в них новые переменные с помощью $\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - x} = w$ и $\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - x} = w$ соответственно. В обоих случаях $x = w(1-w)$, в обоих случаях x пробегает значения от a до $\frac{1}{4}$. Складывая оба интеграла, получим

$$\begin{aligned} & \frac{(S-1)!}{(s-1)!(S-s-1)!} \times \\ & \times \int_a^{\frac{1}{4}} (x-a)^{S-1} \left[\left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - x} \right)^{-(S-s)} \left(\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - x} \right)^{-s} + \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - x} \right)^{-(S-s)} \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - x} \right)^{-s} \right] \frac{dx}{2\sqrt{\frac{1}{4} - x}}. \end{aligned}$$

Наконец, введем новую переменную $y = \frac{x-a}{\frac{1}{4} - a}$, которая пробегает значения от 0 до 1.

Тогда написанное выражение будет

$$\begin{aligned} & \frac{(1-4a)^{S-1} (S-1)!}{2^{S-1} (s-1)! (S-s-1)!} \times \\ & \times \int_0^1 y^{s-1} [(1 + \sqrt{1-4a} \sqrt{1-y})^{-(S-s)} (1 - \sqrt{1-4a} \sqrt{1-y})^{-s} + \\ & + (1 - \sqrt{1-4a} \sqrt{1-y})^{-(S-s)} (1 + \sqrt{1-4a} \sqrt{1-y})^{-s}] \frac{dy}{\sqrt{1-y}}. \end{aligned}$$

Разделим эту вероятность на $(1-4a)^{S-1}$, тогда от a будет еще зависеть лишь выражение [...]. Как мы покажем, оно возрастает при $a \rightarrow 0$, а следовательно и введенная дробь. Но так как при $a=0$ числитель (вероятность) = 1, а знаменатель $((1-4a)^{S-1})$ тоже, то тем самым доказано, что дробь всегда ≤ 1 , т. е. что вероятность всегда $\leq (1-4a)^{S-1} \leq e^{-4a(S-1)}$.

Если $a \rightarrow 0$, то $\sqrt{1-4a} \sqrt{1-y}$, возрастающая, стремится к $\sqrt{1-y}$, поэтому достаточно показать, что

$$[(1+t)^{-(S-s)} (1-t)^{-s} + (1-t)^{-(S-s)} (1+t)^{-s}]$$

при $t > 0$ возрастает. Действительно, его производная

$$(1+t)^{-(S-s)} (1-t)^{-s} \left(\frac{s}{1-t} - \frac{S-s}{1+t} \right) + \\ + (1-t)^{-(S-s)} (1+t)^{-s} \left(\frac{S-s}{1-t} - \frac{s}{1+t} \right) > 0,$$

если (мы полагаем $z = \frac{1+t}{1-t} > 1$)

$$z^s (sz - (S-s)) + z^{S-s} ((S-s)z - s) > 0,$$

но это выражение, очевидно,

$$> z^s (s - (S-s)) + z^{S-s} ((S-s)-s) = (z^{S-s} - z^s)((S-s)-s) \geq 0.$$

Тем самым приведенная оценка вероятности $|e_{\rho, \sigma}|^2 \geq a$ для фиксированной пары $\rho \neq \sigma$, $\rho, \sigma = 1, \dots, S$ подтверждена. Вероятность того, что это случится для каких-то ρ, σ [т. е. для $M = \max_{\rho \neq \sigma, \rho, \sigma=1, \dots, S} (|e_{\rho, \sigma}|^2 \geq a)$, в крайнем случае в $\frac{S(S-1)}{2}$ раз больше (так как $e_{\rho, \sigma} = e_{\sigma, \rho}^*$, то достаточно рассмотреть $\rho < \sigma$), т. е. $\geq \frac{S(S-1)}{2} e^{-4a(S-1)}$. Среднее значение M оценим снова в двух обла-

стях: для значений $\geq 0, \leq a$ вероятность во всяком случае ≤ 1 , а для значений $\geq a, \leq \frac{1}{4}$ имеет место приведенная оценка. Итак,

$$\mathfrak{M}(M) \leq a + \frac{S(S-1)}{8} e^{-4a(S-1)}.$$

В качестве a можно взять любое число $\geq 0, \ll 1$, мы полагаем $a = \frac{3}{4} \frac{\ln S}{S}$. (Пригодное, так как $S \gg 1$.) Тогда наша верхняя граница будет

$$\begin{aligned} \frac{3}{4} \frac{\ln S}{S} + \frac{S(S-1)}{8} e^{-3 \ln S} \frac{\frac{S-1}{S}}{e^{-3 \ln S}} &\sim \frac{3}{4} \frac{\ln S}{S} + \frac{S^2}{8} e^{-3 \ln S} = \\ &= \frac{3}{4} \frac{\ln S}{S} + \frac{1}{8S} \sim \frac{3}{4} \frac{\ln S}{S}. \end{aligned}$$

Таким образом, если предпосылка $S \gg 1$ выполнена достаточно сильно, то рассматриваемое среднее будет $\leq \frac{\ln S}{S}$.

Тем самым желаемые оценки полностью проведены.