1981 г. Октябрь *Том 135, вып. 2*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

530.145.6

ОБОБЩЕННЫЕ КООРДИНАТЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В. Д. Кривченков

СОДЕРЖАНИЕ

Переход от классических величин к квантовым операторам обычно совершается в прямоугольных координатах. Но бывают ситуации, когда кинетическая энергия в классической механике может быть выражена только через обобщенные координаты и скорости. В качестве примера приведем выражение для кинетической энергии коллективных движений нуклонов в четно-четном аксиально-симметричном ядре [1]:

$$T=\frac{1}{2}g_{\mu\nu}\dot{q}^{\mu}\dot{q}^{\nu}=\frac{1}{2}\left(B\dot{\beta}^2+3\beta^2\dot{\theta}^2+3\beta^2\sin^2\theta\cdot\dot{\varphi}^2\right).$$

Пространство конфигураций (β, θ, φ) в этом примере не является плоским, так как тензор кривизны не равен нулю.

В том случае, когда кинетическая энергия T является однородной квадратичной формой скоростей, есть все основания полагать, что в квантовой механике оператор $\hat{T}$ есть оператор Бельтрами [2, 3]: сложнее обстоит дело в случае произвольной динамической системы. В данной работе мы покажем, как регулярным способом можно построить оператор Гамильтона и обобщенных импульсов (см. также работы [4–6]). Мы также исследуем интегралы движения произвольной динамической системы, положив в основу классическую функцию Лагранжа. В качестве иллюстрации рассмотрим динамические задачи: свободный волчок, задачу о трех частицах и задачу о вращении и малых колебаниях системы частиц.

1. ОПЕРАТОРЫ ИМПУЛЬСА И ГАМИЛЬТОНА

Найдем для произвольной динамической системы вид операторов Гамильтона и обобщенных импульсов в пространстве конфигураций. С этой целью рассмотрим классическую динамическую систему, на которую действуют силы как консервативные, так и неконсервативные (магнитное поле, кориолисовы силы инерции и т. п.). Функция Лагранжа в этом случае имеет вид

$$L=\frac{1}{2}g_{\mu\nu}\dot{q}^{\mu}\dot{q}^{\nu}+a_{\mu}\dot{q}^{\mu}+T_0-V.$$

При относительном движении T_0 представляет собой потенциал центробежной силы инерции. Вычисляя функцию Гамильтона, получим

$$H=\frac{1}{2}(p_\mu-a_\mu)\,g^{\mu\nu}(p_\nu-a_\nu)+V-T_0. \tag{1.1}$$

Пространство конфигураций Q, в котором координатами изображающей точки являются n обобщенных координат q^μ динамической системы, дает ее наиболее естественное представление. Метрика этого пространства задается при помощи линейного элемента

$$ds^2=g_{\mu\nu}dq^\mu dq^\nu \qquad (g_{\mu\nu}=g_{\nu\mu}).$$

В пространстве Q коммутационные соотношения для обобщенных импульсов и координат будем считать такими же, как и в евклидовом пространстве для прямоугольных координат. Из этого предположения следует, что

$$\hat{p}_{(\mu)}=-i\frac{\partial}{\partial q^\mu}+\frac{\partial F}{\partial q^\mu}=e^{-iF}\left(-i\frac{\partial}{\partial q^\mu}\right)e^{iF} \qquad (\hbar=1).$$

Полагая $F=f-i\ln c$, имеем

$$\hat{p}_{(\mu)}=e^{-if}c^{-1}\left(-i\frac{\partial}{\partial q^\mu}\right)ce^{if}.$$

С помощью унитарного преобразования можно исключить произвольную функцию f. Тогда

$$\hat{p}_{(\mu)}=c^{-1}\left(-i\frac{\partial}{\partial q^\mu}\right)c. \tag{1.2}$$

В квантовой механике оператор $\hat{H}$, соответствующий классической функции H (1.1), будем искать в следующем виде:

$$\hat{H}=\frac{1}{2}A(q)\,(\hat{p}_{(\mu)}+a_\mu)\,g^{\mu\nu}B(q)\,(\hat{p}_{(\nu)}a_\nu)\,D(q)+V-T_0. \tag{1.3}$$

