«ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА»,
1979, том 10, вып. 1

УДК 530.145.1

КВАНТОВАЯ И КЛАССИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ФАЗОВОГО ПРОСТРАНСТВА

Ю. М. Широков
Научно-исследовательский институт ядерной физики МГУ, Москва

Теория гамильтоновых механических систем изложена на языке только таких физических и математических понятий, которые имеют смысл как в классической, так и в квантовой механике. В частности, наблюдаемые в обеих механиках являются c-числовыми функциями координат и импульсов. Операции обычного умножения наблюдаемых и скобки Пуассона, также трактуемые как разновидности операций умножения, выделены в отдельные объекты, которые могут обладать структурными свойствами, включая зависимость от $\hbar$. При этом оказывается, что *единственным первичным отличием квантовой механики от классической является конкретная форма одного алгебраического тождества для операций умножения*. Все остальные различия получаются как вторичные.

Развитый в работе формализм особенно удобен для квантований и для переходов к классике (в том числе частичных). Переходы в обоих направлениях прозрачны и поддаются исследованию для любых величин на любом этапе выкладок. Построена единая квантово-классическая теория рассеяния. Получено интегральное квантовое уравнение типа Липпмана — Швингера, в котором роль свободного решения играет решение соответствующей классической задачи. Итерирование этого уравнения дает квантовые поправки к классическим решениям.

The theory of the hamiltonian mechanical systems has been formulated in terms of only such physical and mathematical concepts which are meaningful in both mechanics. For instance the observables in both mechanics are represented as c-number functions of coordinates and momenta. The operations of the usual multiplication of observables as well as Poisson bracket (also treated as a sort of multiplication) are singled out as separate objects which can possess their own structure including $\hbar$-dependence. This lead to the conclusion that *the only primary distinction between classical and quantum mechanics is reduced to the distinction in the form of the algebraic identity for the multiplication operations*. All other distinctions are proved to be of the secondary origin.

The formalism developed in the paper is especially useful for quantizations and for transitions (including partial ones) to the classical limits. The transitions in both directions are transparent and accessible for analysis for any quantity at any step of calculations. The unified quantum-classical scattering theory is constructed. The integral quantum Lippman-Schwinder type equation is derived where the free solution term is replaced by the solution of the corresponding classical problem. The iteration of this equation gives the quantum corrections to the classical solution.

ВВЕДЕНИЕ

Стандартные формулировки квантовой механики и классической механики базируются на системах существенно различных физических и математических понятий, как правило, «не выдерживающих» переходов от одной теории к другой. В классической механике не существует аналога квантового вектора состояния, в квантовой теории нет аналога классической траектории и т. д. Каждая из формулировок прекрасно приспособлена для вычислений в рамках «своей» механики. Но переходы от одной механики к другой нередко выглядят мучительными, загадочными и требующими не только науки, но и искусства. Например, пусть одну подсистему можно рассматривать классически (с возможными квантовыми поправками), а другую — только квантово. Как описать взаимодействие между ними?

Задачи, в которых требуется комбинированное квантово-классическое рассмотрение, возникают во многих и разных ситуациях (квантование солитонов, столкновение тяжелых ионов с переходами на возбужденные уровни, квантовые поправки к классическому излучению, многомерное туннелирование и др.). Поиски решений этих проблем приводят к очевидной мысли, что для рассмотрения всех таких комбинированных ситуаций было бы удобно сформулировать классическую и квантовую механику на языке одних и тех же физических и математических понятий. Такая единая формулировка существует и будет изложена ниже. В [1] она названа объединенной алгеброй для квантовой и классической механики. В объединенной алгебре выяснилось, что структуры классической и квантовой механики не только сходны, но даже идентичны во всем, кроме конкретной формы одного тождества [(12а) в классической механике вместо (12) — в квантовой].

При построении объединенной алгебры синтезированы три группы идей и методов.

1. Восходящие к пионерским работам Вейля [2], Вигнера [3] и Мойала [4] методы использования фазового пространства для описания квантовых состояний и наблюдаемых.

2. Методы теории топологических векторных пространств и топологических алгебр (см., например, [5, 6] для общих определений наблюдаемых, состояний, чистых состояний, положительных состояний).

3. Методы универсальных алгебр, дающие возможность рассматривать алгебры с несколькими различными операциями умножений (общую теорию этих методов см., например, в [7, 8], использование их в квантовой механике — в [9—11]).

Переход к объединенной алгебре дает определенный выигрыш за определенную плату. Выигрыш состоит в том, что переходы между квантовой и классической механикой становятся прозрачными и поддающимися прямому исследованию (и совершению там, где можно) на любом этапе выкладок. Плата состоит в том, что обе теории приходится излагать в непривычных физических и математических понятиях. Поэтому для облегчения чтения и во избежание недоразумений ниже даются указания для читателя.

1. В работе классическая и квантовая механика трактуются как частные случаи гамильтоновых теорий. Поэтому эпитет «гамильтонов» следует понимать как «и классический, и квантовый», а высказывания (определения, свойства, формулы и т. п.), область применимости которых не оговорена или не ясна из контекста, следует считать справедливыми для обеих механик.

2. Символы π, $\pi_\hbar$, π_0, $\Pi_\hbar$, σ, σ_0, $\sigma_\hbar$ везде (кроме ясных по контексту случаев, например, где π — соответствующее число) обозначают новые объекты — различные операции умножения наблюдаемых. При этом символ умножения записывается справа от пары перемножаемых объектов. Например, $AB\sigma_0$ означает умножение A на B операцией σ_0. Разумеется, вообще говоря, $AB\sigma_0 \neq$ $\neq AB\sigma_\hbar$ и т. п. Согласно п. 1 умножения $\pi_\hbar$, $\sigma_\hbar$, $\Pi_\hbar$ — квантовые, умножения π_0, σ_0 — классические (в них $\hbar = 0$), а использование умножения π, σ означает, что соответствующая формула справедлива в обеих механиках.

3. В работе используются линейные операторы, действующие в разных пространствах. Обычные квантовомеханические операторы, действующие на векторы состояния, обозначаются заглавными буквами со шляпками, например $\hat{A}$, $\hat{B}$. Агрегаты типа $B\pi$, $B\sigma$, а также заглавные буквы рукописного шрифта [например, $\mathcal{U}(t)$] обозначают операторы, действующие влево на наблюдаемые A. Результатом такого действия являются новые наблюдаемые $AB\pi$, $AB\sigma$, $A\mathcal{U}(t)$. По определению, $B\pi$ есть оператор умножения слева на B операцией π, что и отражено в обозначении.

Операторы, действующие вправо на состояния ρ, обозначаются такими же символами со стрелками снизу, например: $\underrightarrow{B\pi}$, $\underrightarrow{B\sigma}$, $\underrightarrow{\mathcal{U}}(t)$. По определению, для любой наблюдаемой A и любого состояния ρ

$$\langle A\mathcal{U},\ \rho\rangle = \langle A,\ \underrightarrow{\mathcal{U}}\rho\rangle, \tag{1}$$

где $\langle A,\ \rho\rangle$ — билинейный функционал, имеющий физический смысл среднего значения наблюдаемой A в состоянии ρ.

4. Для понимания настоящего обзора не требуется никаких специальных знаний ни по топологическим, ни по универсальным алгебрам. Необходимые для понимания математические результаты, типа существования разложений по $\hbar$, математической корректности различных операций умножений и т. п., приводятся без доказательств с соответствующими ссылками.

1. НАБЛЮДАЕМЫЕ, СОСТОЯНИЯ, СРЕДНИЕ

Начнем построение объединенной квантово-классической алгебры для одномерного движения.

В любой физической теории нас интересуют наблюдаемые, состояния и способ вычисления среднего значения данной наблюдаемой в данном состоянии.

В обычной формулировке классической механики каждая наблюдаемая является c-числовой функцией $A\,(p,\ q)$ импульсов и координат, а каждое состояние задается парой чисел p_0, q_0. Значение наблюдаемой в таком состоянии равно просто $A\,(p_0,\ q_0)$. Для того чтобы приблизиться к квантовому рассмотрению, перейдем к более общему статистическому описанию состояния с помощью (также c-числовой) функции распределения $\rho\,(p,\ q)$, удовлетворяющей очевидным условиям действительности, нормированности и положительности:

$$\rho=\rho^{*};\ \int dp\,dq\rho\,(p,\ q)\overset{\text{def}}{=}\langle 1,\ \rho\rangle=1;\ \rho_{\text{кл}}\geqslant 0. \tag{2}$$

Теперь можно ввести среднее значение $\langle A,\ \rho\rangle$ наблюдаемой A в состоянии ρ:

$$\langle A,\ \rho\rangle\overset{\text{def}}{=}\int dp\,dqA\,(p,\ q)\,\rho\,(p,\ q). \tag{3}$$

Для детерминированного состояния $\rho=\delta\,(p-p_0)\,\delta\,(q-q_0)$ получаем старый результат $\langle A,\ \rho\rangle=A\,(p_0,\ q_0)$.

В обычной формулировке квантовой теории наблюдаемые являются операторами $\hat{A}$ и описываются матричными элементами $\langle q_1\mid\hat{A}\mid q_2\rangle\overset{\text{def}}{=}A_0\,(q_1,\ q_2)$. Состояния описываются векторами состояния $\psi\,(q)$. Вместо вектора состояния можно ввести более общее понятие матрицы плотности $\langle q_2\mid\hat{\rho}\mid q_1\rangle\overset{\text{def}}{=}\rho_0\,(q_2,\ q_1)$:

$$\langle q_2|\hat{\rho}|\,q_1\rangle=\sum_n\lambda_n\psi_n\,(q_2)\,\psi_n^{*}\,(q_1), \tag{4}$$

где $\lambda_n\geqslant 0$; $\sum\limits_n\lambda_n=1$. Среднее значение наблюдаемой $\hat{A}$ в состоянии $\hat{\rho}$ запишется в форме

$$\langle A,\ \rho\rangle=\operatorname{Sp}(\hat{A}\hat{\rho})=\int dq_1\,dq_2A_0\,(q_1,\ q_2)\,\rho_0\,(q_2,\ q_1). \tag{5}$$

Для сближения квантового описания с классическим перейдем от функций A_0 и ρ_0 линейным невырожденным преобразованием

$$\left.\begin{aligned} A_0(q_1, q_2) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\,dq A(p, q)\exp\{i\hbar^{-1}p(q_1-q_2)\}\times \\ &\quad\times\delta\left\{q-\frac{1}{2}(q_1+q_2)\right\}; \\ \rho_0(q_2, q_1) &= \int dp\,dq\exp\{i\hbar^{-1}p(q_2-q_1)\}\times \\ &\quad\times\delta\left\{q-\frac{1}{2}(q_1+q_2)\right\}\rho(p, q) \end{aligned}\right\} \quad (6)$$

к вейлевскому представлению операторов [2] c-числовыми функциями $A(p, q)$ и к вигнеровской [3] матрице плотности $\rho(p, q)$. Преобразования (6) обладают следующими свойствами, сближающими новые функции A, ρ с соответствующими классическими величинами:

1) переменные p, q функций $A(p, q)$ сопоставлены соответственно операторам $\hat{p}$, $\hat{q}$ импульса и координаты;

2) для любой наблюдаемой $A(p, q)$ квантовым скобкам Пуассона $(i\hbar)^{-1}[\hat{A}, \hat{p}]$, $(i\hbar)^{-1}[\hat{A}, \hat{q}]$ сопоставлены функции $\partial A/\partial q$, $-\partial A/\partial p$;

3) функции $A(p, q)$, $\rho(p, q)$ действительны, если они сопоставлены самосопряженным операторам $\hat{A}$, $\hat{\rho}$;

4) выражение (5) для среднего принимает одинаковый с классическим вид (3).

Однако известно, что вигнеровская матрица плотности не всегда положительно определена. Поэтому из трех условий (2) лишь первые два справедливы для обеих механик. Ниже, в разд. 3, мы увидим, что различие в третьем из условий (2) является не первичным, а вторичным.

2. КЛАССИЧЕСКИЕ И КВАНТОВЫЕ ОПЕРАЦИИ УМНОЖЕНИЯ НАБЛЮДАЕМЫХ

Перейдем к ключевому вопросу об операциях умножения наблюдаемых. Назовем операцией умножения π любое правило, по которому каждой упорядоченной паре (A, B) наблюдаемых однозначно и билинейно сопоставляется третья наблюдаемая C, называемая их произведением $(A, B)\to C \stackrel{\text{def}}{=} AB\pi$. Билинейность умножения выражается равенствами

$$(\alpha A_1+\beta A_2)B\pi=\alpha A_1B\pi+\beta A_2B\pi; \quad A(\alpha B_1+\beta B_2)=\alpha AB_1\pi+\beta AB_2\pi,$$

где α и β — комплексные числа.

Обратим внимание на то, что операция умножения записывается справа от перемножаемых элементов, а не между ними (см., например, [7, 8]).

Очевидно, что при таком определении можно вводить для одного и того же множества несколько операций умножения, причем необязательно коммутативные или ассоциативные.

Перечислим независимые операции над наблюдаемыми $A\ (p,\ q)$. Прежде всего наблюдаемые можно умножать на числа и складывать друг с другом. Это означает, что множество $\{A\}$ всех наблюдаемых образует векторное пространство. Кроме того, в каждой из механик для наблюдаемых существуют две операции умножения — обычное умножение π и пуассоново умножение σ.

Классическое обычное умножение π_0 ассоциативно, коммутативно и реализуется как простое перемножение функций. Пуассоново классическое умножение σ_0 антикоммутативно и реализуется классической скобкой Пуассона:

$$AB\sigma_0 \overset{\text{def}}{=} \left[\frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q} \pi_0 \right]. \tag{7}$$

Напомним, что любая пара наблюдаемых, например $(\partial A/\partial q)\ \partial B/\partial p$, становится произведением только после того, как справа написана соответствующая операция умножения. Из произвольности A, B следует, что (7) можно переписать в форме равенства между операциями:

$$\sigma_0 = (\partial_{1q}\partial_{2p} - \partial_{1p}\partial_{2q})\ \pi_0. \tag{8}$$

Здесь ∂_{1q} — действующая влево операция дифференцирования первого сомножителя по q и т. п.

Введем теперь для наблюдаемых операцию ассоциативного квантового умножения $\Pi_\hbar$, определив ее требованием

$$AB\Pi_\hbar = C, \tag{9}$$

если для соответствующих операторов $\hat{A}\hat{B} = \hat{C}$. Из (6) следует, что $\Pi_\hbar$ имеет вид

$$\Pi_\hbar = \exp\{(i\hbar)/2\ (\partial_{1q}\partial_{2p} - \partial_{1p}\partial_{2q})\}\ \pi_0. \tag{10}$$

Экспоненту от операций дифференцирования следует понимать как вычисляемую с помощью фурье-преобразований:

$$\begin{aligned} C\ (p,\ q) = AB\Pi_\hbar &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dx_1 dx_2 dp_1 dp_2 \exp\{ip\ (x_1 + x_2) - \\ &- ip_1x_1 - ip_2x_2\}\ A\left(p_1,\ q - \frac{\hbar x_2}{2}\right) B\left(p_2,\ q + \frac{\hbar x_1}{2}\right) = \\ &= \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int dq_1 dq_2 dp_1 dp_2 A\ (p_1,\ q_1)\ B\ (p_2,\ q_2) \times \\ &\times \exp\left\{\frac{2i}{\hbar}(pq_2 - pq_1 - p_1q_2 + p_2q_1 + qp_1 - qp_2)\right\}. \end{aligned} \tag{11}$$

Формула (11) была получена Мойалом [4]. Квантовая скобка Пуассона в обычном формализме имеет вид $(i\hbar)^{-1}[\hat{A}, \hat{B}]$. Отсюда следует, что операцию квантового пуассонова умножения $\sigma_\hbar$ можно связать с $\Pi_\hbar$ равенством

$$\Pi_\hbar - \Pi_\hbar^T = i\hbar\sigma_\hbar, \tag{12}$$

где $\Pi_\hbar^T$ — транспонированное $\Pi_\hbar$-умножение;

$$AB\Pi_\hbar^T \overset{\text{def}}{=} BA\Pi_\hbar. \tag{13}$$

Можно также ввести коммутативное, но неассоциативное квантовое умножение $\pi_\hbar$:

$$\pi_\hbar = (\Pi_\hbar + \Pi_\hbar^T)/2, \tag{14}$$

соответствующее половине антикоммутатора. Умножение $\pi_\hbar$ называется йордановым. Согласно (10), (12), (14)

$$\sigma_\hbar = (2/\hbar)\sin(\hbar D_{12}/2)\,\pi_0; \tag{15}$$

$$\pi_\hbar = \cos(\hbar D_{12}/2)\,\pi_0, \tag{16}$$

где $D_{12} = \partial_{1q}\partial_{2p} - \partial_{1p}\partial_{2q}$.

