Рішенням Вченої ради ІФКС НАН України від 16 травня 2011 р. звання Doctor honoris causa присвоєно Іванові Вакарчукові (Львівський національний університет імені Івана Франка) за розробку мікроскопічної теорії бозе-рідини, статистичної теорії невпорядкованих систем, розвиток математичних методів теоретичної фізики, теорії зоряних спектрів і фундаментальних проблем квантової інформатики, а також за діяльність з організації вищої школи у Львові та Україні і внесок у становлення Інституту фізики конденсованих систем НАН України.

30 вересня 2011 року відбулася Церемонія вручення диплома. Професор І. О. Вакарчук прочитав інавґураційну лекцію.

ПРО ВІДПОВІДНІСТЬ МІЖ КЛАСИЧНИМИ ФІЗИЧНИМИ ВЕЛИЧИНАМИ ТА КВАНТОВОМЕХАНІЧНИМИ ОПЕРАТОРАМИ

І. О. Вакарчук

Кафедра теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка

1. Передусім складаю сердечну подяку членам Вченої Ради Інституту за таку високу честь, виявлену мені присвоєнням найвищої академічної відзнаки “Doctor Honoris Causa” Інституту фізики конденсованих систем. Дякую також тим людям, які зініціювали це присвоєння.

У цьому інституті я робив перші кроки в науці під керівництвом Ігоря Рафаїловича Юхновського і в дискусіях зі своїми колегами. Тоді нас усіх об’єднувало нестримне прагнення до пізнання Природи та надмірна працездатність. Ми були в міру амбітні. З ностальгійною щемою та глибокою вдячністю до свого вчителя і до своїх колег згадую ті щасливі часи, коли наші амбіції були звернені лише в майбутнє. Набуті тоді знання та досвід у науці й у житті значною мірою і сьогодні забарвлюють мою наукову, державну і громадську діяльність.

За багатосотлітньою академічною традицією, я зараз переходжу до оголошення своєї інавгураційної лекції. Щодо теми. Якщо брати до уваги те формулювання, з яким Вчена рада Інституту присвоїла мені це високе звання, то була можливість представити Вам або мої останні наукові результати, наприклад, з теорії рідкого ^{4}He (зокрема, дуже цікаві результати з побудови з перших принципів теорії теплоємності бозе-рідини в широкотемпературному діапазоні, включаючи точку λ-переходу) — те, чим я, поза багатьма дослідженнями в інших напрямах, займаюсь упродовж усього свого наукового життя з різною інтенсивністю в різні періоди, починаючи з аспірантських часів. Це, так би мовити, мої “Абу-Касимові капці”, або предметом сьогоднішньої розмови може бути загальніша тема, яка, можливо, є цікавішою для широкої аудиторії. Я вибрав другий шлях і пропоную обговорити те, що стосується фундаментальних принципів квантової механіки. Це ще одна ділянка моїх наукових інтересів — квантова теорія, де я “торкався” і фундаментальних принципів, а також запропонував і розв’язав немало цікавих задач. Моє повідомлення присвячене одній із проблем квантової механіки: відповідності між класичними фізичними величинами та квантовомеханічними операторами. Спонукало мене до розгляду цієї проблеми те, що її обговорення виникає час до часу в наукових публікаціях при появі нових фізичних задач.

2. На перший погляд, заанансоване питання просте і зрозуміле — адже фізичні величини у класичній механіці є функціями канонічно спряжених узагальнених координат q та імпульсів p. Перехід до квантового опису формально здійснюємо заміною величин q і p операторами $\hat{q}$ і $\hat{p}$ та заміною класичної дужки Пуассона $\{q, p\} = 1$ на квантову — $[\hat{q}, \hat{p}]/i\hbar = 1$ з наступним знаходженням власних значень відповідної фізичної величини. Однак інколи при застосуванні такого рецепта виникають несподіванки.