Из условия эрмитовости $\hat{H}$ следует, что $D=A$. Учитывая (1.2), получим

$$\hat{H}=\frac{1}{2}AC^{-1}\frac{\partial}{\partial q^\mu}g^{\mu\nu}B\frac{\partial}{\partial q^\nu}AC+iA^2Ba^\mu\frac{\partial}{\partial q^\mu}+\frac{i}{2}AC^{-1}\frac{\partial}{\partial q^\mu}(ABCa^\mu)+$$
$$+\frac{i}{2}ABC^{-1}a^\nu\frac{\partial}{\partial q^\nu}(AC)+\frac{1}{2}A^2Ba^\mu a_\mu. \tag{1.4}$$

Из требования инвариантности трех последних членов в (1.4) находим

$$A^2B=\text{const}=1,\quad ABC^{-1}=\text{const},\quad CA^{-1}=k\sqrt{g}$$

(k — постоянная величина). Из принципа соответствия следует, что в первом случае const $=1$. Подставив найденные значения A, B, C в (1.4) и (1.2), окончательно получим

$$\hat{H}=-\frac{1}{2\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q^\mu}g^{\mu\nu}\sqrt{g}\,\mu\frac{\partial}{\partial q^\nu}+ia^\mu\frac{\partial}{\partial q^\mu}+$$
$$+\frac{i}{2\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q^\mu}(\sqrt{g}a^\mu)+\frac{1}{2}a^\mu a_\mu+V-T_0, \tag{1.5}$$
$$\hat{p}_{(\mu)}=g^{-1/4}\left(-i\frac{\partial}{\partial q^\mu}\right)g^{1/4}.$$

Таким образом, из требования инвариантности только трех членов в (1.4) следует инвариантность оператора Гамильтона $\hat{H}$. Ввиду того, что $\hat{p}_{(\mu)}$ не

являются компонентами вектора, индекс μ мы заключим в скобки. Так как $g_{\mu\nu}\dot{q}^{\mu}\dot{q}^{\nu}$ является положительно определенной формой, то собственные значения оператора $\hat{H}$ (1.5) при $V = 0$, $T_0 = 0$ не отрицательны. В зависимости от топологии пространства спектр собственных значений будет или непрерывным или дискретным. При евклидовой топологии и $a_{\mu} \to 0$ на бесконечности спектр будет непрерывным. Так обстоит дело, если говорить строго математически, при движении частицы в реальном магнитном поле.

2. ИНТЕГРАЛЫ ДВИЖЕНИЯ, ЛИНЕЙНЫЕ ОТНОСИТЕЛЬНО ИМПУЛЬСОВ

Для наших целей представляют интерес лишь те интегралы движения, которые можно представить в ковариантной форме. В случае полного разделения переменных константы разделения также являются интегралами движения. Если нет циклических координат, то все эти интегралы являются квадратичными функциями импульсов, однако, так как разделения переменных происходит в определенных криволинейных системах координат, эти интегралы не могут быть представлены в ковариантной форме. Рассмотрим интегралы, линейные относительно импульсов.

При выполнении условий

$$D^{\mu;\,\nu} + D^{\nu;\mu} = D_{\nu;\,\mu} + D_{\nu;\,\mu} = 0, \tag{2.1}$$

$$D^{\mu}_{;\nu} a^{\nu} - a^{\mu}_{;\nu} D^{\nu} - g^{\mu\nu} \frac{\partial N_0}{\partial q^{\nu}} = 0, \tag{2.2}$$

$$D^{\mu} \frac{\partial}{\partial q^{\mu}} \left(V - T_0 + \frac{1}{2} a^{\nu} a_{\nu} \right) + a^{\mu} \frac{\partial N_0}{\partial q^{\mu}} = 0 \tag{2.3}$$

Величина $N = D^{\mu} p_{\mu} + N_0$ является интегралом движения классической системы (1.1).