Из (10), (15), (16) видно, что при $\hbar \to 0$ (точнее, при $\hbar \to +0$)

$$\Pi_\hbar \to \pi_0; \quad \pi_\hbar \to \pi_0; \quad \sigma_\hbar \to \sigma_0. \tag{17}$$

Поэтому за соответствующую π_0 операцию обычного квантового умножения следует принять либо $\Pi_\hbar$, либо $\pi_\hbar$. В [9] и [10], где, по-видимому, впервые операции умножения квантовых наблюдаемых вводились как самостоятельные объекты, а также в [1, 12] за квантовый аналог π_0 принималось йорданово умножение $\pi_\hbar$. Однако в разд. 3 мы увидим, что правильно считать обычным квантовым умножением $\Pi_\hbar$, ибо именно при таком выборе можем сформулировать *главное утверждение настоящей работы*: *единственным первичным отличием квантовой механики от классической является различие между парами умножений* π_0, σ_0 *и* $\Pi_\hbar$, $\sigma_\hbar$, *состоящее в том, что умножение* π_0 *коммутативно, т. е. удовлетворяет тождеству*

$$\pi_0 - \pi_0^T = 0, \tag{12a}$$

в то время как для $\Pi_\hbar$ *справедливо тождество* (12). *Все остальные необходимые и достаточные исходные положения формулируются в терминах умножений* π, σ *одинаково для обеих механик.*

Эти положения определяют классическую механику при $\pi \to \pi_0$; $\sigma \to \sigma_0$ и квантовую при $\pi \to \Pi_\hbar$; $\sigma \to \sigma_\hbar$. В частности, из (8), (10), (15) можно получить тождества для любых наблюдаемых A, B, C:

$$AB\pi C\sigma = AC\sigma B\pi + ABC\sigma\pi; \tag{18}$$

$$AB\sigma C\sigma = AC\sigma B\sigma + ABC\sigma\sigma, \tag{19}$$

справедливые (как это указано обозначениями) для обеих механик. Эти тождества в [11] названы условиями гамильтоновости теории. Их смысл объяснен в разд. 5.

В математическом смысле наблюдаемые каждой из механик образуют алгебру с двумя умножениями π и σ. Можно даже продвинуться дальше и определить объединенную квантово-классическую алгебру с четырьмя операциями умножений π_0, σ_0, $\Pi_\hbar$, $\sigma_\hbar$, поскольку у нас обе алгебры реализованы на одних и тех же объектах — функциях $A(p, q)$. Надо только помнить, что в алгебре каждая операция должна существовать для любой пары элементов и приводить снова к элементу алгебры. Это требование накладывает довольно жесткие ограничения на запас элементов векторного пространства наблюдаемых $\{A\}$. Вопрос об этих ограничениях был подробно исследован в [1]. Оказалось, что в пространство $\{A\}$ можно включить все бесконечно дифференцируемые функции, растущие на бесконечности (вместе со всеми производными) не быстрее, чем полиномиально.

Квантовая алгебра наблюдаемых с умножением Мойала (10) исследовалась во многих работах (см., например, [13—17], где имеются ссылки на более ранние работы), в которых, однако, пространство $\{A\}$ либо вообще не определялось (например, в [13—14]), либо считалось пространством бесконечно дифференцируемых функций, быстро (быстрее любого полинома по $|p|^{-1}$, $|q|^{-1}$) спадающих на бесконечности (например, в [15]), либо принималось изоморфным пространству ограниченных операторов. Однако ограничение как быстро спадающими функциями, так и функциями, соответствующими ограниченным операторам, ведет к исключению из рассмотрения таких наблюдаемых, как импульс и кинетическая энергия. Кроме того, для функций, соответствующих ограниченным операторам, почти всюду не определено дифференцирование и тем самым умножение σ_0.

3. УСЛОВИЯ ДЕЙСТВИТЕЛЬНОСТИ И ПОЛОЖИТЕЛЬНОСТИ НАБЛЮДАЕМЫХ И СОСТОЯНИЙ

Начиная с этого раздела будем следить за выполнением главного утверждения настоящей работы. Множество наблюдаемых $\{A\}$ одинаково для классической и квантовой теорий. Учитывая, что в квантовой теории используются и несамосопряженные операторы, следует принять, что функции $A(p, q)$ могут быть не только действительными, но и комплексными. При этом появится новая операция над наблюдаемыми — инволюция J, которая в операторной формулировке соответствует эрмитову сопряжению $\hat{A} \to \hat{A}^+$, а в реализации фазового пространства — комплексному сопряжению $A(p, q) \to A^*(p, q)$. Будем считать, что операция инволюции действует влево, так что

$$AJ = A^*. \tag{20}$$

Очевидно, что $J^2 = 1$.

Действительные (или, что то же,— эрмитовы) наблюдаемые теперь выделяются условием

$$AJ = A, \text{ т. е, } A = A^*. \tag{21}$$

В полное пространство состояний $\{\rho\}$ включим все действительные и комплексные функции $\rho(p, q)$, для которых величина $\langle A, \rho\rangle$ из (3) существует при всех A из $\{A\}$. В этом случае $\{\rho\}$ будет векторным пространством, содержащим все обычные и обобщенные функции, быстро спадающие на бесконечности (вместе со всеми производными). В частности, в $\{\rho\}$ входят детерминированные классические состояния $\delta(p - p_0)\, \delta(q - q_0)$.

В пространстве $\{\rho\}$ также вводится операция инволюции $\underset{\to}{J}$, которую удобно считать действующей вправо и осуществляющей комплексное сопряжение

$$\underset{\to}{J}\rho = \rho^*. \tag{22}$$

Операции J, $\underset{\to}{J}$ связаны друг с другом соотношением $\langle AJ, \rho\rangle = \langle A, \underset{\to}{J}\rho\rangle^*$. В полной аналогии с (21) действительные состояния определяются условием

$$\underset{\to}{J}\rho = \rho, \text{ т. е. } \rho = \rho^*. \tag{23}$$

Билинейная форма $\langle A, \rho\rangle$ действительна при действительных A, ρ. Подчеркнем, что изложение все время относится сразу к обеим механикам.

В физике встречаются наблюдаемые (например, кинетическая энергия), измерения которых дают только неотрицательные результаты. Такие наблюдаемые называются положительными. По определению, наблюдаемая B является положительной, если она представима в форме

$$B_{\text{полож}} = AA^*\pi, \tag{24}$$

где A — некоторая другая (не обязательно действительная) наблюдаемая. Здесь в типичной форме проявляется одно из вторичных различий между квантовой и классической механикой. Условие

(24) справедливо для обеих механик, но содержит операцию умножения π, которая имеет разные свойства в разных механиках. В классической механике $\pi = \pi_0$, откуда (24) сводится к соотношению

$$B_{\text{полож. кл.}} \geqslant 0. \tag{24а}$$

В квантовой механике положительными будут те элементы, которые представимы в виде

$$B_{\text{полож. кв}} = AA^* \Pi_\hbar. \tag{24б}$$

Именно здесь проявляется отмеченное в предыдущем разделе отличие принятого здесь определения $\pi = \Pi_\hbar$ для обычного квантового умножения от определения $\pi = \pi_\hbar$, принятого в [1, 9, 10, 12]. Например, наблюдаемая

$$p^2 + q^2 - \hbar = (p + iq)(p - iq)\Pi_\hbar$$

положительна относительно первого определения и неположительна относительно второго. Отметим, что если пользоваться только действительными наблюдаемыми, то оба определения совпадают.

Физически допустимы лишь состояния, в которых средние от положительных наблюдаемых неотрицательны, т. е. при любом A:

$$\langle AA^*\pi, \rho\rangle \geqslant 0. \tag{25}$$

Это условие также справедливо для обеих механик. И здесь различие между умножениями π_0 и $\Pi_\hbar$ ведет к вторичному различию между множествами $[\rho]_{\text{кл}}$ и $[\rho]_{\text{кв}}$ соответственно классических и квантовых положительных состояний. Для классических положительных состояний условие (25) эквивалентно неотрицательности ρ:

$$\rho_{\text{кл}} \geqslant 0. \tag{25а}$$

Как и следовало ожидать, множество $[\rho]_{\text{кл}}$ составлено из классических функций распределения $\rho(p, q)$. Множество квантовых состояний $[\rho]_{\text{кв}}$ совпадает с множеством допустимых вигнеровских матриц плотности (6). Оно отличается, с одной стороны, от $[\rho]_{\text{кл}}$ настолько глубоко, что не существует линейного преобразования, переводящего одно множество в другое [1]. С другой стороны, имеется «достаточно много» функций, входящих в оба множества. Таковыми, в частности, являются гауссоиды

$$(2\pi QP)^{-1} \exp\{-(1/2)[(q - q_0)^2 Q^{-2} - (p - p_0)^2 P^{-2}]\}, \tag{26}$$

у которых ширины $Q > 0$; $P > 0$ совместны с соотношением неопределенностей $QP \geqslant \hbar/2$. Заметим, что эти гауссоиды удовлетворяют полученному в разд. 13 неравенству $|\rho(p, q)| \leqslant (\pi\hbar)^{-1}$ для ρ из $[\rho]_{\text{кв}}$.

Известно, что существуют вигнеровские матрицы плотности ρ из $[\rho]_{\text{кв}}$, не являющиеся положительно определенными, т. е. не входящие в $[\rho]_{\text{кл}}$. Менее известно дуальное свойство [1]: существуют классические состояния, не удовлетворяющие квантовому условию положительности. В частности, «квантово-неположительны» классические состояния $\rho_{\text{кл}} = \delta(p - p_0)\,\delta(q - q_0)$, соответствующие точной фиксации импульса и координаты. Действительно, для наблюдаемой $A = (p^2 + q^2)/2$ получим

$$\langle AA^*\Pi_\hbar,\ \rho_{\text{кл}}\rangle = (p_0^2 + q_0^2)^2/4 - \hbar^2/4,$$

т.е. выражение, отрицательное при $p_0^2 + q_0^2 < \hbar$. Проверка положительности квантового состояния часто оказывается технически сложной задачей. Эту трудность можно обойти, если перейти от состояний $\rho_{\text{кв}}$ к новым величинам $\Psi_{\text{кв}}(p, q)$, которые можно назвать амплитудами состояний. Определим амплитуду квантового состояния соотношением

$$\rho_{\text{кв}}(p, q) = \Psi_{\text{кв}}(p, q)\,\Psi^*_{\text{кв}}(p, q)\,\widetilde{\Pi}_\hbar, \tag{27}$$

где $\widetilde{\Pi}_\hbar$ — операция ассоциативного умножения:

$$\widetilde{\Pi}_\hbar = \exp(i\hbar D_{12}/2)\,\pi_0. \tag{28}$$

Видно, что $\widetilde{\Pi}_\hbar$ совпадает с $\Pi_{\widetilde{\hbar}}$. Но это совпадение в некотором смысле случайно. Умножение $\widetilde{\Pi}_\hbar$ определено на иных объектах, чем $\Pi\hbar$, и, кроме того, иначе преобразуется при линейных преобразованиях *. Непосредственной проверкой можно убедиться в том, что состояния, представимые в форме (27), удовлетворяют условию квантовой положительности.

Положительные состояния будут также называться физическими, поскольку только они описывают реальные физические системы.

4. ЧИСТЫЕ И СМЕШАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Физические состояния ρ подразделяются на чистые и смешанные. Общее для обеих механик определение таково. Положительное нормированное состояние ρ называется смешанным, если оно представимо в форме

$$\rho = \lambda_1\rho_1 + \lambda_2\rho_2, \tag{29}$$

где $\lambda_1, \lambda_2 > 0$; $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$; $\rho_1 \neq \rho$; $\rho_2 \neq \rho$; ρ_1, ρ_2 — также положительные нормированные состояния. Положительное состоя-

* Математически наблюдаемые являются контравариантными символами (см. [17]), а величины ρ, Ψ, Ψ^* — ковариантными. Поэтому операции умножения $\Pi_\hbar$, $\widetilde{\Pi}_\hbar$ имеют различные трансформационные свойства.

ние, не представимое в форме (29), называется чистым. Геометрически множество положительных состояний $[\rho]$ в каждой из механик образует конус. Смешанные состояния, согласно (29), являются внутренними точками конуса. Чистые состояния являются крайними точками конуса. Из-за различия конусов $[\rho]_{\text{кл}}$, $[\rho]_{\text{кв}}$ (в конечном счете опять-таки из-за различия операций умножения π_0 и $\Pi_\hbar$) классические чистые состояния резко отличаются от квантовых. Именно классические чистые состояния имеют вид

$$\rho_{\text{кл. чист}} = \delta(p - p_0)\,\delta(q - q_0), \tag{30}$$

т. е. соответствуют полному отсутствию статистического разброса для всех наблюдаемых. Квантовые чистые состояния представимы в форме

$$\rho_{\text{кв. чист}}(p, q) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dq' \exp(-\mathrm{i}\hbar^{-1}pq')\,\psi\left(q - \frac{q'}{2}\right)\psi^*\left(q + \frac{q'}{2}\right), \tag{31}$$

т. е. допускают описание в терминах векторов состояния (не путать с амплитудой состояния $\Psi_{\text{кв}}(p, q)$!).

Можно сказать, что обычные формализмы в каждой из механик построены для описания только чистых состояний и именно поэтому не приспособлены для переходов от одной механики к другой.

5. ГЕНЕРАТОРЫ

В операторной формулировке квантовой механики каждая наблюдаемая $\hat{A}$ является одновременно генератором некоторой однопараметрической группы Ли. В частности, гамильтониан $\hat{H}$ является генератором смещения во времени. В классической механике сами наблюдаемые генераторами не являются. Однако с каждой наблюдаемой однозначно связан соответствующий генератор. В наиболее общей форме эти связи сформулированы в [11]. В развиваемом подходе и этот вопрос решается одинаково для обеих механик. Для получения генераторов служит операция пуассоновского умножения σ. Прежде всего отметим, что выражение $AB\sigma$, по определению, допускает два (конечно, согласованных друг с другом) толкования. Во-первых, можно мысленно поставить скобки таким образом: $(AB)\,\sigma$ — и тем самым считать это выражение произведением двух элементов из пространства $\{A\}$. Во-вторых, столь же законно мыслить скобки и другим образом $A\,(B\sigma)$. В этом случае агрегат $B\sigma$ можно трактовать как линейный оператор, действующий влево на векторном пространстве $\{A\}$ функций $A(p, q)$ по правилу: $A \to AB\sigma$. Этот оператор и является генератором соответствующей однопараметрической группы Ли. Для того чтобы быть генератором группы Ли, оператор должен удовлетворять определенным математическим соотношениям. Одна из форм этих соотношений состоит в том, что каждый генератор $C\sigma$ должен быть оператором дифференцирования, т. е. удовлетворять правилу дифференцирования произведения для всех произведений $AB\pi$, $AB\sigma$. Но именно это правило и выражено тождествами (18), (19), которые доказывают, что каждой наблюдаемой C в каждой из механик соответствует генератор $C\sigma$.

Из (18), (19) следует, что для оператора $\exp(zC\sigma)$ конечного преобразования группы Ли (z — параметр группы) справедливы соотношения

$$A(0)\,B(0)\,\pi\exp(zC\sigma) = A(z)\,B(z)\,\pi; \tag{32}$$

$$A(0)\,B(0)\,\sigma\exp(zC\sigma) = A(z)\,B(z)\,\sigma, \tag{33}$$

где $A(z) = A(0)\exp(zC\sigma)$; $B(z) = B(0)\exp(zC\sigma)$. Не будем останавливаться на чисто математическом вопросе о том, что для некоторых элементов алгебры Ли могут не существовать соответствующие элементы группы Ли. С помощью (19) (а это — не что иное, как тождество Якоби) легко убедиться в том, что если совокупность наблюдаемых L_m ($m = 1, 2, \ldots, M$) образует по отношению к пуассоновскому умножению алгебру Ли со структурными константами G^l_{mn}

$$L_m L_n \sigma = G^l_{mn} L_l, \tag{34}$$

то операторы $L_m\sigma$ образуют ту же алгебру Ли по отношению к операции коммутирования операторов:

$$(L_m\sigma)(L_n\sigma) - (L_n\sigma)(L_m\sigma) = L_m(L_n\sigma)\,\sigma = G^l_{mn}(L_l\sigma). \tag{35}$$

И здесь скобки поставлены только для удобства.

Наше важнейшее достижение в этом разделе состоит в получении трех однозначно связанных друг с другом объектов: наблюдаемой $A(p, q)$, классического генератора

$$A\sigma_0 = \left(\partial_q \frac{\partial A}{\partial p} - \partial_p \frac{\partial A}{\partial q}\right)\pi_0$$

и квантового генератора $A\sigma_\hbar$. При этом саму наблюдаемую можно считать одновременно и классической и квантовой. Отметим, что генераторы $A\sigma_0$, $A\sigma_\hbar$ совпадают лишь для наблюдаемых A, являющихся полиномами по p, q не выше второй степени. Наличие тройки A, $A\sigma_0$, $A\sigma_\hbar$ дает возможность четко и просто сформулировать вопрос о переходах между классической и квантовой механикой: при таких переходах наблюдаемые могут вообще не меняться, а генераторы будут переходить один в другой $A \leftrightarrow A$, $A\sigma_0 \leftrightarrow A\sigma_\hbar$.

6. ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЕ УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

Гейзенберговские уравнения движения описывают эволюцию наблюдаемых во времени, которая полностью определяется заданием наблюдаемой $H(p, q)$, т. е. функции Гамильтона. Этой наблюдаемой соответствуют два генератора смещения во времени — классический $H\sigma_0$ и квантовый $H\sigma_\hbar$. Тем самым для каждой наблюдаемой $A(p, q)$ имеются две эволюции во времени. Классическая эволюция описывается уравнением

$$\partial A_{\text{кл}}(p, q, t)/\partial t = A_{\text{кл}}(p, q, t)\, H(p, q)\, \sigma_0, \tag{36а}$$

а квантовая уравнением

$$\partial A_{\text{кв}}(p, q, t)/\partial t = A_{\text{кв}}(p, q, t)\, H(p, q)\, \sigma_\hbar. \tag{36б}$$

Эти уравнения являются гейзенберговскими, поскольку они описывают временну́ю эволюцию наблюдаемых. В начальный момент наблюдаемые можно выбрать совпадающими:

$$A_{\text{кл}}(p, q, 0) = A_{\text{кв}}(p, q, 0) = A(p, q). \tag{37}$$

Однако из-за различия σ_0 и $\sigma_\hbar$ в последующие моменты времени это соответствие между классическими и квантовыми наблюдаемыми нарушится (за исключением квадратичного гамильтониана — для свободной нерелятивистской частицы и для гармонического осциллятора классическая эволюция совпадает с квантовой).

Приведем простой пример. Для функции Гамильтона $H = p^2/2m + aq^4$ классическое и квантовое гейзенберговские уравнения движения имеют вид

$$\partial A_{\text{кл}}(p, q, t)/\partial t = (p/m)(\partial A_{\text{кл}}/\partial q) - 4aq^3\, \partial A_{\text{кл}}/dp;$$

$$\partial A_{\text{кв}}(p, q, t)/\partial t = (p/m)\, \partial A_{\text{кв}}/\partial q - 4aq^3 (\partial A_{\text{кв}}/\partial p) + \hbar^2 aq\, \partial^3 A_{\text{кв}}/\partial q^3.$$

Для классической эволюции во времени можно перейти от (36а) к классическим уравнениям Гамильтона для функций $P(t)$, $Q(t)$:

$$\left.\begin{aligned} dP(t)/dt &= -\partial H(P, Q)/\partial Q; \\ dQ(t)/dt &= \partial H(P, Q)/\partial P. \end{aligned}\right\} \tag{38}$$

Возможность этого перехода обусловлена тем, что, согласно (8), уравнение (36а) линейно и имеет первый порядок по t, p, q. Из теории таких уравнений известно, что каждое из них эквивалентно системе обыкновенных дифференциальных уравнений Гамильтона (38). Если $P(p, q, t)$; $Q(p, q, t)$ — решение системы (38) с начальными условиями $P(p, q, 0) = p$; $Q(p, q, 0) = q$, то решением уравнения (36а) с начальным условием (37) будет в полном соответствии (32):

$$\begin{aligned} A_{\text{кл}}(p, q, t) &= A_{\text{кл}}\{P(p, q, t),\ Q(p, q, t),\ 0\} = \\ &= A\{P(p, q, t),\ Q(p, q, t)\}. \end{aligned} \tag{39}$$

Подчеркнем, что решение квантового уравнения (36б) не обладает свойством (39). Это означает, что уравнение (36а) и система (38) эквивалентны в пределах классической механики, но неэквивалентны по отношению к учету квантовых свойств. К уравнению (36а) можно добавлять квантовые поправки, а к системе (38) — нет. Отмеченная несимметрия между квантовой и классической механикой обусловлена тем, что наблюдаемые у нас реализованы c-числовыми функциями, т. е. построены из образующих алгебры p и q с помощью классических умножений π_0. Эта несимметрия устраняется, если учесть, что наблюдаемые не только квантовой, но и классической механики можно реализовать на «квантовом» множестве линейных операторов [13].

7. ШРЕДИНГЕРОВСКИЕ УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

В гейзенберговской картине состояния ρ не меняются во времени, так что средние изменяются во времени за счет изменения наблюдаемых:

$$\langle A, \ \rho\rangle_t = \langle A(t), \ \rho\rangle. \tag{40}$$

В шредингеровской картине, напротив, состояния меняются со временем, а наблюдаемые постоянны:

$$\langle A, \ \rho\rangle_t = \langle A, \ \rho(t)\rangle. \tag{41}$$

Для перехода к шредингеровской картине используем математическое понятие оператора, сопряженного исходному в смысле теории топологических векторных пространств (это не комплексное и не эрмитово сопряжение!).

Оператор $\underset{\rightarrow}{\mathcal{U}}$, действующий вправо на состояния ρ, называется сопряженным оператору $\mathcal{U}$, действующему влево на наблюдаемые, если для всех A, ρ выполняется (1). Отсюда следует, что если представить операторы $\mathcal{U}$, $\underset{\rightarrow}{\mathcal{U}}$ их ядрами, то эти ядра совпадут:

$$\langle p, \ q \,|\, \mathcal{U} \,|\, p', \ q'\rangle = \langle p, \ q \,|\, \underset{\rightarrow}{\mathcal{U}} \,|\, p', \ q'\rangle. \tag{42}$$

Из (36а, б), (40) — (42) следует, что искомое шредингеровское уравнение движения имеет вид уравнения Лиувилля

$$\partial\rho/\partial t = \underset{\rightarrow}{H}\sigma\rho, \tag{43}$$

справедливого, разумеется, для классической механики при $\sigma = \sigma_0$ и для квантовой при $\sigma = \sigma_\hbar$.

В частности, для введенного выше гамильтониана

$$H = p^2/2m + aq^4;$$
$$\partial\rho_{\text{кл}}/\partial t = (-p/m)\,\partial\rho_{\text{кл}}/\partial q + 4aq^3\,\partial\rho_{\text{кл}}/\partial p;$$
$$\partial\rho_{\text{кв}}/\partial t = (-p/m)\,\partial\rho_{\text{кв}}/\partial q + 4aq^3\,\partial\rho_{\text{кв}}/\partial p - \hbar^2 aq\partial^3\rho_{\text{кв}}/\partial p^3.$$

Решение классического уравнения (43) по аналогии с (39) имеет вид

$$\rho_{\text{кл}}(p,\ q,\ t) = \rho_{\text{кл}}\{P\ (p,\ q,\ -t),\ Q\,(p,\ q,\ -t),\ 0\}. \tag{44}$$

Следует обратить внимание на различие знаков времени в (39), (44). С точки зрения физического смысла состояния можно считать одновременно классическими и квантовыми лишь в общей области теоретико-множественного пересечения $[\rho]_{\text{кл}} \cap [\rho]_{\text{кв}}$. Но математически оба уравнения (43) имеют смысл во всем пространстве $\{\rho\}$ не обязательно положительных и даже не обязательно действительных состояний.

Введем теперь понятие амплитуды $\Psi\,(p,\ q)$ состояния в гамильтоновой механике, определяемой соотношением [ср. с (27)]

$$\rho = \Psi\Psi^*\tilde{\pi}, \tag{45}$$

где $\tilde{\pi} = \tilde{\Pi}_\hbar$ из (28) для квантовой механики и $\tilde{\pi} = \pi_0$ — для классической. Непосредственно проверяется, что амплитуда удовлетворяет тому же уравнению, что и ρ:

$$\partial\Psi\,(p,\ q,\ t)/\partial t = \underset{\rightarrow}{H}\sigma\Psi\,(p,\ q,\ t). \tag{46}$$

Амплитуды физических состояний не обязаны быть ни положительными, ни действительными. Это дает возможность приближенного получения квантово-положительных состояний путем решения классического ($\sigma = \sigma_0$) уравнения (46) с переходом к $\rho\,(t)$ по формуле (27).

Отметим, наконец, что, представив функцию Гамильтона в виде

$$H = H_0 + H_I, \tag{47}$$

можно ввести представление взаимодействия, в котором

$$\partial A\,(t)/\partial t = A\,(t)\,H_0\sigma; \qquad \partial\rho/\partial t = (\underset{\longrightarrow}{H_I\,(t)})\,\rho\,(t). \tag{48}$$

Здесь зависимость $H_I\,(t)$ (и других наблюдаемых) от времени определяется первым из уравнений (48).

8. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Назовем состояние $\rho_{\text{стац}}$ стационарным, если оно не меняется со временем

$$\partial\rho_{\text{стац}}/\partial t = \underrightarrow{H\sigma}\rho_{\text{стац}} = 0. \tag{49}$$

Условие стационарности двояко зависит от операций умножения наблюдаемых. Во-первых, в (49) явно входит пуассоновское умножение σ. Во-вторых, обычное умножение π входит в определение множества $[\rho]$ положительных состояний. Поэтому множества $[\rho_{\text{стац}}]_{\text{кл}}$ и $[\rho_{\text{стац}}]_{\text{кв}}$ существенно различны. Классические стационарные состояния все представимы в форме

$$\rho_{\text{кл. стац}}(p, q) = \int dt\rho_{\text{кл}}\{P(p, q, -t), Q(p, q, -t), 0\} = \int dt\rho_{\text{кл}}(p, q, t), \tag{50}$$

где интеграл берется в бесконечных пределах при непериодическом движении и по периоду — при периодическом (это означает, что пределы интегрирования могут зависеть от p и q). Согласно (50), функция $\rho_{\text{кл. стац}}$ постоянна на каждой траектории в фазовом пространстве. Классическое стационарное состояние может быть чистым только в исключительном случае покоящейся частицы, когда функция $\rho(p, q) = \delta(p)\,\delta(q - q_0)$ является решением уравнения движения (43) при $\sigma = \sigma_0$. Наиболее близкими к чистым являются классические стационарные состояния вида

$$\rho_{\text{кл. стац}}(p, q) = \int dt\delta\{p_0 - P(p, q, -t)\}\,\delta\{q_0 - Q(p, q, -t)\}, \tag{51}$$

в которых функция ρ отлична от нуля только на одной фазовой траектории.

В квантовой механике, напротив, чистых стационарных состояний много. К ним принадлежат все такие функции ρ из (31), у которых $\psi(q)$ — собственная функция гамильтониана $\hat{H}$. В нашем формализме условия чистоты стационарного состояния имеют форму

$$\left.\begin{aligned} \underrightarrow{H\Pi_\hbar}\rho_{\text{кв. чист}} &= E\rho_{\text{кв. чист}}; \\ \underrightarrow{H\Pi_\hbar^T}\rho_{\text{кв. чист}} &= E\rho_{\text{кв. чист}}. \end{aligned}\right\} \tag{52}$$

Подчеркнем, что классические и квантовые стационарные состояния имеют существенное общее свойство — они ненормируемы при инфинитном движении. Например, ненормируемым классическим (и квантовым!) состоянием свободного движения будет

$$\rho(p, q) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\, \delta(p_0 - p)\, \delta\left\{q_0 - \left(q - \frac{p}{m} t\right)\right\} = \frac{m}{|p_0|} \delta(p_0 - p).$$

Различие между классической и квантовой механикой в этом пункте проявляется лишь в том, что только в квантовой теории ненормируемые состояния инфинитного движения могут быть чистыми.

9. РАЗЛИЧНЫЕ КВАНТОВАНИЯ

В предыдущих разделах была построена объединенная алгебра для классической и квантовой механики. В этой алгебре переходы $\pi_0 \leftrightarrow \Pi_\hbar$; $\sigma_0 \leftrightarrow \sigma_\hbar$ устанавливают взаимно однозначное соответствие между обеими механиками. Известно, однако, что переход от классической механики к квантовой (называемый квантованием) в высокой степени неоднозначен. В нашем формализме эта неоднозначность допускает простое и полное описание. Образно говоря, она состоит в том, что в линейном пространстве $\{A\}$ наблюдаемых и в линейном пространстве $\{\rho\}$ всех (не обязательно положительных) состояний можно совершать линейные преобразования, «поворачивающие» квантовую алгебру относительно классической. Именно, произведем в квантовой алгебре невырожденные линейные преобразования:

$$A_{\mathscr{V}} = A_{\text{кв}} \mathscr{V}(\hbar); \tag{53}$$

$$\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}} = \underrightarrow{\mathscr{V}^{-1}(\hbar)}\, \underrightarrow{\mathscr{W}_\hbar(\hbar)}\, \rho_{\text{кв}} \overset{\text{def}}{=} \underrightarrow{\mathscr{V}^{-1}(\hbar)}\, \rho_{\mathscr{V}}. \tag{54}$$

Очевидно, что преобразования (53), (54) прежде всего должны существовать в каком-либо смысле для всех наблюдаемых $A(p, q)$ из $\{A\}$ и для всех состояний ρ из $\{\rho\}$; необходимо также, чтобы эти преобразования имели обратные. Словами «в каком-либо смысле» подчеркивается следующее обстоятельство. Оператор [для определенности $\mathscr{V}(\hbar)$] переводит векторы A пространства $\{A\}$ в векторы $A_{\mathscr{V}}$ другого пространства $\{A_{\mathscr{V}}\}$. При этом, если пространство $\{A\}$ содержит бесконечно дифференцируемые функции, которые могут иметь на бесконечности рост не выше полиномиального, то пространство $\{A_{\mathscr{V}}\}$ может оказаться содержащим не только обычные, но и обобщенные функции. Более того, в практических расчетах возникают ситуации, когда появляются обобщенные функции, выходящие за рамки тех, с которыми физики привыкли иметь дело (см., например, [18, 19]). В [12] показано, что появление обобщенных функций любого известного класса не приводит к новым трудностям (так же как использование преобразований

$\mathcal{V}^{\cdot}(\hbar)$, «улучшающих» свойства функций $A(p, q)$, не приводит к реальным упрощениям). Эти трудности с пространствами обобщенных функций будут продемонстрированы в разд. 11 при изложении виковского и антивиковского квантований. Преобразования $\mathcal{V}(\hbar)$ действуют на все объекты квантовой алгебры, т. е. на $\Pi_\hbar$, $\sigma_\hbar$, $J_{\text{кв}}$, а также на вид выражений для средних и на уравнения движения. Соответствующие преобразования к $\Pi_{\mathcal{V}}$, $\sigma_{\mathcal{V}}$, $J_{\mathcal{V}}$ таковы:

$$\left.\begin{aligned} \Pi\hbar &= \mathcal{V}(1)\,\mathcal{V}(2)\,\Pi_{\mathcal{V}}\mathcal{V}^{-1}; \\ \sigma_\hbar &= \mathcal{V}(1)\,\mathcal{V}^{\cdot}(2)\,\sigma_{\mathcal{V}}\mathcal{V}^{-1}; \end{aligned}\right\} \tag{55}$$

$$J_{\text{кв}} = \mathcal{V} J_{\mathcal{V}} \mathcal{V}^{-1} = \mathcal{V}(\mathcal{V}^*)^{-1} J_{\mathcal{V}}. \tag{56}$$

Билинейная форма для средних принимает вид

$$\langle A_{\text{кв}}, \rho_{\text{кв}}\rangle = \langle A_{\mathcal{V}}\mathcal{V}^{-1}, \underrightarrow{\mathcal{V}\mathcal{W}}\rho_{\mathcal{V}\mathcal{W}}\rangle = \langle A_{\mathcal{V}}\mathcal{W}, \rho_{\mathcal{V}\mathcal{W}}\rangle. \tag{57}$$

Преобразованные уравнения движения имеют форму в гейзенберговской картине:

$$\partial A_{\mathcal{V}}(t)/\partial t = AH_{\mathcal{V}}\sigma_{\mathcal{V}}, \tag{58}$$

и в шредингеровской картине:

$$\underrightarrow{\mathcal{W}}\,\partial\rho_{\mathcal{V}\mathcal{W}}/\partial t = \underrightarrow{H_{\mathcal{V}}}\sigma_{\mathcal{V}}\underrightarrow{\mathcal{W}}\rho_{\mathcal{V}\mathcal{W}}, \tag{59}$$

или же

$$\partial\rho_{\mathcal{V}}/\partial t = \underrightarrow{H_{\mathcal{V}}\sigma_{\mathcal{V}}}\rho_{\mathcal{V}}. \tag{59a}$$

Множество допустимых преобразований $\mathcal{V}(\hbar)$, $\mathcal{W}(\hbar)$ очень обширно. В него входят, в частности, преобразования (6) к операторному умножению наблюдаемых и к фон-неймановской матрице плотности. Для того чтобы выделить из этого множества класс преобразований $\mathcal{V}^{\cdot}(\hbar)$, $\mathcal{W}(\hbar)$, приводящих к различным допустимым квантованиям, на эти преобразования необходимо наложить определенные условия [12], имеющие такое происхождение. Мы хотим сохранить в силе наше главное утверждение о том, что все различия между классической и квантовой механикой обусловлены различием в операциях умножения наблюдаемых. На этом основании потребуем, чтобы при переходе от классической механики к квантовой наблюдаемые и состояния (быть может, не все) не меняясь становились бы из классических квантовыми. А это означает, что преобразованные наблюдаемые $A_{\mathcal{V}}$ уже не произвольны, а являются функциями $A(p, q)$ координат и импульсов, причем множество (векторное пространство) $\{A_{\mathcal{V}}\}$ этих функций имеет непустое пересечение $\{A_{\mathscr{V}}\} \cap \{A\}$ с множеством классических наблюдаемых. Аналогичным условиям должно удовлетворять множество $[\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}}]$ физических (т. е. положительных) квантовых состояний. Для того чтобы новая квантовая алгебра являлась квантованием классической, необходимо еще выполнение следующих условий: а) единица, а также наблюдаемые p, q не меняются под действием преобразований $\mathscr{V}$, $\mathscr{W}$:

$$1\mathscr{V} = 1\mathscr{W} = 1;\ p\mathscr{V} = p\mathscr{W} = p;\ q\mathscr{V} = q\mathscr{W} = q; \tag{60}$$

б) генераторы $p\sigma$, $q\sigma$ не меняются под действием преобразований $\mathscr{V}$, $\mathscr{W}$, например:

$$p\sigma_{\mathscr{V}} = p\sigma_{\hbar} = \partial_q; \tag{61}$$

в) преобразования $\mathscr{V}(\hbar)$, $\mathscr{W}(\hbar)$ зависят от $\hbar$ и бесконечно дифференцируемы по $\hbar$ при $\hbar \to +0$. При этом существуют пределы

$$\lim_{\hbar\to 0} \mathscr{V}(\hbar) = \lim_{\hbar\to 0} \mathscr{W}(\hbar) = 1; \tag{62}$$

г) теоретико-множественные пересечения $\{A\} \cap \{A_{\mathscr{V}}\}$, $[\rho]_{\text{кл}} \cap \cap [\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}}]$ содержат достаточно много элементов. Смысл термина «достаточно много» может быть различным в разных задачах.