Почнемо нашу розмову з такого поняття механічної системи, як “гамільтоніан”. У класичному випадку є прості рецепти написання функції Гамільтона. Причому важливим є зіставити кількість ступенів вільності системи з такою ж кількістю незалежних змінних, які входять до гамільтоніана. Як правило, в ролі таких незалежних змінних беруть декартові координати. Кінетичну енерґію при цьому записуємо сумою квадратів компонент імпульсу. Перехід до квантовомеханічного опису системи здійснюємо зіставленням функції Гамільтона H з квантовомеханічним оператором Гамільтона $\hat{H}$, власні значення якого дають спектр можливих значень енерґії системи. Однак не завжди таке зіставлення просте й однозначне. Один із способів, який запронував Г. Вейль [11], є лише звичайною домовленістю, а не теоретично обґрунтованою процедурою, що випливає із засадничих фізичних принципів.

Є задачі, у яких зручніше працювати не в декартових, а в криволінійних чи в узагальнених координатах, кількість яких збігається з кількістю ступенів вільності системи. Наприклад, коли на систему накладаються в’язі. Ж. Л. Лаґранж у своїй “Аналітичній механіці”, яка вийшла 1788 року, писав, що “уся справа зводиться до того, щоб декартові змінні звести до якомога меншої кількості змінних, користуючись рівняннями в’язів, що задані природою кожної задачі” [1]. Сила й універсальність лаґранжевого підходу полягає в тому, що цим методом можна розв’язувати і немеханічні задачі. Наприклад, відповідно вибравши узагальнені координати і швидкості в задачі про електричний коливний контур, можна звести її дослідження до розв'язку рівнянь Лаґранжа, що випливають із принципу найменшої дії, взявши функцію Лаґранжа

$$L = \mathcal{L}\dot{q}^2/2 - q^2/2C,$$

q — заряд, C — ємність конденсатора, $\mathcal{L}$ — індуктивність котушки. Величини q, $\dot{q}$ і відіграють у цій задачі роль узагальненої координати й узагальненої швидкості. Рівняння Лаґранжа описують коливання заряду в такій системі з частотою $\omega = 1/\sqrt{\mathcal{L}C}$. Можна ввести нелінійність у цю систему через потік магнітної індукції (наприклад, уведенням у котушку сердечника) чи через зв'язок із механічною коливною системою [2]. Ми не обговорюємо тут "потрібність" чи "штучність" квантово-механічного узагальнення цих класичних задач, сподіваючись, що дослід може "підкидати" такі задачі в найнесподіваніший спосіб.

Інший приклад — це рівняння Максвелла для електромагнітного поля. Якщо гамільтоніан поля в об'ємі V записати як

$$H = \frac{1}{8\pi}\int\limits_V \left[\frac{1}{c^2}\dot{\mathbf{A}}^2 + (\mathrm{rot}\,\mathbf{A})^2\right] d\mathbf{r},$$

c — швидкість світла, то коефіцієнти розкладу $\mathbf{a_k}$ векторного потенціалу $\mathbf{A}$ в ряд Фур'є відіграють роль узагальнених координат, а величини $\dot{\mathbf{a}}_\mathbf{k}$ — роль узагальнених швидкостей. Цей зв'язок уперше показав ірландський фізик Дж. Ф. Фітцджеральд у 1880 році. Хоча перші способи написати рівняння поширення світла в оптичному середовищі з чисто механічних уявлень запровадив ще в 1839 році Мак-Келлох.