Из условия (2.1) следует, что $D_{\mu}(q)$ образует вектор Киллинга метрики $g_{\mu\nu}(q)$. Число m независимых векторов Киллинга и n-размерность пространства Q связаны соотношением

$$m \leqslant \frac{1}{2} n (n+1).$$

Знак равенства имеет место в случае пространства постоянной кривизны [7]. Из равенства $D^{\mu;\,\nu} + D^{\nu;\,\mu} = 0$ следует, что

$$D^{\mu}_{;\mu} = 0, \tag{2.4}$$

т. е. ковариантная дивергенция контравариантного вектора Киллинга равна нулю.

В квантовой механике тензорный оператор

$$\hat{N} = \frac{1}{2} (D^{\mu} \hat{p}_{(\mu)} + \hat{p}_{(\mu)} D^{\mu}) + N_0 \tag{2.5}$$

будет также интегралом движения, если помимо равенства (2.1), (2.2) и (2.3) будут выполнены еще два условия:

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^{\nu}} [\sqrt{g} (D^{\mu;\,\nu} + D^{\nu;\,\mu})] = g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial q^{\nu}} (D^{\rho}_{;\rho}), \tag{2.6}$$

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^{\nu}} \left[\sqrt{g} \left(D^{\nu}_{;\mu} a^{\mu} - a^{\nu}_{;\mu} D^{\mu} - g^{\nu\mu} \frac{\partial N_0}{\partial q^{\mu}} \right) \right] = a^{\nu} \frac{\partial}{\partial q^{\nu}} (D^{\rho}_{;\rho}). \tag{2.7}$$

Нетрудно заметить, что с учетом (2.4) условия (2.6) и (2.7) выполняются автоматически.

Принимая во внимание (2.4), получим для $\hat{N}$ выражение следующего вида:

$$\hat{N} = -iD^{\mu}\frac{\partial}{\partial q^{\mu}} + N_0. \tag{2.8}$$

Таким образом, если N есть интеграл движения в классической механике, то соответствующий N оператор $\hat{N}$ (2.8) в квантовой механике также является интегралом движения. Заметим, что максимальное число интегралов в квантовой механике будет при движении по «инерции» в пространстве постоянной кривизны, и их число равно $\left(\frac{1}{2}\right) n\,(n+1)$, где n — размерность пространства. Если классическая скобка Пуассона

$$\{NM\} = K, \tag{2.9}$$

где $N = D^{\mu}p_{\mu} + N_0$, $M = E^{\mu}p_{\mu} + M_0$, $K = F^{k}p_{k} + K_0$, а $D^{\mu}_{;\mu} = 0$, $E^{\mu}_{;\mu} = 0$, то

$$F^{\mu}_{;\mu} = 0 \text{ и } [\hat{N}\hat{M}] = -i\hat{K}. \tag{2.10}$$

Рассмотрим простой пример. Кинетическая энергия твердого тела с моментами инерции $I_1 = I_2 = I_3 = I$, выраженная через углы Эйлера и их производные, имеет вид

$$T = \frac{I}{2}(\dot{\theta}^2 + \dot{\psi}^2 + \dot{\varphi}^2 + 2\dot{\psi}\dot{\varphi}\cos\theta). \tag{2.11}$$

Пространство Q в (2.11) не является плоским. Тензор Риччи и тензор Римана — Кристоффеля в данном случае можно представить в виде

$$R_{\mu\nu} = -(N-1)\,Kg_{\mu\nu}, \quad R_{\mu\nu\rho\sigma} = K\,(g_{\rho\nu}g_{\mu\sigma} - g_{\sigma\nu}g_{\mu\rho}),$$

где $N = 3$, $K = -1/4$.

Следовательно, пространство Q является пространством постоянной кривизны. Найдем интегралы движения, которые представляют собой проекции момента на подвижные и неподвижные оси.

Из (2.11) следует, что

$\dot{\theta} = I^{-1}p_{\theta}$, $\dot{\psi} = (I\sin^2\theta)^{-1}\cdot(p_{\psi} - p_{\varphi}\cos\theta)$, $\dot{\varphi} = (I\sin^2\theta)^{-1}\cdot(p_{\varphi} - p_{\psi}\cos\theta)$.