Поясним смысл требований а) и б). Условием а) требуется, чтобы наблюдаемые p и q имели смысл координаты и импульса в каждой объединенной алгебре. Условием б) наблюдаемой p сопоставляется генератор сдвига координаты, а наблюдаемой — q — генератор сдвига импульса.

Из (60), (61) следует, что операторы $\mathscr{V}(\hbar)$, $\mathscr{W}(\hbar)$ должны иметь вид

$$\mathscr{V} = \mathscr{V}(\partial_p, \partial_q, \hbar);\ \mathscr{W} = \mathscr{W}(\partial_p, \partial_q, \hbar). \tag{63}$$

Зависимость от операций дифференцирования понимается в смысле фурье-преобразований: фурье-образы

$$\tilde{A}(x, k) = \frac{1}{2\pi} \int dp\, dq \exp(-\mathrm{i}px + \mathrm{i}qk)\, A(p, q) \tag{64}$$

связаны преобразованием

$$\tilde{A}_{\mathscr{V}}(x, k) = \tilde{A}(x, k)\, \mathscr{V}(\mathrm{i}x, -\mathrm{i}k, \hbar), \tag{65}$$

где $\mathscr{V}(-\mathrm{i}x, \mathrm{i}k, \hbar)$ — обычная функция c-числовых переменных $\mathrm{i}x$; $-\mathrm{i}k$; $\hbar$. Смысл $\mathscr{W}(\partial_p, \partial_q, \hbar)$ аналогичен.

Теперь мы можем конкретизировать условие в): функции $\mathscr{V}(\mathrm{i}x, -\mathrm{i}k, \hbar)$; $\mathscr{W}(\mathrm{i}x, -\mathrm{i}k, \hbar)$ существуют и бесконечно дифференцируемы для всех действительных x, k и для всех $\hbar$ в интервале от нуля до любого конечного значения планковской постоянной. Кроме того, для обратимости преобразований $\mathscr{V}$, $\mathscr{W}$ необходимо, чтобы функции $\mathscr{V}$, $\mathscr{W}$ нигде не обращались в нуль. Существование пределов (62) теперь приобретает ясный математический смысл:

$$\lim_{\hbar\to 0}\mathscr{V}(\mathrm{i}x,\ -\mathrm{i}k,\ \hbar)=\lim_{\hbar\to 0}\mathscr{W}(\mathrm{i}x,\ -\mathrm{i}k,\ \hbar)=1. \qquad (62\text{a})$$

Условия (60) также принимают ясную форму:

$$\mathscr{V}(0,\ 0\ \hbar)=\mathscr{W}(0,\ 0,\ \hbar)=1; \qquad (66)$$

$$\partial\mathscr{V}(0,\ 0,\ \hbar)/\partial x=\partial\mathscr{V}(0,\ 0,\ \hbar)/\partial k=\partial\mathscr{W}(0,\ 0,\ \hbar)/\partial x=$$
$$=\partial\mathscr{W}(0,\ 0,\ \hbar)/\partial k=0. \qquad (67)$$

Подчеркнем, что свойства роста (или спадания) функций $\mathscr{V}$, $\mathscr{W}$ и их производных по переменным $\mathrm{i}x$, $-\mathrm{i}k$ пока ничем не ограничены. Лишь финитные функции запрещены требованием необращения в нуль.

Для существования непустых пересечений $\{A\}\cap\{A_{\mathscr{V}\mathscr{P}}\}$ и $[\rho]_{\text{кл}}\cap$ $\cap\,[\rho_{\mathscr{V}\mathscr{P}\mathscr{W}}]$ необходима действительность функций $\mathscr{V}(\partial_p,\ \partial_q,\ \hbar)$, $\mathscr{W}(\partial_p,\ \partial_q,\ \hbar)$: $\mathscr{V}=\mathscr{V}^*$, $\mathscr{W}=\mathscr{W}^*$, откуда, согласно (56),

$$J_{\mathscr{V}\mathscr{P}}=J. \qquad (68)$$

Явные выражения для преобразованных операций умножений $\Pi_{\mathscr{V}\mathscr{P}}$, $\sigma_{\mathscr{V}\mathscr{P}}$ можно получить, воспользовавшись правилом дифференцирования произведения [11]:

$$\pi_\hbar\partial_p=(\partial_{1p}+\partial_{2p})\,\pi_\hbar;\quad \sigma_\hbar\partial_p=(\partial_{1p}+\partial_{2p})\,\sigma_\hbar,$$

и аналогично для $\Pi_\hbar\partial_q$; $\sigma_\hbar\partial_q$. С учетом этого правила, а также (15), (16) получим

$$\Pi_{\mathscr{V}\mathscr{P}}=U(1,\ 2)\exp\,[(\mathrm{i}\hbar/2)\,D_{12}]\,\pi_0;\ \sigma_{\mathscr{V}\mathscr{P}}=U(1,\ 2)\,(2/\hbar)\sin\,[(\hbar/2)\,D_{12}]\,\pi_0, \qquad (69)$$

где

$$\left.\begin{array}{l} U(1,\ 2)=\mathscr{V}^{-1}(1)\,\mathscr{V}^{-1}(2)\,\mathscr{V}(1+2);\ \mathscr{V}(1)=\mathscr{V}(\partial_{1p},\ \partial_{1q},\ \hbar);\\ \mathscr{V}(1+2)=\mathscr{V}(\partial_{1p}+\partial_{2p},\ \partial_{1q}+\partial_{2q},\ \hbar). \end{array}\right\} \qquad (70)$$

Построение различных объединенных алгебр закончено. Резюмируем полученные результаты.

Каждой паре преобразований $\mathscr{V}$, $\mathscr{W}$, удовлетворяющих условиям а) — г), соответствует объединенная квантово-классическая алгебра, которую обозначим $\mathscr{B}(\mathscr{V},\ \mathscr{W})$. В эту алгебру входят: два пространства наблюдаемых $\{A\}$ и $\{A_{\mathscr{V}\mathscr{P}}\}$; операции классических умножений π_0, σ_0, определенные для любой пары функций $A(p,\ q)$ из $\{A\}$; операции квантовых умножений $\Pi_{\mathscr{V}\mathscr{P}}$, $\sigma_{\mathscr{V}\mathscr{P}}$, определенные для любой пары квантовых наблюдаемых из $\{A_{\mathscr{V}\mathscr{P}}\}$; операция инволюции J, действующая на все наблюдаемые как из $\{A\}$, так и из $\{A_{\mathscr{V}}\}$. Кроме того, в алгебре $\mathscr{B}(\mathscr{V}, \mathscr{W})$ определены дуальные соответственно к $\{A\}$ и $\{A_{\mathscr{V}}\}$ пространства состояний $\{\rho\}$ и $\{\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}}\}$. По определению дуальности эти пространства таковы, что классические средние $\langle A, \rho\rangle$ определены для всех наблюдаемых из $\{A\}$ и для всех состояний из $\{\rho\}$, а квантовые средние $\langle A, \overrightarrow{\mathscr{W}}\rho\rangle$ определены для всех наблюдаемых из $\{A_{\mathscr{V}}\}$ и для всех состояний из $\{\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}}\}$. Условиями положительности (24), (25) из $\{\rho\}$ выделяется множество $[\rho]_{\text{кл}}$ положительных классических состояний, а из $\{\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}}\}$ — множество $[\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}}]$ положительных квантовых состояний. Связь между классической и квантовой алгеброй состоит в наличии нетривиальных, достаточно богатых элементами множеств $\{A\} \cap \{A_{\mathscr{V}}\}$, $[\rho]_{\text{кл}} \cap [\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}}]$, внутри которых квантовые наблюдаемые и состояния совпадают с классическими наблюдаемыми и состояниями.

Каждой объединенной алгебре $\mathscr{B}(\mathscr{V}, \mathscr{W})$ соответствует квантование классической системы. Это квантование состоит в следующем.

1. В момент $t = 0$ классические наблюдаемые $A(p, q)$ из множества $\{A\} \cap \{A_{\mathscr{V}}\}$ без изменения становятся квантовыми наблюдаемыми $A_{\mathscr{V}}(p, q)$. Классические состояния $\rho(p, q)$ из множества $[\rho]_{\text{кл}} \cap [\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}}]$ без изменения становятся квантовыми состояниями $\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}}$. Классические средние $\langle A, \rho\rangle$ заменяются квантовыми средними $\langle A_{\mathscr{V}}, \overrightarrow{\mathscr{W}}\rho_{\mathscr{V}\mathscr{W}}\rangle$ для A, ρ из тех же областей.

2. Классическая функция Гамильтона $H(p, q)$ должна принадлежать $\{A\} \cap \{A_{\mathscr{V}}\}$ и тем самым становится, не меняясь, квантовой функцией Гамильтона $H_{\mathscr{V}}(p, q)$. Но классический генератор сдвига во времени $H\sigma_0$ изменяется вследствие того, что классические операции умножений заменяются на квантовые:

$$\pi_0 \to \Pi_{\mathscr{V}};\ \sigma_0 \to \sigma_{\mathscr{V}};\ H\sigma_0 \to H\sigma_{\mathscr{V}}. \tag{71}$$

Классическое уравнение движения (36а) в гейзенберговской картине перейдет в квантовое уравнение (58), а альтернативное классическое уравнение Лиувилля (43) в шредингеровской картине

$$\partial\rho(p, q, \hbar)/\partial t = \overrightarrow{H\sigma_0}\rho$$

перейдет в квантовое уравнение (59). Напомним, что функция $A_{\text{кл}}(p, q, t)$ связана соотношением (39) с функциями $P(p, q, t)$, $Q(p, q, t)$, подчиняющимися классическим уравнениям Гамильтона.

Из-за различия в уравнениях движения квантовые наблюдаемые и состояния при $t \neq 0$ уже не совпадают с классическими.

Зависимость квантования от $\mathscr{V}$ отражает известный факт возможности различной расстановки некоммутирующих операторов. Зависимость квантования от $\mathscr{W}$ была введена в [12]. Этой зависимостью отражается тот факт, что при фиксированном способе расстановки некоммутирующих сомножителей можно еще различными способами сопоставлять классическим состояниям квантовые.

10. ВИКОВСКОЕ И АНТИВИКОВСКОЕ КВАНТОВАНИЕ

Для иллюстрации рассмотрим важный частный класс алгебр $\mathscr{B}(\mathscr{V}, \mathscr{W})$, для которых

$$\mathscr{V} = \exp\{(q_0^2\partial_q^2 + p_0^2\partial_p^2)/2\}; \quad \mathscr{W} = 1, \tag{72}$$

где q_0, p_0 — положительные числа. Подставив (72) в (70), получим

$$U(1,2) = \exp(q_0^2\partial_{1q}\partial_{2q} + p_0^2\partial_{1p}\partial_{2p}). \tag{73}$$

Пользуясь (69) и (73), для операции $\Pi_{\mathscr{V}\mathscr{W}}$ ассоциативного умножения наблюдаемых получим

$$\Pi_{\mathscr{V}\mathscr{W}} = \exp(q_0^2\partial_{1q}\partial_{2q} + p_0^2\partial_{1p}\partial_{2p} + i\hbar D_{12}/2)\,\pi_0. \tag{74}$$

Для того чтобы существовали пределы (62), в постоянных q_0^2, p_0^2 необходимо выделить множитель $\hbar$. Положим поэтому

$$q_0 p_0 = \hbar b/2; \quad q_0 = a p_0, \tag{75}$$

где a, b — новые положительные постоянные.

Если ввести линейные комбинации

$$\sqrt{\hbar}\,\partial = q_0\partial_q - i p_0\partial_p; \quad \sqrt{\hbar}\,\partial^+ = q_0\partial_q + i p_0\partial_p,$$

то будет

$$\hbar\partial_1\partial_2^+ = q_0^2\partial_{1q}\partial_{2q} + p_0^2\partial_{1p}\partial_{2p} + i\hbar b D_{12}/2. \tag{76}$$

Из сравнения (74), (76) видно, что при $b = 1$ операция $\Pi_{\mathscr{V}\mathscr{W}}$ приобретает особенно простую форму, которую обозначим Π_a:

$$\Pi_a = \exp(\hbar\partial_1\partial_2^+)\,\pi_0. \tag{77}$$

Соответствующую объединенную алгебру назовем $\mathscr{B}_a$. Квантование, порождаемое алгеброй $\mathscr{B}_a$, идентично виковскому квантованию (см., например, [20]). Сама алгебра тесно связана с когерентными состояниями. Именно наши наблюдаемые A_a совпадают с диагональными элементами операторов $A_a = \langle\alpha \mid \hat{A} \mid \alpha\rangle$ для когерентных состояний; состояния ρ_a совпадают с весовыми функциями $\rho_a = \mathscr{P}(\alpha)$ (см., например, [18, 19]); операции $A_a\Pi_a$ соответствует совокупность матричных элементов $\langle\alpha \mid \hat{A} \mid \beta\rangle$ между когерентными состояниями α, β. Уже давно было обнаружено (см., например, [18]), что полная совокупность матричных элементов $\langle\alpha \mid \hat{A} \mid \beta\rangle$ однозначно определяется совокупностью диагональных элементов $\langle\alpha \mid \hat{A} \mid \alpha\rangle$. В развиваемом формализме это свойство очевидно: операция $A_a \Pi_a$ однозначно определяется элементом A_a.

Представляет интерес проследить за свойствами пространств $\{A_a\}$, $\{\rho_a\}$ и множества $[\rho_a]$ положительных состояний. В алгебрах $\mathscr{B}_a$ функция $V(\mathrm{i}x, -\mathrm{i}k, \hbar) = \exp\{-(\hbar/4)(q_0^2k^2 + p_0^2x^2)\}$ на бесконечности по $|x|$ и $|k|$ имеет гауссоидное спадание определенного вида. Поэтому все фурье-образы

$$\widetilde{A}_a(x, k) = A(x, k)\mathscr{V}(\mathrm{i}x, -\mathrm{i}k, \hbar) \tag{78}$$

спадают быстрее той же гауссоиды, помноженной на любой полином по $|x|^{-1}$, $|k|^{-1}$, так как фурье-образ бесконечно дифференцируемой функции является быстро (быстрее любого полинома) убывающей функцией. Заметим, что поскольку функции $A(p, q)$ на бесконечности могут расти (но не быстрее, чем полиномиально), то фурье-образы $A(x, k)$ могут быть обобщенными в конечных точках, в частности содержать δ-функции и их производные. Например, фурье-образом кинетической энергии будет — $(1/2m)\,\partial^2\delta(x)/\partial x^2$. Поэтому возникает вопрос о законности соотношения (65), ибо не всякую функцию можно умножать на обобщенную. Здесь-то и оказывается нужным свойство бесконечной дифференцируемости функции $\mathscr{V}$: бесконечно дифференцируемую функцию на обобщенную умножать можно.

В пространстве $\{\widetilde{A}\}$ функций $\widetilde{A}(x, k)$ допустимы сколь угодно быстро спадающие функции. Поэтому функции $\widetilde{A}_a$ образуют подпространство $\{\widetilde{A}_a\} \subset \{\widetilde{A}\}$. Соответственно и для пространств фурье-прообразов

$$\{A_a\} \subset \{A\}. \tag{79}$$

В пространство $\{A_a\}$ входят только целые функции, да и то далеко не все. Это означает, что в виковском квантовании, в отличие от вейлевского, не всякая классическая наблюдаемая может быть проквантована. Например, функция $H_I(q) = \exp(-q^2/Q_0^2)$ не входит в $\{A_a\}$ при $Q_0^2 < q_0^2$.