Отже, ні в першому, ні в другому випадку ми не зможемо від узагальнених координат "повернутися" до декартових, оскільки нічого спільного з ними вони не мають. Тому, щоб не зменшувати загальності застосування рівняння Лаґранжа чи рівнянь Гамільтона, ми повинні формулювати і квантові задачі в термінах узагальнених координат, якими б не були ці об'єкти. Це значною мірою виправдовує погляди тих учених, які вважають, що механіка є основою фізики. Говорячи про все новіші ділянки поширення методу Лаґранжа, а точніше принципу найменшої дії, Фелікс Клейн у своїх лекціях із розвитку математики в XIX столітті [3] писав так: "У ґрунті речі це явище являє собою не що інше, як розвиток старого, створеного ще Лаґранжем формального методу, який потрібно наповнити новим ідейним змістом, але оволодіння цим матеріалом і навіть його пізнання було би зовсім чужим творцеві цього методу. Останнім тріумфом такої системи було досягнення у фізичній хімії американця Ґіббса. Що сказав би Лаґранж, якщо б дожив до того часу, що його параметру q нададуть значення процентного вмісту йоду в деякій сполуці?"

3. Надалі говоримо мовою конкретних прикладів.

Розгляньмо "шкільний" приклад — добре відому класичну задачу про циклоїдальний маятник.

Частинка маси m, що рухається по циклоїді у вертикальній площині в однорідному полі тяжіння напруженості g:

$$x = a(\varphi + \sin\varphi), \quad y = a(1 - \cos\varphi), \quad -\pi \le \varphi \le \pi,$$

a — радіус кола, що творить циклоїду (довільна точка на периметрі кола, яке котиться по прямій лінії, описує циклоїду), кут φ визначає поворот кола навколо його центра відносно осі y.

Класичну функцію Гамільтона цієї двовимірної системи, що має один ступінь вільності внаслідок виписаної вище в'язі, записуємо так:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + mgy,$$

$p_x = m'\dot{x}, \quad p_x = m'\dot{y},$ — проекція імпульсу в декартових координатах.

Стандартними вправами цей гамільтоніан легко записати через узагальнену координату φ:

$$H = \frac{p_\varphi^2}{8ma^2\cos^2\varphi/2} + 2mga\sin^2\frac{\varphi}{2},$$

де p_φ — імпульс, спряжений до криволінійної координати, тобто кута φ.

Як перейти до квантового опису? Потрібно класичним величинам φ, p_φ, H поставити у відповідність оператори. У φ-представленні оператор $\hat{p}_\varphi = -i\hbar\, d/d\varphi$. А що робити з оператором кінетичної енергії в $\hat{H}$? Маємо некомутуючі величини $\hat{p}_\varphi$ і $1/\cos^2\varphi/2$. Де ставити оператор $\hat{p}_\varphi$? Очевидно, що потрібно якось симетризувати ці величини в кінетичній енергії, тому що оператор $\hat{H}$ повинен бути ермітовим. Є багато варіантів:

$$\frac{1}{\cos\frac{\varphi}{2}}\hat{p}_\varphi^2\frac{1}{\cos\frac{\varphi}{2}}, \quad \hat{p}_\varphi\frac{1}{\cos^2\frac{\varphi}{2}}\hat{p}_\varphi, \quad \frac{1}{2}\left(\hat{p}_\varphi^2\frac{1}{\cos^2\frac{\varphi}{2}} + \frac{1}{\cos^2\frac{\varphi}{2}}\hat{p}_\varphi^2\right), \quad \frac{1}{\sqrt{\cos\frac{\varphi}{2}}}\hat{p}_\varphi\frac{1}{\cos\frac{\varphi}{2}}\hat{p}_\varphi\frac{1}{\sqrt{\cos\frac{\varphi}{2}}}, \ldots .$$

Який із них вибрати, адже від цього вибору залежатимуть власні значення енергії системи? Зрозуміло, що вирішальне слово тут за експериментом [4].

4. Розгляньмо ще один приклад, а саме: такий інтригуючий об'єкт, як шварцшільдівську чорну діру. Динаміку такої системи можна описувати класичною функцією Гамільтона [5]:

$$H = \frac{p^2}{2q} + \frac{q}{2},$$

де H — має зміст шварцшільдівської маси, а величина q — це радіус кривизни, p — імпульс, спряжений до координати q. Величини вимірюються у планківській шкалі: планківська довжина $\sqrt{\hbar G/c^3}$, планківська маса $\sqrt{\hbar c/G}$.