Проекции момента $J_{(1)}$, $I_{(2)}$, $J_{(3)}$ на подвижные оси $J_{(1)} = I\omega_1$, $J_{(2)} = I\omega_2$, $I_{(3)} = I\omega_3$ или

$$\left.\begin{aligned} J_{(1)} &= D^{\mu}_{(1)}p_{\mu} = \cos\varphi\cdot p_{\theta} + \frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\,p_{\psi} - \operatorname{ctg}\theta\cdot\sin\varphi\cdot p_{\varphi},\\ J_{(2)} &= D^{\mu}_{(2)}p_{\mu} = -\sin\varphi\cdot p_{\theta} + \frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\,p_{\psi} - \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\cdot p_{\varphi},\\ J_{(3)} &= D^{\mu}_{(3)}p_{\mu} = p_{\varphi}. \end{aligned}\right\} \tag{2.12}$$

На основании (2.8) для операторов проекции момента в подвижной системе координат имеем следующие выражения:

$$\left.\begin{aligned} \hat{J}_{(1)} &= -i\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi} - \operatorname{ctg}\theta\cdot\sin\varphi\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\ \hat{J}_{(2)} &= -i\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi} - \operatorname{ctg}\theta\cdot\cos\varphi\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\ \hat{J}_{(3)} &= -i\frac{\partial}{\partial\varphi}. \end{aligned}\right\} \tag{2.13}$$

Рассматривая проекции ω на неподвижные оси, аналогичным способом получим

$$J_{(x)} = D^{\mu}_{(x)}p_{\mu} = \cos\psi\cdot p_{\theta} - \operatorname{ctg}\theta\cdot\sin\psi\cdot p_{\psi} + \frac{\sin\psi}{\sin\theta}\,p_{\varphi},$$

$$J_{(y)} = D^{\mu}_{(y)} p_{\mu} = \sin\psi \cdot p_{\theta} + \operatorname{ctg}\theta \cdot \cos\psi \cdot p_{\psi} - \frac{\cos\psi}{\sin\theta} p_{\varphi},$$

$$J_{(z)} = D^{\mu}_{(z)} p_{\mu} = p_{\psi}.$$

В квантовой механике

$$\hat{J}_x = -i\left(\cos\psi \frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta \cdot \sin\psi \frac{\partial}{\partial\psi} + \frac{\sin\psi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

и т. д.

Коммутационные соотношения легко получить, воспользовавшись (2.9). Максимально симметричное трехмерное пространство в (2.11) имеет шесть независимых векторов Киллинга: $D^{\mu}_{(1)}$, $D^{\mu}_{(2)}$, $D^{\mu}_{(3)}$, $D^{\mu}_{(x)}$, $D^{\mu}_{(y)}$, $D^{\mu}_{(z)}$. Заметим, что хотя (2.11) описывает свободное движение, оператор $\hat{T}$ имеет дискретный спектр. Это связано с топологическими особенностями пространства вращений [8].

В заключение рассмотрим две частные динамические задачи.

3. ТРИ ЧАСТИЦЫ

Для описания движения трех частиц введем координаты Якоби:

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_3 - \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{R}_c = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2 + m_3\mathbf{r}_3}{m_1 + m_2 + m_3}.$$

Кинетическая энергия системы равна

$$T = \frac{1}{2}\left[\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{m_3(m_1 + m_2)}{m_1 + m_2 + m_3}\dot{\mathbf{r}}^2 + (m_1 + m_2 + m_3)\dot{\mathbf{R}}_c^2\right].$$

Поместим начало координат в центре масс ($\mathbf{R}_c = 0$) и положим

$$\frac{m_3(m_1 + m_2)}{m_1 + m_2 + m_3} = 1, \quad \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \mu;$$

тогда

$$T = \frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2}\dot{\mathbf{r}}^2. \tag{3.1}$$

Таким образом, исключив координаты центра масс, мы свели задачу к задаче движения двух квазичастиц с массами μ и 1.