Выражение для среднего при переходе к виковскому квантованию, согласно (57), не меняется:

$$\langle A, \rho\rangle = \langle A_a, \rho_a\rangle.$$

Поэтому «улучшение» функции A компенсируется «ухудшением» функций ρ. Действительно, фурье-образы $\widetilde{\rho}(x, k)$ подвергаются преобразованию:

$$\widetilde{\rho}_a(x, k) = \mathscr{V}^{-1}(\mathrm{i}x, -\mathrm{i}k, \hbar)\,\widetilde{\rho}(x, k). \tag{80}$$

Из (80) видно, что если в $\{\tilde{\rho}\}$ входили только функции, растущие на бесконечности не быстрее полинома, то в пространство $\{\tilde{\rho}_a\}$ преобразованных фурье-образов уже входят функции гауссоидного (но не всякого гауссоидного) роста. Таким образом, для пространств $\{\rho\}$, $\{\rho_a\}$ имеет место обратное (79) включение:

$$\{\tilde{\rho}\} \subset \{\tilde{\rho}_a\}; \ \{\rho\} \subset \{\rho_a\}. \tag{81}$$

Более того, оказывается, что это включение справедливо и для множеств физических (т. е. положительных) состояний:

$$[\rho]_{\text{кл}} \subset [\rho_a]. \tag{82}$$

Это означает, что в виковском квантовании (опять же в отличие от вейлевского) любое классическое состояние может быть проквантовано, в том числе чистое классическое состояние $\delta(p - p_0) \times \delta(q - q_0)$, соответствующее движению по определенной траектории. Последний факт имеет простое физическое объяснение: в виковском квантовании классическим координате и импульсу сопоставляется в фазовом пространстве центр гауссоидного пакета, размеры которого совместимы с соотношениями неопределенностей.

Для состояний $\rho_a(p, q)$ допустимы не только δ-функции, но и бесконечные ряды по δ-функциям и их производным возрастающих порядков. Суммирование таких рядов может приводить к нестандартным обобщенным функциям, имеющим ненулевые значения во всем пространстве. Это свойство может оказаться необычным. Оно беспокоило физиков, впервые с ним столкнувшихся (см., например, [18, 19, 21]). Действительно, для привычных физикам обобщенных функций (из пространств S' или D') допустимы только полиномы по δ-функциям и их производным. В нашем случае, однако, появление рядов вполне естественно, поскольку дуальное пространство $\{A_0\}$ содержит только целые функции, каждая из которых в любой точке разложима в степенной ряд и полностью определяется этим рядом. Поэтому

$$\langle A_a, \rho_a\rangle = \sum_{m=0,\, n=0}^{\infty} \frac{1}{m!n!} A_{mn} \int p^m q^n \rho_a(p, q)\, dp\, dq.$$

Коэффициенты

$$\rho_{mn} = \int p^m q^n \rho(p, q)\, dp\, dq$$

определяют ряд

$$\rho_a(p, q) \sim \sum_{m,\, n} (-1)^{m+n} \rho_{mn} \left(\frac{\partial}{\partial p}\right)^m \delta(p) \left(\frac{\partial}{\partial q}\right)^n \delta(q).$$

Знаком тильда (вместо знака равенства) подчеркивается, что, хотя коэффициенты ρ_{mn} определены для любых $\rho_a(p, q)$ из $\{\rho_a\}$, ряд не для всех ρ_a сходится к исходной функции и даже необязательно сходится вообще.

Мы видим, что изменение квантования существенно меняет множества наблюдаемых и состояний, для которых квантование возможно. Эти изменения различны для различных объединенных алгебр $\mathscr{B}(\mathscr{V}, \mathscr{W})$. Например, для антивиковского квантования, для которого

$$\mathscr{V}(\mathrm{i}x, -\mathrm{i}k, \hbar) = \exp\{(\hbar/4)(q_0^2k^2 + p_0^2x^2)\}$$

с тем же ограничением $q_0p_0 = \hbar/2$, включения (79), (81), (82) заменяются на противоположные:

$$\{A\} \subset \{A_{\bar{a}}\};\ \{\rho_{\bar{a}}\} \subset \{\rho\};\ [\rho_{\bar{a}}] \subset [\rho].$$

Здесь индекс $\bar{a}$ относится к антивиковскому квантованию. В этом квантовании [19] физические квантовые матрицы плотности являются положительно определенными целыми функциями, а наблюдаемые могут быть даже рядами по δ-функциям.

11. РАЗЛИЧНЫЕ КЛАССИЧЕСКИЕ ПРЕДЕЛЫ

Нередко утверждается или подразумевается, что переход от квантовой механики к классической однозначно определяется пределом $\hbar \to 0$. В действительности конкретизация такого перехода в высшей степени неоднозначна, что отмечено, в частности, в [22, 23]. Эта неоднозначность порождает дискуссии. Например, Кобе [24] объявил неправильным предельный переход, проведенный Коном [25], на том основании, что последний устремляет к нулю некое выражение $\hbar/\Delta p$, которое можно заменить на ширину Δx координатного пакета и к нулю не стремить. Такого рода аргументы нельзя ни доказать, ни опровергнуть. Опытная проверка невозможна из-за отсутствия прибора, «включающего» и «выключающего» квантовые эффекты. А в любом теоретическом выражении величину $\hbar$ можно вводить и исключать различными переопределениями входящих в формулу величин. Отсюда прямо следует с виду парадоксальный вывод о том, что для перехода к классической теории вовсе не обязательно устремлять $\hbar$ к нулю всюду, где эта величина встречается. Это обстоятельство учтено Фаддеевым [23], подразделившим постоянную Планка на «внешнюю» и «внутреннюю» и производившим квазиклассическое разложение только по внешней $\hbar$. Этот вывод вытекает и из физических соображений. Например, известно, что атомы благородных газов во многих ситуациях можно трактовать как классические частицы. Но в этом классическом приближении ненулевая постоянная $\hbar$

нужна для стабильности самих атомов. Поэтому $\hbar$ войдет в выражение для классического потенциала взаимодействия между атомами.

Нередко оказывается, что прямолинейный переход $\hbar \to 0$ вообще бессмыслен. Простейший пример — уравнение Шредингера в координатном представлении.

Целью настоящего раздела являются последовательные и в определенном смысле полные ответы на вопросы о том, где именно необходимо устремлять $\hbar \to 0$ при переходе к классической теории и где — нет, в каких случаях переход возможен, какова степень неоднозначности перехода.

Поскольку прямолинейный рецепт перехода $\hbar \to 0$ оказывается не имеет четкого смысла, то начнем с определения: переход к классической теории состоит в том, что количественный результат, рассчитанный по квантовой теории, заменяется на результат, рассчитанный по классической теории. При этом не исключается, что какие-то классические величины (например, функция Гамильтона) будут зависеть от $\hbar$. Иначе говоря, при переходе квантовая теория должна перейти в классическую. Поэтому предельный переход надо рассматривать для теории в целом, а не для отдельных величин, как это обычно делается.

Объединенная алгебра как раз максимально приспособлена для таких «глобальных» предельных переходов, поскольку в ней все объекты, как говорят, выдерживают переход от одной теории к другой. В других формулировках нетривиален (как было подчеркнуто в [26]) вопрос об объекте перехода. В объединенной алгебре ответ на этот вопрос очевиден: при переходе от квантовой теории к классической квантовая алгебра должна стать классической. Поэтому квантовые операции умножений $\Pi_\hbar$, $\sigma_\hbar$ с необходимостью должны перейти в классические:

$$\Pi_\hbar \to \pi_0, \quad \sigma_\hbar \to \sigma_0. \tag{83}$$

Неоднозначность проявляется в том, что квантовые наблюдаемые и состояния тоже можно задать как некоторые функции от $\hbar$:

$$A_{\text{кв}} = A(p, q, \hbar); \quad \rho_{\text{кв}} = \rho(p, q, \hbar), \tag{84}$$

имеющие определенные пределы при $\hbar \to 0$. Получение всех возможных переходов к классической теории теперь можно сформулировать как установление ограничений на всевозможные зависимости от $\hbar$ в (84) и конструктивное описание остающегося произвола.

Для сохранения линейных свойств векторных пространств $\{A\}$ и $\{\rho\}$ предельные переходы в (83) должны быть линейными. Тогда зависимость A и ρ от $\hbar$ представима в форме соответственно (53) и (54). А это в свою очередь означает, что от (допустимой) зависимости A и ρ от $\hbar$ всегда можно избавиться переходом к некоторой квантовой алгебре $\mathcal{B}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$. В этой алгебре переход к классической теории уже сведется к преобразованиям

$$\Pi_{\mathcal{V}} \to \pi_0, \quad \sigma_{\mathcal{V}} \to \sigma_0. \tag{85}$$

Мы получили на первый взгляд неожиданный, но, если вдуматься, очевидный результат: каждому допустимому способу квантования взаимно однозначно соответствует допустимый способ перехода к классической теории.

Правила перехода к классической теории теперь можно сформулировать так. Сначала фиксируется алгебра $\mathcal{B}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$, так что все наблюдаемые (в том числе гамильтониан!) реализуются функциями $A_{\mathcal{V}}(p, q)$, разными для разных алгебр и, вообще говоря, зависящими от $\hbar$. Далее:

а) в момент $t = 0$ квантовые наблюдаемые и состояния из общих с классикой областей соответственно $A_{\mathcal{V}} \in \{A_{\mathcal{V}}\} \cap \{A\}$ и $\rho_{\mathcal{V}\mathcal{W}} \in \in [\rho_{\mathcal{V}\mathcal{W}}] \cap [\rho]_{\text{кл}}$ без изменения (даже если они зависят от $\hbar$!) становятся классическими наблюдаемыми и состояниями:

$$A_{\mathcal{V}}(p, q) \to A(p, q) = A_{\mathcal{V}}; \quad \rho_{\mathcal{V}\mathcal{W}}(p, q) \to \rho(p, q) = \rho_{\mathcal{V}\mathcal{W}}; \tag{86}$$

б) величины $\Pi_{\mathcal{V}}$, $\sigma_{\mathcal{V}}$, $\mathcal{W}(\hbar)$ заменяются классическими пределами:

$$\Pi_{\mathcal{V}} \to \pi_0, \quad \sigma_{\mathcal{V}} \to \sigma_0, \quad \mathcal{W}(\hbar) \to \mathcal{W}(0) = 1; \tag{87}$$

в) квантовая функция Гамильтона $H_{\mathcal{V}}(p, q)$ должна принадлежать $\{A_{\mathcal{V}}\} \cap \{A\}$; тем самым, не меняясь, она становится классической функцией Гамильтона:

$$H_{\mathcal{V}} = H. \tag{88}$$

Но квантовый генератор сдвига во времени в соответствии с (87) изменяется:

$$H_{\mathcal{V}}\sigma_{\mathcal{V}} \to H_{\mathcal{V}}\sigma_0. \tag{89}$$

Поэтому квантовое уравнение движения [гейзенберговское (58) или же шредингеровское (59)] перейдет в соответствующее классическое уравнение. К классическим уравнениям движения можно добавлять квантовые поправки, получающиеся при разложении $\sigma_{\mathcal{V}}$ в ряд по степеням $\hbar$. Уравнения с поправками уже не будут сводиться к классическим уравнениям Гамильтона. Последнее обстоятельство не всегда учитывается. Так, в [14] уравнения типа (58) ошибочно пишутся с полными (не частными) производными по времени.

Допустимые переходы от квантовой механики к классической, соответствующие различным алгебрам $\mathcal{B}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$, в существенно классических областях будут давать близкие результаты. Однако в существенно квантовых областях результаты могут сильно различаться. Этим можно воспользоваться для получения практически удобных классических и полуклассических приближений к квантовым задачам.

В заключение этого раздела подчеркнем две главные черты развиваемого подхода.

Во-первых, объектами, меняющимися при переходе от квантовой механики к классической (или обратно), оказались операции умножения наблюдаемых (а не состояния и не наблюдаемые!).

Во-вторых, рассмотрение ведется не только для чистых, но и для смешанных состояний. Существенность этого обстоятельства проявляется в том, что для наиболее естественного вейлевского квантования все классические и многие квантовые состояния оказываются вне общей области $[\rho]_{\text{кл}} \cap [\rho]_{\text{кв}}$, в то время как среди смешанных состояний — «много» лежащих внутри этой области. Именно поэтому переход к классической механике особенно гладок для когерентных состояний (см., например, [18, 19]), соответствующих виковскому квантованию (см. разд. 10), для которого справедливо включение (82).

В качестве примера найдем приближенно путем подходящего перехода к классической механике энергию низшего состояния для гамильтониана

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + H_I(\mathbf{q}) \tag{90}$$

квантовой частицы в центральном поле притяжения ($\partial H_I/\partial\,|\mathbf{q}| \geqslant \geqslant 0$). Трехмерное обобщение развитой техники очевидно ($D_{12} = = \partial_{1\mathbf{q}}\partial_{2\mathbf{p}} - \partial_{1\mathbf{p}}\partial_{2\mathbf{q}}$ и т. п.). Низшее состоянее в классической теории тривиально: частица лежит на дне потенциальной ямы, так что

$$\rho = \delta^3(\mathbf{p})\,\delta^3(\mathbf{q}); \;\; E_0 = H_I(0). \tag{91}$$

Чтобы воспользоваться этим классическим свойством для решения квантовой задачи, надо выбрать алгебру $\mathscr{B}$ ($\mathscr{V}$, $\mathscr{W}$) так, чтобы это решение входило в $[\rho_{\mathscr{V}\mathscr{B}}]$. Согласно (81), это условие выполняется для виковского квантования, т. е. для алгебр $\mathscr{B}_a$, определяемых соотношением (77). В алгебре $\mathscr{B}_a$ гамильтониан (90), согласно (78), принимает вид

$$H_a = \frac{\mathbf{p}_2}{2m} + \frac{3\hbar}{4am} + \frac{1}{(\pi a\hbar)^{3/2}} \int d^3\mathbf{q}' H_I(|\mathbf{q}-\mathbf{q}'|) \exp\left(-\frac{\mathbf{q}'^2}{a\hbar}\right). \tag{92}$$

Этот гамильтониан имеет две поправки квантовых масштабов — постоянную добавку к кинетической энергии и размазывание потенциала. С гамильтонианом (92) классическое решение (91) фактически уже учитывает соотношение неопределенностей, т. е. имеет квантовый смысл. Оно дает основной уровень

$$E_0 = -H_a(0, 0). \tag{93}$$

Даже для кулоновского потенциала $H_I = -e^2/|\mathbf{q}|$, для которого классические решения в вейлевской алгебре $\mathscr{B}$ (1) отсутствуют, (93) дает (после минимизации по a) значение основного уровня атома водорода

$$E_0 = (-4/3\pi)\, e^4 m/\hbar^2, \tag{94}$$

совпадающее с точным в пределах 15%. Следует обратить внимание на то, что постоянная $\hbar$ нетривиально входит в решение (94), полученное предельным переходом к классической механике.

12. ОБОБЩЕНИЕ НА МНОГО СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ

Проведенное рассмотрение естественно обобщается на случай любого конечного числа канонических степеней свободы. Обобщение сводится к замене (69) на

$$\Pi_{\mathscr{V}} = U(1, 2) \exp\{(i\hbar/2)(D_{12}^{(1)} + \ldots + D_{12}^{(n)})\}. \tag{95}$$

Мультипликативная структура $\Pi_{\mathscr{V}}$ дает возможность последовательной трактовки полуквантовых приближений, в которых одни степени свободы трактуются квантово, а другие — классически с квантовыми поправками. Для этого надо разлагать соответствующие операции $\Pi_{\mathscr{V}}$, $\sigma_{\mathscr{V}}$ лишь по части членов $D_{12}^{(i)}$. Переменные, по которым задача остается квантовой, могут быть и неканоническими, например спиновыми.

При наличии в теории непрерывной группы симметрии на выбор квантования (т. е. на выбор оператора $\mathscr{V}$) накладывается дополнительное ограничение [27, 12], состоящее в том, что генераторы этой группы должны соответствовать одним и тем же наблюдаемым L_i в классической и квантовой теориях, т. е. для всех i, j $(= 1, 2, \ldots N)$:

$$L_i L_j \sigma_{\mathscr{V}} = L_i L_j \sigma_0. \tag{96}$$

Заметим, что с точки зрения сохранения симметрии при квантовании вейлевское квантование является преимущественным — в нем множество наблюдаемых L_i, удовлетворяющих (96), является максимально возможным.