Для квантового опису потрібно записати оператор Гамільтона.

Ми знову стоїмо перед неоднозначністю в записі кінетичної енергії. Можливі такі розташування в операторі Гамільтона:

$$\hat{p}\frac{1}{q}\hat{p}, \quad \frac{1}{2}\left(\hat{p}^2\frac{1}{q} + \frac{1}{q}\hat{p}^2\right), \quad \frac{1}{q^{1/4}}\hat{p}\frac{1}{\sqrt{q}}\hat{p}\frac{1}{q^{1/4}}, \ldots .$$

5. Можна навести ще кілька прикладів, коли кінетична енергія залежить не лише від квадрата імпульсу, але й від координат. Зокрема, коли йдеться про наногетеросистеми. Тоді в кожному шарі маємо різну ефективну масу частинки , що рухається в такій системі. Отже, в класичному випадку функція Гамільтона

$$H = \frac{p^2}{2m(x)} + U(x),$$

і ми знову зіштовхуємося з проблемою взаємного розташування оператора імпульсу $\hat{p} = -i\hbar d/dx$ і ефективної маси $m = m(x)$:

$$\hat{p}\frac{1}{m}\hat{p}, \quad \frac{1}{2}\left(\hat{p}^2\frac{1}{m} + \frac{1}{m}\hat{p}^2\right), \quad \frac{1}{m^{1/4}}\hat{p}\frac{1}{\sqrt{m}}\hat{p}\frac{1}{m^{1/4}}, \ldots .$$

Як можна виплутатись із цього? Саме про це ми й поведемо мову.

6. Отже, кожній класичній функції Гамільтона відповідає назагал декілька квантовомеханічних операторів:

$$H = H(q,p) \to \hat{H}(\hat{q},\hat{p}), \hat{H}'(\hat{q},\hat{p}), \hat{H}''(\hat{q},\hat{p}), \ldots .$$

Із цього розмаїття операторів енергії потрібно вибрати той, який даватиме спостережувані значення енергії E_n квантової системи.

Перед тим як продовжувати розмову, зробимо "репліку вбік". Наближено рівні енергії ми можемо знайти з квазікласичних умов квантування Бора–Зоммерфельда. Оскільки цей наближений метод не потребує введення операторів, а оперує класичними виразами для енергії системи, то ми можемо знаходити рівні енергії зразу з класичної функції Гамільтона. Зокрема, для шварцшільдівської чорної діри легко знайти, що

$$E_n = \sqrt{n + 1/2}, \quad n = 1, 3, 5, \ldots .$$

Підкреслимо, що квазікласичні рівні є точними в границі великих значень квантових чисел. Тому точні вирази для E_n повинні переходити у квазікласичні при $n \gg 1$. Отже, питання неоднозначності зіставлення фізичних величин з квантовомеханічними операторами є важливим для нижніх квантових станів (тобто малих квантових чисел).

7. Повертаємося до нашої проблеми. Ще раз наголосимо на особливому статусі декартової системи координат, на її вирізненості серед інших, оскільки в ній кінетична енерґія є звичайним квадратом імпульсу. І отже, взагалі кажучи, лише в декартовій системі координат вимірювання імпульсу дає змогу обчислити й кінетичну енерґію. У криволінійних координатах, очевидно, так не буде, бо кінетична енерґія є квадратичною функцією компонент імпульсу і залежить як від імпульсу, так і від координат, які, відповідно до принципу невизначеностей Гайзенберґа, одночасно виміряти неможливо.