При выборе переменных R, θ, φ, x, y, z (в неподвижном пространстве Σ) потенциальная энергия будет зависеть от углов, чтобы избежать этого, введем подвижную систему координат Σ'. Ось z системы Σ' направим вдоль вектора $\mathbf{R}$. Положение $\mathbf{R}$ в Σ характеризуется углами θ, φ. Будем считать, что Σ' получена из Σ посредством последовательных поворотов на углы Эйлера $\left(\varphi + \frac{\pi}{2}, \theta, 0\right)$. В задаче о движении частицы в поле двух центров используется эллиптическая система координат, начало которой делит пополам прямую, соединяющую центры. Вследствие этого заменим

$$\mathbf{r} \to \mathbf{r} + aR\mathbf{k} \quad \left(a = \frac{m_1 - m_2}{2(m_1 + m_2)}\right).$$

Компоненты угловой скорости $\boldsymbol{\omega}$ в Σ' равны $(\dot{\theta}, \dot{\varphi}\sin\theta, \dot{\varphi}\cos\theta)$. Абсолютную скорость $\dot{\mathbf{r}}$ в (3.1) представим в виде суммы относительной и переносной скоростей:

$$\dot{\mathbf{r}} \to \dot{\mathbf{r}} + [\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r} + aR\mathbf{k})] + a\dot{R}\mathbf{k}$$

(теперь $\dot{\mathbf{r}}$ означает скорость в Σ', а $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ — единичные орты подвижной системы координат). При такой замене функция Лагранжа равна

$$L = \frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{r}} + [\omega(\mathbf{r} + aR\mathbf{k})] + a\dot{R}\mathbf{k})^2 - V(R, x, y, z). \quad (3.2)$$

Вычисляя функцию Гамильтона, получим

$$H = \frac{1}{2\mu}\Big[(P_R - ap_z)^2 + R^{-2}(p_\theta - l_x + aRp_y)^2 + \\ + R^{-2}\sin^{-2}\theta\,(p_\varphi - l_y\sin\theta - l_z\cos\theta - aRp_x\sin\theta)^2\Big] + \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 + V(R, x, y, z) \quad (3.3)$$

(p_x, p_y, p_z; l_x, l_y, l_z — проекции на подвижные оси импульса и момента импульса второй квазичастицы). Фундаментальный определитель

$$g = R^4\sin^2\theta.$$

Функции Гамильтона (3.3) в квантовой механике соответствует оператор $\hat{H}$ ($\hbar = 1$):

$$\hat{H} = -\frac{1}{2\mu}\Big[\Big(\frac{\partial}{\partial R} - iaR\hat{p}_z\Big)^2 + 2R^{-1}\Big(\frac{\partial}{\partial R} - iaR\hat{p}_z\Big) + \\ + R^{-2}\Big(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\hat{l}_x + iaR\hat{p}_y\Big)^2 + R^{-2}\operatorname{ctg}\theta\cdot\Big(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\hat{l}_x + iaR\hat{p}_y\Big) + \\ + R^{-2}\sin^{-2}\theta\Big(\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\hat{l}_z\cos\theta - i\hat{l}_y\sin\theta - iaR\sin\theta\cdot\hat{p}_x\Big)^2\Big] + \\ + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{p}}^2 + V(R, x, y, z). \quad (3.4)$$

Другой способ построения оператора $\hat{H}$ указан в работе [9].

Полный момент системы равен сумме моментов двух квазичастиц. Проекции момента первой на подвижные оси равны ($\mu R^2\dot{\theta}$, $\mu R^2\sin\theta\cdot\dot{\varphi}$, 0), а второй ($l_x = aRp_y$, $l_y + aRp_x$, l_z) Величины l_x, l_y, l_z суть проекции момента относительно точки, сдвинутой от начала по оси z на расстоянии aR.

Так как

$$p_\theta = \mu R^2\dot{\theta} + l_x - aRp_y,$$
$$p_\varphi = \mu R^2\sin^2\theta\cdot\dot{\varphi} + l_y\sin\theta + l_z\cos\theta + aRp_x\sin\theta,$$

то квадрат полного момента равен

$$\mathbf{K}^2 = p_\theta^2 + \sin^{-2}\theta\,(p_\varphi - l_z\cos\theta)^2 + l_z^2. \quad (3.5)$$

Проекции полного момента в Σ' равны

$$\left.\begin{aligned} K_x &= -\sin\varphi\cdot p_\theta - \operatorname{ctg}\theta\cdot\cos\varphi\cdot(p_\varphi - l_z\cos\theta) + \sin\theta\cdot\cos\varphi\cdot l_z, \\ K_y &= \cos\varphi\cdot p_\theta - \operatorname{ctg}\theta\cdot\sin\varphi\cdot(p_\varphi - l_z\cos\theta) + \sin\theta.\sin\varphi\cdot l_z, \\ K_z &= p_\varphi. \end{aligned}\right\} \quad (3.6)$$