В качестве примера полуквантовой трактовки нескольких степеней свободы рассмотрим движение нерелятивистского электрона в произвольном внешнем электромагнитном поле. Уравнение Паули в калибровке $\varphi = 0$:

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left\{\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{q}}, t)\right\}^2 \psi + \frac{\hbar g}{2}\,\hat{\sigma}\mathbf{H}\,(\hat{\mathbf{q}}, t)\,\psi \tag{97}$$

в вейлевском квантовании перейдет в систему уравнений для четырех компонент $\{\rho_0, \boldsymbol{\rho}\}$ матрицы плотности $\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\boldsymbol{\rho}}$:

$$\left.\begin{aligned} \partial\rho_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)/\partial t &= H_1\rho_0\sigma_\hbar + (g\hbar/2)\,\mathbf{H}\boldsymbol{\rho}\sigma_\hbar; \\ \partial\boldsymbol{\rho}(p, q, t)/\partial t &= H_1\boldsymbol{\rho}\sigma_\hbar + g\,[\mathbf{H}\boldsymbol{\rho}]\,\pi_\hbar + (g\hbar/2)\,\mathbf{H}\rho_0\sigma_\hbar. \end{aligned}\right\} \quad (98)$$

Здесь $\mathbf{A}(\mathbf{q}, t)$ — вектор-потенциал; $\mathbf{H}$ — магнитное поле; H_1 — бесспиновая часть функции Гамильтона:

$$H_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (1/2m)\{\mathbf{p} - \mathbf{A}(\mathbf{q}, t)\}^2.$$

Мы воспользовались тем, что в вейлевском квантовании, как можно убедиться, $\overrightarrow{H\sigma_\hbar\boldsymbol{\rho}} = H\boldsymbol{\rho}\sigma_\hbar$. Компонента ρ_0 играет роль плотности частиц, а компоненты $\boldsymbol{\rho}$ описывают поляризацию, именно, среднее значение спина $\hat{\mathbf{s}} = \hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$

$$\bar{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2}\langle 1, \boldsymbol{\rho}\rangle = \frac{\hbar}{2}\int d^3\mathbf{p}\,d^3\mathbf{q}\,\boldsymbol{\rho}.$$

Перейдем теперь к полуклассическому уравнению разложением $\sigma_\hbar$, $\pi_\hbar$ в правых частях системы (98) по $\hbar$. С точностью до членов порядка $\hbar^2$ получим

$$\left.\begin{aligned} \partial\rho_0/\partial t &= H_1\rho_0\sigma_0 + (g\hbar/2)\,\mathbf{H}\boldsymbol{\rho}\sigma_0 + (\hbar^2/2)\,H_1\rho_0\sigma_0''; \\ \partial\boldsymbol{\rho}/\partial t &= H_1\boldsymbol{\rho}\sigma_0 + g\,[\mathbf{H}\boldsymbol{\rho}]\,\pi_0 + (g\hbar/2)\,\mathbf{H}\rho_0\sigma_0 + \\ &\quad + (\hbar^2/2)\,H_1\boldsymbol{\rho}\sigma_0'' + (g\hbar^2/2)\,[\mathbf{H}\boldsymbol{\rho}]\,\pi_0'', \end{aligned}\right\} \quad (99)$$

где $\sigma_0'' = \partial^2\sigma_\hbar/\partial\hbar^2$ при $\hbar = 0$; $\pi_0'' = \partial^2\pi_\hbar/\partial\hbar^2$ при $\hbar = 0$. Не тратя места на простое, но громоздкое расписывание системы (99), обсудим смысл разных приближений. В нулевом порядке по $\hbar$ спиновые взаимодействия не влияют на поступательное движение (g не входит в уравнение для ρ_0), но создают ларморовскую прецессию. Это то, что и делают в обычном классическом расчете. В первом порядке по $\hbar$ проявляется эффект поступательного движения магнитного момента под действием градиента магнитного поля. Движение негамильтоново, так что обычными способами такие квантовые поправки учесть нельзя. Наконец, во втором порядке появляются квантовые поправки к взаимодействию внешнего поля с зарядом.

13. ЧЕТНОСТЬ СОСТОЯНИЯ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ФАЗОВОГО ПРОСТРАНСТВА

Как отмечено в разд. 3, вигнеровская матрица плотности $\rho_{\text{кв}}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ не является положительно определенной функцией. Тем самым она не может трактоваться как плотность вероятности. Отсюда принято делать вывод, что $\rho_{\text{кв}}$ не есть функция распределения (см. любое изложение этого вопроса, например, [18, 19]).

Этот вывод, однако, содержит логический скачок вот какого свойства. Реальный (т. е. экспериментально проверяемый) смысл функции распределения состоит только в том, что с ее помощью можно вычислять средние от наблюдаемых. А в этом смысле свойства положительности $\rho_{кв}$ столь же безупречны, как и $\rho_{кл}$, но только по отношению к другой операции умножения наблюдаемых. Придание же $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ смысла плотности вероятности является добавочным утверждением, не имеющим отношения к объяснению и предсказанию наблюдаемых фактов. С проводимой здесь точки зрения величине $\rho(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ можно придать смысл как среднему от наблюдаемой $\delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0)\,\delta^3(\mathbf{q}-\mathbf{q}_0)$. И тогда мы придем уже к содержательному выводу о том, что эта наблюдаемая положительна в классической теории и неположительна в квантовой. Физический смысл этой неположительности выяснен в [28], где был отмечен простой и интересный факт: квантовая наблюдаемая

$$\mathcal{P} = \hbar^3\pi^3\delta^3(\mathbf{p})\,\delta^3(\mathbf{q}) \tag{100}$$

преобразованием (6) переводится в матричный элемент оператора четности $\hat{\mathcal{P}}$. Поэтому в частности

$$\mathcal{P}\,\mathcal{P}\,\Pi_\hbar = 1. \tag{101}$$

Наблюдаемая $\hbar^3\pi^3\delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0)\,\delta^3(\mathbf{q}-\mathbf{q}_0)$ получается из $\mathcal{P}$ сдвигами. Поэтому квадрат этой наблюдаемой также равен 1. Отсюда следует простая и полезная оценка

$$\pi^3\hbar^3\,|\rho_{кв}(\mathbf{p}, \mathbf{q})| \leqslant 1, \tag{102}$$

причем экстремального значения ± 1 функция $\rho_{кв}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ может достигать не более чем в одной точке. Отметим еще, что оператор $\mathcal{P}\Pi_\hbar$ осуществляет преобразование Фурье с заменой $\mathbf{p} \leftrightarrow \mathbf{q}$:

$$A(\mathbf{p}, \mathbf{q})\,\mathcal{P}\Pi_\hbar = \frac{1}{(\pi\hbar)^3}\int d^3\mathbf{p}'d^3\mathbf{q}' \times$$
$$\times \exp\left\{\frac{2i}{\hbar}(\mathbf{q}\mathbf{p}' - \mathbf{p}\mathbf{q}')\right\} A(\mathbf{p}', \mathbf{q}') \stackrel{\text{def}}{=} \widetilde{A}(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \tag{103}$$

Это означает, что пространство $\{A\}$ наблюдаемых для квантовой алгебры можно расширить, добавив в него все фурье-образы, т. е. функции $A(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, обобщенные по обеим переменным в конечных точках, но быстро спадающие на бесконечности.

14. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КВАНТОВЫХ ПОПРАВОК

Для построения и анализа любой теории возмущений всегда удобно перейти от дифференциального уравнения к соответствующему интегральному, в котором явно учтены начальные условия, а ряд теории возмущений получается простым итерированием.

Типичным примером является уравнение Липпмана — Швингера для рассеяния двух частиц. Покажем, что в представлении объединенной алгебры (и только в нем!) можно построить аналог уравнения Липпмана — Швингера, в котором роль свободного решения играет классическое, а роль полного — квантовое [29].

Ограничимся движением одной частицы во внешнем поле. В гейзенберговской картине наблюдаемые $A_{\text{кл}}$ ($\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$, t) удовлетворяют трехмерному аналогу уравнения (36а):

$$\partial A_{\text{кл}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)/\partial t = A_{\text{кл}} H \sigma_0, \tag{104}$$

где $\sigma_0 = D_{12}\pi_0$; причем

$$D_{12} = (\partial_{1\mathbf{q}}\partial_{2\mathbf{p}} - \partial_{1\mathbf{p}}\partial_{2\mathbf{q}}). \tag{105}$$

Квантовые наблюдаемые $A_{\text{кв}}$ ($\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$, t) в алгебре $\mathscr{B}(\mathscr{V}, \mathscr{W})$ удовлетворяют трехмерному аналогу уравнения (58):

$$\partial A_{\text{кв}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)/\partial t = A_{\text{кв}} H \sigma_{\mathscr{V}\!\mathscr{W}}, \tag{106}$$

где $\sigma_{\mathscr{V}\!\mathscr{W}}$ по-прежнему определяется формулами (55), но с D_{12} из (105) и с функцией $U = U(\partial_{\mathbf{q}}, \partial_{\mathbf{p}})$. Согласно (86), в начальном состоянии при $t = 0$

$$A_{\text{кв}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, 0) = A_{\text{кл}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, 0) \equiv A_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \tag{107}$$

В соответствии с (39)

$$A_{\text{кл}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = A_0\{\mathbf{P}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t), \mathbf{Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)\}, \tag{108}$$

где $\mathbf{P}(\ldots)$, $\mathbf{Q}(\ldots)$ — решение классических уравнений Гамильтона с начальными условиями $\mathbf{P}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, 0) = \mathbf{p}$, $\mathbf{Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, 0) = \mathbf{q}$. Нашу задачу теперь можно сформулировать так: требуется получить для $A_{\text{кв}}$ ($\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$, t) неоднородное интегральное уравнение, нулевой итерацией которого была бы функция $A_{\text{кл}}$ ($\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$, t).

Найдем сначала запаздывающую функцию Грина G ($\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$, t, $\mathbf{p}'$, $\mathbf{q}'$, t') классического уравнения (104). Эта функция подчиняется уравнению

$$\partial G/\partial t - GH\sigma_0 = \delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\,\delta^3(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\,\delta(t-t'). \tag{109}$$

Из свойства (108) следует, что запаздывающее решение уравнения (109) имеет вид

$$G = \delta^3\{\mathbf{p}' - \mathbf{P}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t-t')\}\,\delta^3\{\mathbf{q}' - \mathbf{Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t-t')\}\,\Theta(t-t'). \tag{110}$$

Это решение имеет явный физический смысл: в точке $\mathbf{p}'$, $\mathbf{q}'$ фазового пространства в момент t' порождается классическая фазовая траектория. Обозначив теперь $A_1 = A_{\text{кв}} - A_{\text{кл}}$, из (104), (106) получим

$$\partial A_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)/\partial t - A_1 H\sigma_0 = A_{\text{кв}} H(\sigma_{\mathscr{V}\!\mathscr{W}} - \sigma_0). \tag{111}$$

Учитывая, что, согласно (107), $A_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}, 0) = 0$, уравнение (111) можно переписать в интегральной форме:

$$A_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = \int_0^\infty dt' d^3\mathbf{p}' d^3\mathbf{q}' G(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t; \mathbf{p}', \mathbf{q}', t') \{A_{\text{кв}} H (\sigma_{\mathcal{W}} - \sigma_0)\}_{\mathbf{p}', \mathbf{q}', t'}.$$

Отсюда, проведя интегрирование по δ-функциям из G, получим искомое интегральное уравнение для $A_{\text{кв}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$

$$A_{\text{кв}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = A_{\text{кл}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) + \int_0^t dt' A_{\text{кв}}(\mathbf{p}', \mathbf{q}', t') H(\mathbf{p}', \mathbf{q}') (\sigma_{\mathcal{W}} - \sigma_0), \tag{112}$$

где $\mathbf{p}' = \mathbf{P}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t - t')$; $\mathbf{q}' = \mathbf{Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t - t')$. Это уравнение уже можно итерировать, приняв за нулевое приближение классическое решение $A_{\text{кл}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$. Для решения вопроса о существовании итераций можно воспользоваться доказанными в [1, 12] теоремами, согласно которым, если функции A, H принадлежат множеству классических (соответственно квантовых) наблюдаемых, то произведение $AH\sigma_0$ (соответственно $AH\sigma_{\mathcal{W}}$) существует и принадлежит тому же множеству.

И здесь оказывается выделенным вейлевское квантование. В нем, согласно разд. 2, пространства $\{A\}_{\text{кл}}$ и $\{A\}_{\text{кв}}$ совпадают, так что все итерации существуют, если в рассматриваемом интервале $(0, t)$ существуют соответствующие классические решения. Для иных квантований пространства $\{A\}_{\text{кл}}$, $\{A_{\mathcal{W}}\}$ уже не совпадают. Поэтому даже для первой итерации может оказаться, что произведение $A_{\text{кл}} H \sigma_{\mathcal{W}}$, а тем самым и сама итерация не существует.

Разумеется, существование всех итераций не гарантирует сходимости ряда к решению. Напротив, ряды, как правило, асимптотические.

В шредингеровской картине аналогичное (112) уравнение можно получить для состояния $\rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$:

$$\rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = \rho_{\text{кл}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) + \int_0^t dt' \{\underrightarrow{H(\mathbf{p}'', \mathbf{q}'') \sigma_{\mathcal{W}}} - \underrightarrow{H(\mathbf{p}'', \mathbf{q}'') \sigma_0}\} \rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{p}'', \mathbf{q}'', t'). \tag{113}$$

Здесь $\mathbf{p}'' = \mathbf{P}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t' - t)$, $\mathbf{q}'' = \mathbf{Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t' - t)$. Обращаем внимание на иной по сравнению с величинами $\mathbf{p}'$, $\mathbf{q}'$ в (112) знак времени.

Итерации уравнения (113) существуют при тех же условиях, что и итерации уравнения (112). Но при выходе итерированного решения из общей области $[\rho]_{\text{кл}} \cap [\rho_{\mathscr{Q}\mathscr{W}}]$ физических состояний можно потерять положительность состояния.

Трудность, связанная с положительностью, полностью обходится переходом от квантовых состояний $\rho_{\mathscr{Q}}$ к амплитудам состояний $\Psi_{\mathscr{Q}}$, введенным в разд. 3 для вейлевского квантования. Переход к другим квантованиям для Ψ такой же, как и для состояний

$$\Psi_{\mathscr{Q}} = \mathscr{T}^{-1}(\hbar)\, \Psi_{\text{кв}}.$$

Здесь принято обычное для выбора квантования условие $\mathscr{W} = 1$. Легко убедиться в том, что амплитуда состояния $\Psi_{\mathscr{Q}}$ связана с состоянием $\rho_{\mathscr{Q}}$ соотношением

$$\rho_{\mathscr{Q}} = \Psi_{\mathscr{Q}} \Psi^*_{\mathscr{Q}} \widetilde{\Pi}_{\mathscr{Q}},$$

где $\widetilde{\Pi}_{\mathscr{Q}}$ — операция ассоциативного умножения:

$$\widetilde{\Pi}_{\mathscr{Q}} = U(-1,\ -2) \exp[(i\hbar/2)\, D_{12}]\, \pi_0;$$
$$U(-1,\ -2) = U(-\partial_{1\mathbf{p}},\ -\partial_{1\mathbf{q}},\ -\partial_{2\mathbf{p}},\ -\partial_{2\mathbf{q}}).$$

Умножение $\widetilde{\Pi}_{\mathscr{Q}}$ соответствует умножению ковариантных символов у Ф. А. Березина [17].

Умножение $\widetilde{\Pi}_{\mathscr{Q}}$ удовлетворяет свойству гамильтоновости (18). Поэтому уравнение для $\Psi_{\mathscr{Q}}$ имеет точно такой же вид, как для $\rho_{\mathscr{Q}}$:

$$\Psi_{\mathscr{Q}}(\mathbf{p},\ \mathbf{q},\ t) = \Psi_{\text{кл}}(\mathbf{p},\ \mathbf{q},\ t) +$$
$$+ \int_0^t dt' \{\underrightarrow{H(\mathbf{p}'',\ \mathbf{q}'')\, \sigma_{\mathscr{Q}}} - \underrightarrow{H(\mathbf{p}'',\ \mathbf{q}'')\, \sigma_0}\}\, \Psi_{\mathscr{Q}}(\mathbf{p}'',\ \mathbf{q}'',\ t'). \tag{114}$$

Здесь $\Psi_{\text{кл}}$ — классическая амплитуда состояния, удовлетворяющая соотношениям

$$\partial \Psi_{\text{кл}}/\partial t = \underrightarrow{H\sigma_0}\Psi_{\text{кл}},\quad \rho_{\text{кл}} = \Psi_{\text{кл}} \Psi^*_{\text{кл}} \pi_0.$$

Каждой итерации уравнения (114) теперь можно сопоставлять заведомо положительное состояние $\rho_{\mathscr{Q}}$.

В качестве примера выпишем в явной форме интегральное уравнение для вейлевской $\rho_{\text{кв}}(\mathbf{p},\ \mathbf{q},\ t)$ с одночастичным гамильтонианом (90). В соответствии с (113) получим

$$\rho_{\text{кв}}(\mathbf{p},\ \mathbf{q},\ t) = \rho_{\text{кл}}(\mathbf{p},\ \mathbf{q},\ t) +$$
$$+ \int_0^t dt' \left\{ \frac{1}{i\hbar (2\pi)^3} \int d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{x} \exp\{i\mathbf{x}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1)\} \{H_I(\mathbf{q}' - \hbar\mathbf{x}/2) - \right.$$
$$- H_I(\mathbf{q}' + \hbar\mathbf{x}/2)\}\, \rho_{\text{кв}}(\mathbf{p}_1,\ \mathbf{q}',\ t') -$$
$$\left. - (\partial H_I(\mathbf{q}')/\partial \mathbf{q}')\, \partial \rho_{\text{кв}}(\mathbf{p}',\ \mathbf{q}',\ t')/\partial \mathbf{p}' \right\}, \tag{115}$$

где $\mathbf{p}' = \mathbf{P}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t'-t)$; $\mathbf{q}' = \mathbf{Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t'-t)$. Разложив $H_I(\mathbf{q}' \mp \hbar \varkappa/2)$ в ряд по $\hbar$, мы сможем вычислять квантовые поправки в виде ряда по степеням $\hbar$. Ряд будет существовать всюду, где существуют соответствующие классические решения.

Интересно отметить, что прямое итерирование уравнения (115) без разложения H_I по $\hbar$ будет давать квантовые поправки, неаналитичные по $\hbar$. В частности, начиная со второго приближения появятся такие неаналитические эффекты, как туннельный эффект и надбарьерное отражение. Поясним, почему туннельный эффект появится только со второго порядка. Физическая картина прохождения барьера на языке итераций уравнения (115) такова. В отсутствие возмущений частица движется классически. Каждое квантовое возмущение делает возможным «скачок» импульса, ибо импульс $\mathbf{p}$ в $\rho_{\text{кв}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$ никак не связан с импульсом $\mathbf{p}_1$ в $\rho_{\text{кв}}(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}', t')$. Путем таких скачков частица может «перелезть» через барьер. Очевидно, что минимальное число скачков — два (один — вверх, другой — вниз).

15. ОБЪЕДИНЕННАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ

В стандартных формулировках классической и квантовой теорий рассеяния используются совершенно различные понятия, «не выдерживающие» перехода от одной теории к другой. В классической теории нет аналога $\hat{S}$-матрицы и амплитуды рассеяния, а в квантовой — нет прицельного параметра. Это затрудняет развитие последовательных полуклассических методов. В этом разделе мы построим единую гамильтонову теорию рассеяния, пригодную как для классической, так и для квантовой механики.

Для простоты ограничимся упругим потенциальным рассеянием нерелятивистских бесспиновых частиц и вейлевским квантованием. Исходным объектом теории является оператор гамильтоновой эволюции

$$\mathcal{U}(t) = \exp(tH\sigma), \tag{116}$$

действующий на наблюдаемые (влево) или на состояния (вправо):

$$A(0)\,\mathcal{U}(t) = A(t); \quad \underset{\longrightarrow}{\mathcal{U}}(t)\,\rho(0) = \rho(t). \tag{117}$$

Ядро этого оператора $\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \mid \mathcal{U}(t) \mid \mathbf{p}', \mathbf{q}' \rangle = \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \mid \underset{\longrightarrow}{\mathcal{U}}(t) \mid \mathbf{p}', \mathbf{q}' \rangle$ в классической теории, согласно (39), представимо в виде

$$\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \mid \mathcal{U}_{\text{кл}}(t) \mid \mathbf{p}', \mathbf{q}' \rangle = \delta^3\{\mathbf{p} - \mathbf{P}(\mathbf{p}', \mathbf{q}', t)\}\,\delta^3\{\mathbf{q} - \mathbf{Q}(\mathbf{p}', \mathbf{q}', t)\}, \tag{118}$$

а в квантовой, согласно (6), выражается через матричные элементы стандартного оператора эволюции $\hat{U}(t)$, действующего на векторы состояния:

$$\langle \mathbf{p},\, \mathbf{q} \,|\, \mathcal{U}_{\text{кв}}(t) \,|\, \mathbf{p}',\, \mathbf{q}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3\mathbf{k}\, d^3\mathbf{k}' \exp\left(\frac{i}{\hbar}\, \mathbf{q}'\mathbf{k}' - \frac{i}{\hbar}\, \mathbf{q}\mathbf{k}\right) \times$$
$$\times \left\langle \mathbf{p} + \frac{1}{2}\,\mathbf{k} \,|\, \hat{U}(t) \,|\, \mathbf{p}' + \frac{1}{2}\,\mathbf{k}' \right\rangle \left\langle \mathbf{p}' - \frac{1}{2}\,\mathbf{k}' \,|\, \hat{U}^{+}(t) \,|\, \mathbf{p} - \frac{1}{2}\,\mathbf{k} \right\rangle. \qquad (119)$$

Из (118), (119) видно, что ядро $\langle \mathbf{p},\ \mathbf{q} \mid \mathcal{U}(t) \mid \mathbf{p}',\ \mathbf{q}' \rangle$ действительно и что

$$\mathcal{U}^{-1}(t) = \mathcal{U}(-t) = \mathcal{U}^{T}, \qquad (120)$$

где верхний индекс T означает транспонирование. Гамильтоновость эволюции проявляется в том, что в соответствии с (32), (33) для любой пары наблюдаемых A, B

$$AB\pi\mathcal{U}(t) = A\mathcal{U}(t)\, B\mathcal{U}(t)\, \pi; \quad AB\sigma\mathcal{U}(t) = A\mathcal{U}(t)\, B\mathcal{U}(t)\, \sigma. \qquad (121)$$

Напомним, что в нерелятивистской теории оператор свободной эволюции $\mathcal{U}_0(t)$ одинаков в классической и квантовой теориях:

$$\langle \mathbf{p},\, \mathbf{q} \,|\, \mathcal{U}_0(t) \,|\, \mathbf{p}',\, \mathbf{q}' \rangle = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\, \delta^3\left(\mathbf{q} - \frac{\mathbf{p}'}{m}\, t - \mathbf{q}'\right). \qquad (122)$$

Введем теперь асимптотические состояния ρ_{in} и ρ_{out}, определяемые в шредингеровской картине соотношениями

$$\rho_{\text{in}} = \lim_{t \to -\infty \longrightarrow} \mathcal{U}_0^{-1}(t)\, \underset{\longrightarrow}{\mathcal{U}(t)}\, \rho(0); \qquad (123)$$

$$\rho_{\text{out}} = \lim_{t \to +\infty \longrightarrow} \mathcal{U}_0^{-1}(t)\, \underset{\longrightarrow}{\mathcal{U}(t)}\, \rho(0). \qquad (124)$$

Пределы понимаются в топологии, определенной в [1, 12]. Как в классическом, так и в квантовом случае предел дает нуль, если описывает финитное движение. Поэтому при наличии связанных состояний множества $[\rho_{\text{in}}]$, $[\rho_{\text{out}}]$ не изоморфны множеству $[\rho]$:

$$[\rho_{\text{in}}] \subset [\rho]; \quad [\rho_{\text{out}}] \subset [\rho]; \quad [\rho_{\text{in}}] \neq [\rho]; \quad [\rho_{\text{out}}] \neq [\rho]. \qquad (125)$$

Следующим шагом является введение обобщенного оператора Мёллера $\Omega_{+}(t) = \Omega(t)$ (оператор Ω_{-} нам не понадобится):

$$\Omega(t) = \lim_{t' \to -\infty} \mathcal{U}_0^{-1}(t)\, \mathcal{U}(t)\, \mathcal{U}^{-1}(t')\, \mathcal{U}_0(t'), \qquad (126)$$

где предел берется в одной из топологий, согласованных с топологиями в пространствах $\{A\}$, $\{\rho\}$. Оператор $\underset{\rightarrow}{\Omega}(t)$ действует из $\{\rho_{\text{in}}\}$ в $\{\rho\}$. Тем самым при наличии связанных состояний он не имеет обратного. Однако существует транспонированный оператор $\underset{\rightarrow}{\Omega}^T(t)$ из $\{\rho\}$ в $\{\rho_{\text{in}}\}$, такой, что

$$\underset{\longrightarrow}{\Omega^T}(t)\,\underset{\longrightarrow}{\Omega}(t) = \mathrm{I}. \tag{127}$$

Основным объектом гамильтоновой теории рассеяния является оператор рассеяния $\mathscr{S}$, связывающий пространства $\{\rho_{\text{out}}\}$ и $\{\rho_{\text{in}}\}$. По определению

$$\rho_{\text{out}} = \mathscr{S}\rho_{\text{in}}. \tag{128}$$

Пространства $\{\rho_{\text{out}}\}$ и $\{\rho_{\text{in}}\}$ изоморфны. Поэтому оператор $\mathscr{S}$ не только действителен, но и ортогонален:

$$\mathscr{S}^T = \mathscr{S}^{-1}. \tag{129}$$

Роль обобщенного оператора Мёллера определяется следующими из (123), (124), (126), (128) предельными соотношениями

$$\lim_{t\to-\infty} \Omega(t) = \mathrm{I}; \quad \lim_{t\to+\infty} \Omega(t) = \mathscr{S}. \tag{130}$$

Поэтому именно для $\Omega(t)$ естественно составлять и решать интегральные уравнения, описывающие процесс рассеяния. Соответствующее дифференциальное (по t) уравнение получается из (116), (126) и имеет вид

$$\partial\Omega(t)/\partial t = H_I\{\mathbf{p}_{\text{св}}(t),\ \mathbf{q}_{\text{св}}(t)\}, \tag{131}$$

где $\mathbf{p}_{\text{св}} = \mathbf{p}$, $\mathbf{q}_{\text{св}} = \mathbf{q} + \mathbf{p}t/m$. Оператор $\Omega(t)$ является оператором гамильтоновой эволюции в картине взаимодействия (48). Оператор рассеяния удовлетворяет свойствам гамильтоновости (32), (33):

$$AB\sigma\mathscr{S} = A\mathscr{S}B\mathscr{S}\sigma; \quad AB\pi\mathscr{S} = A\mathscr{S}B\mathscr{S}\pi \tag{132}$$

и сохраняет энергию, которая для состояний рассеяния сводится к кинетической:

$$H_0\mathscr{S} = H_0. \tag{133}$$

Из этих свойств следуют два общих ограничения на форму матричного элемента $\langle\mathbf{p}, \mathbf{q} \mid \mathscr{S} \mid \mathbf{p}', \mathbf{q}'\rangle$ оператора $\mathscr{S}$.

Во-первых, приняв в первом из соотношений (132) $B = H_0$ и воспользовавшись (133) и произвольностью A, получим

$$(H_0\sigma)\,\mathscr{S} - \mathscr{S}\,(H_0\sigma) = 0. \tag{134}$$

Оператор $H_0\sigma$ при $H_0 = p^2/2m$, согласно (8), (15) как в классической, так и в квантовой теории имеет вид

$$H_0\sigma = (\mathbf{p}/m)\,\partial_{\mathbf{q}}\pi_0, \tag{135}$$

так что условие (134) представляется в форме

$$(\mathbf{p}\partial/\partial\mathbf{q}+\mathbf{p}'\partial/\partial\mathbf{q}')\langle\mathbf{p},\ \mathbf{q}\,|\,\mathscr{S}\,|\,\mathbf{p}',\ \mathbf{q}'\rangle=0. \tag{134а}$$

Вторoе условие получается аналогичным способом заменой первого из соотношений (132) на второе:

$$(H_0\pi)\mathscr{S}-\mathscr{S}(H_0\pi)=0. \tag{136}$$

Здесь, однако, квантовый и классический аналоги (135) различны:

$$H_0\pi_0=(\mathbf{p}^2/2m)\,\pi_0;\ \ H_0\pi_\hbar=(1/2m)\left(\mathbf{p}^2-\frac{\hbar^2}{4}\,\partial^2_{\mathbf{q}}\right)\pi_0. \tag{137}$$

Поэтому условие (136) для $\mathscr{S}_{\text{кл}}$ принимает вид

$$(\mathbf{p}^2/2m-\mathbf{p}'^2/2m)\langle\mathbf{p},\ \mathbf{q}\,|\,\mathscr{S}_{\text{кл}}\,|\,\mathbf{p}',\ \mathbf{q}'\rangle=0, \tag{138а}$$

а для $S_{\text{кв}}$

$$\left\{\frac{\mathbf{p}^2}{2m}-\frac{\mathbf{p}'^2}{2m}-\frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{q}}\right)^2+\frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{q}'}\right)^2\right\}\times$$
$$\times\langle\mathbf{p},\ \mathbf{q}\,|\,\mathscr{S}_{\text{кв}}\,|\,\mathbf{p}',\ \mathbf{q}'\rangle=0. \tag{138б}$$

Теперь у нас есть все необходимое для перехода к сечению рассеяния. Этот переход осуществляется следующим образом. В соответствии со стандартной экспериментальной ситуацией выберем $\rho_{\text{in}}(\mathbf{p}',\ \mathbf{q}')$ в виде

$$\rho_{\text{in}}(\mathbf{p}',\ \mathbf{q}')=\delta^3(\mathbf{p}'-\mathbf{p}_0).$$

Это — ненормированное стационарное состояние, допустимое как в квантовой, так и в классической теории. В этом состоянии импульс фиксирован, пространственная плотность частиц равна единице, а поток

$$\int d^3\mathbf{p}\,\frac{\mathbf{p}}{m}\,\rho_{\text{in}}=\frac{\mathbf{p}_0}{m}=\mathbf{v}_{\text{in}}.$$

После рассеяния получается состояние ρ_{out}:

$$\rho_{\text{out}}(p,\ q)=\int d^3\mathbf{q}'\,\langle\mathbf{p},\ \mathbf{q}\,|\,\mathscr{S}\,|\,\mathbf{p}_0,\ \mathbf{q}'\rangle. \tag{139}$$

Сечение рассеяния является четко определенной величиной лишь при ненулевом импульсе и ненулевом угле рассеяния. Поэтому будем считать, что

$$\mathbf{p}\neq\mathbf{p}_0\neq 0.$$

Это дает возможность при фиксированных $\mathbf{p}$, $\mathbf{p}'$ разделить $\mathbf{q}$, $\mathbf{q}'$ на продольные и поперечные составляющие:

$$\mathbf{q}=q_{\parallel}\mathbf{p}/|\,\mathbf{p}\,|+\mathbf{q}_{\perp};\ \ \mathbf{q}'=q'_{\parallel}\mathbf{p}'/|\,\mathbf{p}'\,|+\mathbf{q}'_{\perp},$$

где

$$\mathbf{q}_{\perp}\mathbf{p}=\mathbf{q}'_{\perp}\mathbf{p}'=0.$$

Условие (134а) при этом сведется к тому, что $\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \mid \mathcal{S} \mid \mathbf{p}', \mathbf{q}' \rangle$ зависит от разности $q_{\parallel} - q'_{\parallel}$, но не зависит от суммы $q_{\parallel} + q'_{\parallel}$. Поэтому $\rho_{\text{out}}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ в (139) не зависит от $q_{\parallel}$:

$$\rho_{\text{out}} = \rho_{\text{out}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}_{\perp}).$$

По определению сечения

$$\left.\frac{d\sigma}{d^3\mathbf{p}}\right|_{\mathbf{p}_0\to\mathbf{p}} = \int d^2\mathbf{q}_{\perp}\rho_{\text{out}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = \int d^3\mathbf{q}' d^2\mathbf{q}_{\perp} \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \mid \mathcal{S} \mid \mathbf{p}_0, \mathbf{q}' \rangle. \quad (140)$$

Из (138а), (138б) следует, что как классические, так и квантовые сечения пропорциональны энергетической δ-функции, умноженной на сечение рассеяния в телесный угол dO:

$$d\sigma/d^3\mathbf{p} = (1/|\mathbf{p}|\, m)\, \delta(\mathbf{p}^2/2m - \mathbf{p}_0^2/2m)\, d\sigma/dO. \quad (141)$$

Отметим, что проведенный вывод формулы (140) годится и для канала неупругого рассеяния $\mathcal{S}_{\text{неупр}}$ с тем единственным отличием, что в правой части появится отношение скоростей:

$$\left(\frac{d\sigma}{d^3\mathbf{p}}\right)_{\text{неупр}} = \frac{v_{\text{out}}}{v_{\text{in}}} \int d^3\mathbf{q}' d^2\mathbf{q}_{\perp} \langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \mid \mathcal{S}_{\text{неупр}} \mid \mathbf{p}_0, \mathbf{q}' \rangle,$$

где $v_{\text{in}} = |\mathbf{p}_0|/m$, $v_{\text{out}} = |\mathbf{p}|/m$. Покажем, что общие формулы (140), (141) дают правильные выражения для сечения в классическом и квантовом случаях.

Классическое выражение $\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \mid \mathcal{S}_{\text{кл}} \mid \mathbf{p}', \mathbf{q}' \rangle$, согласно классическому свойству гамильтоновости (118), может быть представлено в виде

$$\langle \mathbf{p}, \mathbf{q} \mid \mathcal{S}_{\text{кл}} \mid \mathbf{p}', \mathbf{q}' \rangle = \delta^3\{\mathbf{p} - \mathbf{P}(\mathbf{p}', \mathbf{q}')\}\, \delta^3\{\mathbf{q} - \mathbf{Q}(\mathbf{p}', \mathbf{q}')\}, \quad (142)$$

где преобразование от пары $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$ к паре $\mathbf{p}'$, $\mathbf{q}'$ каноническое. При этом, согласно (136), (138а), функция $\mathbf{P}(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$ не зависит от $q'_{\parallel}$, а $\delta^3\{\mathbf{p} - \mathbf{P}(\mathbf{p}', \mathbf{q}'_{\perp})\}$ представима в виде

$$\delta^3\{\mathbf{p} - \mathbf{P}(\mathbf{p}', \mathbf{q}'_{\perp})\} = \frac{1}{m|\mathbf{p}|}\, \delta\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}'^2}{2m}\right) \delta^2\{\mathbf{n} - \mathbf{n}(E, \mathbf{n}')\}, \quad (143)$$

где, по определению, $\mathbf{p} = \mathbf{n}\,|\mathbf{p}|$; $\mathbf{p}' = \mathbf{n}'\,|\mathbf{p}'|$; $E = \mathbf{p}^2/2m$;

$$\int f(\mathbf{n}, \mathbf{n}', E)\, \delta^2\{\mathbf{n} - \mathbf{n}(E, \mathbf{n}')\}\, dO = \\ = f(\mathbf{n}, \mathbf{n}', E) \text{ при } \mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{n}', E); \quad (144)$$

dO — элемент телесного угла вектора $\mathbf{p}$.