Функции D^μ в (3.6) удовлетворяют условию (2.4). Следовательно, в квантовой механике ($\hbar = 1$)

$$\left.\begin{aligned} \hat{K}_x &= i\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\cdot\cos\varphi\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\hat{l}_z, \\ \hat{K}_y &= -i\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\cdot\sin\varphi\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\hat{l}_z, \\ \hat{K}_z &= -i\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned}\right\} \quad (3.7)$$

(здесь $\hat{l}_z$ — проекция в Σ', а $\hat{K}_x$, $\hat{K}_y$, $\hat{K}_z$ в Σ'). Заменяя в (3.5) физические величины операторами, получим

$$\hat{\mathbf{K}}^2 = -\left[\sin^{-1}\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \sin^{-2}\theta \left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\hat{l}_z\cos\theta\right)^2\right] + \hat{l}_z^2. \qquad (3.8)$$

В случае двухатомной молекулы можно считать, что центр масс совпадает с центром масс ядер. В этом случае, полагая $a = 0$ и заменяя в (3.4), (3.7), (3.8) момент второй квазичастицы на сумму моментов всех электронов, а $\hat{\mathbf{p}}^2$ на $\sum_i \hat{\mathbf{p}}_i^2$, мы получим операторы $\hat{H}$, $\hat{K}_x$, $\hat{K}_y$, $\hat{K}_z$, $\hat{\mathbf{K}}^2$ для двухатомной молекулы.

4. ВРАЩЕНИЕ И МАЛЫЕ КОЛЕБАНИЯ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ

В квантовой механике мы не имеем права накладывать на систему как конечные, так и дифференциальные связи. Рассмотрим систему из частиц, которая в положении «равновесия» характеризуется моментами инерции, а отклонение от положения «равновесия» будем считать малым. Массу любой частицы при соответствующем преобразовании координат можно считать равной единице. Кинетическая энергия T системы равна

$$T = \frac{1}{2}\sum_i{}' (\dot{\mathbf{u}}_i + [\boldsymbol{\omega}\mathbf{r}_{0i}] + [\boldsymbol{\omega}\mathbf{u}_i])^2;$$

здесь $\mathbf{r}_{0i}$ и $\mathbf{u}_i$ — векторы, характеризующие положение «равновесия» и отклонение от этого положения i-й частицы в системе Σ'. Система Σ' вращается с угловой скоростью $\boldsymbol{\omega}$ относительно неподвижной системы Σ. Пренебрегая $\omega^2 u_i^2$, $\omega^2 u_i r_{0i}$ и учитывая, что [10]

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_i [\mathbf{r}_{0i}\mathbf{u}_i] = 0,$$

получим

$$T = \frac{1}{2}\sum_i (\dot{\mathbf{u}}_i + 2\boldsymbol{\omega}\,[\mathbf{u}_i\dot{\mathbf{u}}_i])^2 + T_0;$$

T_0 — кинетическая энергия гироскопа. Введем нормальные координаты

$$\mathbf{u}_i = \sum_\alpha \mathbf{a}_{i\alpha} q_\alpha.$$

В этом случае

$$T = \frac{1}{2}\sum_\alpha \dot{q}_\alpha^2 + \boldsymbol{\omega}\sum_\alpha\sum_\beta \mathbf{b}_{\alpha\beta} q_\alpha \dot{q}_\beta + T_0,$$

где $\mathbf{b}_{\alpha\beta} = \sum_i [\mathbf{a}_{i\alpha}\mathbf{a}_{i\beta}] = -\mathbf{b}_{\beta\alpha}$ и $\sum_i \mathbf{a}_{i\alpha}\mathbf{a}_{i\beta} = \sigma_{\alpha\beta}$. Обратим внимание на то, что $|\mathbf{b}_{\alpha\beta}| \leqslant 1$. Если при фиксированных α и β

$$\mathbf{a}_{i\alpha} \perp \mathbf{a}_{i\beta}, \qquad |\mathbf{a}_{i\alpha}| = |\mathbf{a}_{i\beta}|, \qquad [\mathbf{a}_{i\alpha}\mathbf{a}_{i\beta}] = a_{i\alpha}^2\mathbf{n}$$

и единичный вектор $\mathbf{n}$ не зависит от i, то в этом и только в этом случае $|\mathbf{b}_{\alpha\beta}| = 1$.