Подставляя теперь (142), (143) в (140), (141), получим

$$\delta\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}_0^2}{2m}\right) \frac{d\sigma_{\text{кл}}}{dO} = m\,|\mathbf{p}|\, \frac{d\sigma_{\text{кл}}}{d^3\mathbf{p}} = \\ = \delta\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}_0^2}{2m}\right) \int d^2\mathbf{q}_{\perp} \delta^2\left\{\mathbf{n} - \mathbf{n}(E, \mathbf{n}_0, \mathbf{q}'_{\perp}\right\}. \quad (145)$$

При упругом азимутально симметричном рассеянии абсолютная величина вектора $\mathbf{q}'_\perp$ равна прицельному параметру b:

$$|\mathbf{q}'_\perp| = b,$$

и для сечения из (145) получается стандартное классическое выражение

$$d\sigma_{\text{кл}}/dO = b/\sin\vartheta\,|d\vartheta/db|, \tag{146}$$

где $\cos\vartheta = (\mathbf{n}\mathbf{n}_0)$.

Квантовая величина $\langle \mathbf{p},\, \mathbf{q} \mid \mathcal{S}_{\text{кв}} \mid \mathbf{p}',\, \mathbf{q}' \rangle$ в полной аналогии с (119) выражается через элементы $\langle \mathbf{p}_1 \mid \hat{S} \mid \mathbf{p}_2 \rangle$ матрицы рассеяния

$$\langle \mathbf{p},\, \mathbf{q} \mid \mathcal{S}_{\text{кв}} \mid \mathbf{p}',\, \mathbf{q}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3\mathbf{k}\, d^3\mathbf{k}' \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}'\mathbf{k}' - \frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\mathbf{k}\right) \times$$
$$\times \left\langle \mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{k} \,\middle|\, \hat{S} \,\middle|\, \mathbf{p}' + \frac{1}{2}\mathbf{k}' \right\rangle \left\langle \mathbf{p}' - \frac{1}{2}\mathbf{k}' \,\middle|\, \hat{S}^+ \,\middle|\, \mathbf{p} - \frac{1}{2}\mathbf{k} \right\rangle; \tag{147}$$

$\hat{S}$-матрица связана с амплитудой рассеяния $f\,(\mathbf{p}_1,\, \mathbf{p}_2)$ выражением

$$\langle \mathbf{p}_1 \mid \hat{S} \mid \mathbf{p}_2 \rangle = \delta^3(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) + \frac{i}{2\pi} \langle \mathbf{p}_1 \mid \hat{R} \mid \mathbf{p}_2 \rangle, \tag{148}$$

где

$$\langle \mathbf{p}_1 \mid \hat{R} \mid \mathbf{p}_2 \rangle = \delta\,(E_1 - E_2)\, f\,(\mathbf{p}_1,\, \mathbf{p}_2); \quad E_1 = \mathbf{p}_1^2/2m; \quad E_2 = \mathbf{p}_2^2/2m.$$

Подставив теперь (147) в (140) с учетом (141), (148), получим для рассеяния на ненулевой угол стандартное квантовое выражение

$$d\sigma_{\text{кв}}/dO = m^2\hbar^2\,|f\,(\mathbf{p},\, \mathbf{p}_0)|^2. \tag{149}$$

Замечание 1. Мы отвлекаемся от таких осложняющих особенностей рассеяния как падение на центр, закручивание, ореол и радужное рассеяние, поскольку они не имеют прямого отношения к нашей проблеме.

Замечание 2. Интегрированию по $\mathbf{q}$, $\mathbf{q}'$ в стандартной форме квантовой теории соответствует приравнивание импульсов $\mathbf{p} = \mathbf{p}'_1$, $\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_2$ в матричных элементах $\langle \mathbf{p}_1 \mid \hat{S} \mid \mathbf{p}_2 \rangle$, $\langle \mathbf{p}'_2 \mid \hat{S}^+ \mid \mathbf{p}'_1 \rangle$. Использованием (138б), (134а) снимается интегрирование по $q_{||}$, что соответствует снятию стандартной шероховатости, связанной с «возведением в квадрат δ-функции по энергии».

16. КВАНТОВО-КЛАССИЧЕСКОЕ ИНТЕГРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ РАССЕЯНИЯ

Из уравнения (131) и начального условия (130) следует интегральное уравнение Липпмана — Швингера:

$$\Omega(t) = 1 + \int\limits_{-\infty}^{t} dt'\,\Omega(t')\,H_I(t')\,\sigma, \tag{150}$$

справедливое при соответствующем выборе σ (σ_0 или $\sigma_\hbar$) в каждой из механик. Более интересным, однако, является интегральное уравнение типа (112), (113), связывающее $\Omega_{кв}(t)$ и $\Omega_{кл}(t)$. Вывод этого уравнения аналогичен. Уравнение (131) для квантового случая представляется в виде

$$\partial\boldsymbol{\Omega}_{кв}(t)/\partial t - H_I\{\mathbf{p}_{св}(t),\ \mathbf{q}_{св}(t)\}\,\sigma_0\boldsymbol{\Omega}_{кв} = H_I(\sigma_\hbar - \sigma_0)\,\boldsymbol{\Omega}_{кв}. \qquad (151)$$

Соответствующая запаздывающая функция Грина $G_{расс}(\mathbf{p},\ \mathbf{q},\ t;\ \mathbf{p}',\ \mathbf{q}',\ t')$, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{\partial G_{расс}}{\partial t} - H_I\sigma_0 G_{расс} = \delta^3(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\,\delta^3(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\,\delta(t-t'), \qquad (152)$$

имеет вид

$$G_{расс} = \mathcal{U}_0^{-1}(t)\,\mathcal{U}_{кл}(t)\,\mathcal{U}_{кл}^{-1}(t')\,\mathcal{U}_0(t')\,\Theta(t-t'), \qquad (153)$$

справедливость чего легко устанавливается с помощью (116). Подчеркнем, что только при отсутствии связанных состояний множитель перед Θ-функцией можно заменить на $\boldsymbol{\Omega}_{кл}(t)\,\boldsymbol{\Omega}_{кл}^T(t)$. Искомое интегральное уравнение, удовлетворяющее условиям (130), получается из (151) в виде

$$\boldsymbol{\Omega}_{кв}(t) = \boldsymbol{\Omega}_{кл}(t) + \mathcal{U}_0^{-1}(t)\,\mathcal{U}_{кл}(t)\times$$
$$\times\int_0^t dt'\,\mathcal{U}_{кл}^{-1}(t')\,\mathcal{U}_0(t')\,H_I\{\mathbf{p}_{св}(t'),\ \mathbf{q}_{св}(t')\}(\sigma_\hbar-\sigma_0)\,\boldsymbol{\Omega}_{кв}(t'). \qquad (154)$$

Согласно (118), классический оператор эволюции известен, если известны все (в том числе финитные!) траектории. При этом умножение на операторы $\mathcal{U}$, $\mathcal{U}_0$ сводится к интегрированию δ-функции. Отсюда следует, что уравнение (154) дает общий эффективный метод вычисления квантовых поправок к классическому рассеянию.

Подчеркнем, что уравнение (154) справедливо и при наличии дополнительных дискретных квантовых степеней свободы (частицы со спином, наличие возбужденных уровней и др.).

Для релятивистского рассеяния следует учесть, что релятивистская классическая эволюция отличается от квантовой даже для свободного движения:

$$c\sqrt{\mathbf{p}^2+m^2c^2}\,\sigma_0 \neq c\sqrt{\mathbf{p}^2+m^2c^2}\,\sigma_\hbar.$$

17. АКСИОМЫ ГАМИЛЬТОНОВОЙ ТЕОРИИ

В основу настоящей работы положены две назависимые идеи: 1) изложить квантовую и классическую механику с использованием только таких понятий, которые имеют смысл в обеих механиках; 2) реализовать наблюдаемые и состояния c-числовыми функциями $A(p, q)$, $\rho(p, q)$ в фазовом пространстве. В этом разделе изложена первая идея отдельно от второй, не опираясь ни на какую реализацию. В результате мы получим абстрактную и вместе с тем полную систему аксиом обеих гамильтоновых механик. Эта аксиоматика близка к данной в [11]. Небольшое различие связано с замечанием, сделанным на стр. 14 [ниже уравнения (24б)].

Аксиома 1. Гамильтонова теория состоит из множества наблюдаемых $\{A\}$ и множества состояний $\{\rho\}$. Наблюдаемые и состояния являются абстрактными элементами, реализация которых (функциями, операторами и др.) не фиксируется.

Аксиома 2. Для наблюдаемых A определены операции сложения, умножения на комплексные числа и перехода к пределу. Иначе говоря, $\{A\}$ является топологическим векторным пространством.

Аксиома 3. Для наблюдаемых A определены две билинейных операции умножения: обычное π и пуассоновское σ. Пуассоновское умножение антикоммутативно:

$$AB\sigma^T \overset{\text{def}}{=} BA\sigma = -AB\sigma.$$

Остальные ассоциативные и коммутативные свойства умножений π, σ пока не определены. В множестве наблюдаемых существует единица (I) по отношению к умножению π:

$$A\mathrm{I}\pi = \mathrm{I}A\pi = A; \quad \mathrm{I}A\sigma = A\mathrm{I}\sigma = 0.$$

Аксиома 4. Умножения π, σ удовлетворяют свойствам гамильтоновости (18), (19).

Следствие. Агрегаты типа $C\sigma$ являются линейными операторами, действующими влево на наблюдаемые из $\{A\}$ и удовлетворяющими правилу дифференцирования произведения по отношению к умножениям π, σ. Тем самым каждой наблюдаемой A соответствует элемент $A\sigma$ алгебры Ли.

Аксиома 5. На множестве $\{A\}$ определен действующий влево антилинейный оператор J со следующими свойствами:

$$JJ = \mathrm{I};$$

для любого A и любого числа λ

$$(\lambda A) J = (AJ) \lambda^*.$$

Определения. Элемент AJ обозначается через A^+ и называется эрмитово сопряженным к A. Элемент A называется эрмитовым, если $A = A^+$. Элемент A называется положительным, если существует наблюдаемая B, такая, что

$$A = BB^+\pi.$$

Аксиома 6. Состояния ρ являются линейными функционалами на алгебре наблюдаемых. Функционалы, соответствующие физическим состояниям, эрмитовы, мультипликативно положительны и обычно нормированы. Значение $\langle A, \rho\rangle$ функционала ρ на наблюдаемой A имеет смысл среднего значения наблюдаемой A в состоянии ρ.

Свойства нормированности, эрмитовости и положительной определенности имеют соответственно вид: $\langle I, \rho\rangle = 1$. При $A = A^+$ величина $\langle A, \rho\rangle$ — действительна. Для любых A справедливо $\langle AA^+\pi, \rho\rangle \geqslant 0$. Топология в пространстве $\{\rho\}$ функционалов над A согласована с топологией в $\{A\}$.

Аксиома 7. В алгебре $\{A\}$ задана наблюдаемая H, у которой соответствующий генератор $H\sigma$ описывает эволюцию во времени, т. е. определяет гейзенберговские уравнения движения для наблюдаемых:

$$\partial A/\partial t = AH\sigma.$$

Аксиома 8. Умножение π ассоциативно, т. е. для любых наблюдаемых A, B, C

$$AB\pi C\pi = ABC\pi\pi.$$

Аксиомы 1—8 справедливы для обеих механик, по-разному определяется лишь

Аксиома 9:

а) в классической теории умножение π, обозначаемое π_0, является коммутативным:

$$\pi_{\text{кл}} = \pi_0; \ (AB - BA)\,\pi_0 = 0; \tag{155а}$$

б) в квантовой теории умножение π, обозначаемое $\Pi_\hbar$, удовлетворяет соотношению для коммутатора

$$(AB - BA)\,\Pi_\hbar = i\hbar AB\sigma_\hbar, \tag{155б}$$

где $\sigma_\hbar$ — квантовое пуассоново умножение.

Пользуясь только этой системой аксиом, можно ввести

1. Определения чистых и смешанных состояний из разд. 4. Эти определения даны там в форме, не зависящей от конкретной реализации.

2. Определение стационарных состояний из разд. 8. Оно также не связано с реализацией.

3. Определение канонической механики как алгебры с четным числом образующих p_i, q_i ($i = 1, 2, \ldots, n$), удовлетворяющих соотношениям

$$p_i p_j \sigma = q_i q_j \sigma = 0; \quad q_i p_j \sigma = \delta_{ij}. \tag{156}$$

4. Определения представлений шредингеровского гейзенберговского и взаимодействия.

Как показано в [30] (для одной степени свободы) и в [31] (для многих степеней свободы), для канонической механики (156) аксиомы 2—8 приводят либо к классической, либо к квантовой теории, правда, с возникновением дополнительной (видимо, патологической) возможности: квантовой теории с мнимой планковской константой.

Разделяющие классическую и квантовую теорию аксиомы 9а, 9б независимы от остальных. Если мы откажемся от аксиомы 9, то получим свободную ассоциативную гамильтонову алгебру. Классическая и квантовая механика являются фактор-алгебрами свободной алгебры по идеалам, индуцируемым соответственно тождествами аксиом 9а, 9б. Эти идеалы не имеют нетривиальных общих элементов. Поэтому не существует гомоморфизмов между классическими и квантовыми алгебрами. С этой точки зрения удачным выбором квантования можно добиться хорошего квантово-классического соответствия для изучаемого круга задач, но не для теории в целом.

Все известные бозонные квантовые теории охвачены приведенной системой аксиом. В частности, калибровочным теориям и теориям со связями соответствуют реализации наблюдаемых классами эквивалентности функций или операторов. Переход к фермионным теориям сводится к изменениям знаков в некоторых тождествах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Непосредственной и естественной областью применимости изложенного метода является решение различных квантово-классических задач, особенно таких, в которых одни степени свободы трактуются квантово, а другие — классически.

Было бы очень интересно построить квантово-классическую алгебру для квантовой теории поля. На формальном уровне это обобщение фактически содержится в [14]. Однако наиболее интересны и наиболее трудны здесь различные математические вопросы, связанные с выбором реализации, пространств наблюдаемых и состояний, с перенормировкой операции умножения наблюдаемых, с выбором вакуума (например, можно квантовать над классическим вакуумом) и т. д.

Исследование всех этих вопросов сейчас особенно актуально, поскольку как калибровочные, так и солитонные теории развиваются на основе квантово-классических методов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Широков Ю. М.** «ТМФ», 1976, т. 28, с. 308.
2. **Weyl H.** The Theory of Groups and Quantum Mechanics. N.Y., 1931, p. 274.
3. **Wigner E. P.** «Phys. Rev.», 1932, v. 40, p. 749.
4. **Moyal J. E.** «Proc. Cambridge Phylos. Soc.», 1949, v. 45, p. 91.
5. **Шефер X.** Топологические векторные пространства. Пер. с англ. М., «Мир», 1971.
6. **Эмх Ж.** Алгебраические методы в статистической механике и квантовой теории поля. Пер. с англ. М., «Мир», 1976.
7. **Кон П.** Универсальная алгебра. Пер. с англ. М., «Мир», 1968.
8. **Мальцев А. И.** Алгебраические системы. М., «Наука», 1970.
9. **Grgin E., Petersen A.** «J. Math. Phys.», 1974, v. 15, p. 764; «Comm. Math. Phys.», 1976, v. 50, p. 177.
10. **Зайцев Г. А.** Алгебраические проблемы математической и теоретической физики. М., «Наука», 1974.
11. **Широков Ю. М.** «ТМФ», 1975, т. 25, с. 307.
12. **Широков Ю. М.** Там же, 1976, т. 29, с. 309.
13. **Jordan T. F., Sudarshan E. C. G.** «Rev. Mod. Phys.», 1961, v. 33, p. 515.
14. **Agarwal V. S., Wolf E.** «Phys. Rev. D», 1970, v. 2, p. 2161, 2178, 2206.
15. **Mehta C. L.** «J. Math. Phys.», 1964, v. 5, p. 677.
16. **Березин Ф. А.** «ТМФ», 1971, т. 6, с. 194.
17. **Березин Ф. А.** «Изв. АН СССР. Сер. мат.», 1972, т. 36, с. 1116.
18. **Клаудер Дж., Сударшан Э.** Основы квантовой оптики. Пер. с англ. М., «Мир», 1970.
19. **Глаубер Р.** Квантовая оптика и квантовая радиофизика. Пер. с англ. М., «Мир», 1966.
20. **Березин Ф. А.** «Математический сборник», 1971, т. 86, с. 578.
21. **Miller M. M., Mishkin E. A.** «Phys. Rev.», 1967, v. 164, p. 1610.
22. **Hepp K.** «Comm. Math. Phys.», 1974, v. 35, p. 265.
23. **Faddeev L. D.** In: Les Houches, Session XXVIII, 1975 — Methodes en théories des champs. Amsterdam — N.Y.— Oxford, North-Holland, 1976.
24. **Kobe D. H.** «Amer. J. Phys.», 1974, v. 42, p. 73.
25. **Kon J.** «Amer. J. Phys.», 1972, v. 40, p. 463.
26. **Маслов В. П.** Теория возмущений и асимптотические методы. М., Изд-во МГУ, 1965.
27. **Соколов С. Н.** «ТМФ», 1977, т. 32, с. 399.
28. **Grossmann A.** «Comm. Math. Phys.», 1976, v. 48, p. 191.
29. **Широков Ю. М.** «ТМФ», 1977, т. 31, с. 327.
30. **Широков Ю. М.** Там же, т. 30, с. 6.
31. **Толоконников Г. К.** Там же, т. 31, с. 256.