В случае симметричного гироскопа

$$T = \frac{1}{2}\sum_\alpha \dot{q}_\alpha^2 + \boldsymbol{\omega}\sum_\alpha\sum_\beta \mathbf{b}_{\alpha\beta} q_\alpha \dot{q}_\beta + \\ + \frac{1}{2} I_1 (\dot{\psi}^2 \sin^2\theta + \dot{\theta}^2) + \frac{1}{2} I_3 (\dot{\psi}\cos\theta + \dot{\varphi})^2. \qquad (4.1)$$

Из 4.1) следует, что

$$p_\varphi = I_3 (\dot\psi \cos\theta + \dot\varphi) + l_z,$$
$$p_\theta = I_1\dot\theta + l_x \cos\varphi - l_y \sin\varphi,$$
$$p_\psi = I_1\dot\psi \sin^2\theta + I_3 (\dot\psi \cos\theta + \dot\varphi) \cos\theta + l_x \sin\theta\cdot\sin\varphi + l_y \sin\theta \cos\varphi + l_z \cos\theta;$$

здесь l_0, l_y, l_z — проекции «колебательного момента» на подвижные оси:

$$l_x = \sum_\alpha \sum_\beta b^{(x)}_{\alpha\beta} q_\alpha p_\beta \quad \text{и т. д.}$$

(членами вида $\omega^2 q_\alpha q_\beta$ мы пренебрегли).
Заменяя в (4.1) скорости на импульсы, получим

$$T = \frac{1}{2} \sum p_\alpha^2 + \frac{1}{2I_1} [(\mathbf{J}^2 - J_z^2) + l_x^2 + l_y^2 - 2 (J_x l_x + J_y l_y)] + \frac{1}{2I_3} (J_z - l_z)^2.$$

В квантовой механике надо физические величины заменить соответствующими операторами.

Так как $|\mathbf{b}_{\alpha\beta}| \leqslant 1$, то собственное значение $\hat l_z$ не равно, вообще говоря, целому числу. В случае линейной молекулы $\mathbf{b}_{\alpha\beta} = \mathbf{n}$ ($\mathbf{n}$ — единичный вектор, направленный вдоль оси молекулы), $\hat l_\alpha^{(z)} = x_\alpha p_{y\alpha} - y_\alpha p_{x\alpha}$, и собственные значения $\hat l_\alpha^{(z)}$ — целые числа.

Таким образом, исходя из функции Лагранжа в обобщенных координатах, мы построили операторы Гамильтона и операторы обобщенных импульсов. Мы доказали, что операторы, соответствующие интегралам движения в классической механике, линейным относительно импульсов, будут интегралами и в квантовой механике.

Автор глубоко благодарен М. А. Либерману и Л. П. Питаевскому за ценные советы и полезные обсуждения.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Давыдов А. С. Теория атомного ядра.— М.: Физматгиз, 1958.— С. 109.
2. Паули В. Общие принципы волновой механики.— М.: Гостехиздат, 1947.— С. 68.
3. Ферми Э. Квантовая механика.— М.: Мир, 1965.— С. 25.
4. Grouber G. R.— Intern. J. Theor. Phys., 1972, v. 6, p. 31.
5. Grouber G. R.— Ibid., 1973, v. 7, p. 253.
6. Grouber G. R.— Foundation Phys., 1976, v. 6, p. 111.
7. Вейнберг С. Гравитация и космология.— М.: Мир, 1975.— Гл. 13.
8. Синг Дж. Л. Классическая динамика.— М.: Физматгиз, 1963. — § 63.
9. Виницкий С. И., Пономарев Л. И.— ЯФ, 1974, т. 20, с. 576.
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика.— М.: Наука, 1973.— С. 93.