Виділенність декартових координат ще й у тому, що при їх застосуванні не виникає двозначності під час зіставлення класичної функції Гамільтона з квантовим оператором. В. Паулі [6] радить у випадках, коли виникає двозначність стосовно послідовності множників, залежних від q і p при переході від класичного до квантового опису, повертатися від криволінійних координат до декартових, посилаючись на працю Б. Подольського [7], який звичайним переходом до диференціювання в криволінійних координатах вивів такий запис гамільтоніана:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} g^{-1/4} \hat{p}_i g^{1/2} g^{ik} \hat{p}_k g^{-1/4} + U,$$

де g^{ik} — метричний тензор, g — детермінант матриці g_{ik}, U — потенціальна енерґія частинки. При цьому хвильова функція, що залежить від криволінійних координат, є шрединґерівською, тобто нормується без вагової функції, якою є якобіан переходу $J = \sqrt{g}$ від декартових до криволінійних координат. У класичному випадку гамільтоніан зводиться до

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} g^{ik} p_i p_k + U.$$

Цю ж формулу наводив у своїх лекціях (якщо враховувати умову нормування хвильової функції) й Енріко Фермі [7].

Пропонуємо вибрати й серед узагальнених координат такі, які також мають особливий статус, подібно до декартових координат. Відштовхуючись від цього, запропонуємо такий шлях зіставлення класичної функції Гамільтона H з квантовомеханічним оператором $\hat{H}$. Стартуємо з функції Лаґранжа $L = L(q, \dot{q})$, в якій переходимо до таких узагальнених координат та швидкостей $Q, \dot{Q}$, щоб кінетична енерґія у функції Лаґранжа була записана як квадрат узагальненої швидкості, якщо це взагалі можливо. Відтак, оскільки узагальнений імпульс $P = \dot{Q}$, знаходимо класичну функцію Гамільтона й уже однозначно зіставляємо з нею відповідний оператор $\hat{H}$.

8. Повернімось до циклоїдального маятника. Зручно за узагальнену координату вибрати довжину дуги циклоїди (відраховуючи її відносно початку координат $\varphi = 0$):

$$Q = 4a \sin \frac{\varphi}{2}.$$

У цих координатах функція Лаґранжа

$$L = \frac{\dot{Q}^2}{2} - \frac{m\omega^2}{2} Q^2.$$

Знаходимо узагальнений імпульс

$$P = \dot{Q} = 2a\dot{\varphi} \cos \frac{\varphi}{2} = \frac{p_\varphi}{2a \cos \varphi/2},$$

і функцію Гамільтона H:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}Q^2.$$

Далі можна знайти й оператор Гамільтона для циклоїдального маятника:

$$H = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}Q^2, \quad -4a \le Q \le 4a,$$

причому $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar$, а оператор імпульсу

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2a\cos\varphi/2}}\hat{p}_\varphi\frac{1}{\sqrt{2a\cos\varphi/2}}$$

або

$$\hat{P} = \frac{1}{4a}\left(\hat{p}_\varphi\frac{1}{\cos\varphi/2} + \frac{1}{\cos\varphi/2}\hat{p}_\varphi\right),$$

комутатор між Q і $\hat{P}$ і в цьому випадку дорівнює $i\hbar$, а отже, власні значення енерґії не залежатимуть від вигляду оператора $\hat{P}$.

Цікаво тепер порівняти наш результат із тим, що вивів Б. Подольський [7], і перевірити, наскільки правильне наше припущення. Отже, у нашому випадку метричний тензор має одну компоненту

$$g_{\varphi\varphi} = 4\cos^2\frac{\varphi}{2}, \quad g = 4\cos^2\frac{\varphi}{2}, \quad g^{\varphi\varphi} = 1/4\cos^2\frac{\varphi}{2},$$

і ми отримаємо

$$H = \left(\frac{1}{\sqrt{2\cos\varphi/2}}\hat{p}_\varphi\frac{1}{\sqrt{2\cos\varphi/2}}\right)^2 + \frac{m\omega^2}{2}Q^2.$$

Тобто це наш результат із першим варіантом формули для узагальненого імпульсу $\hat{p}$.

Далі, наприклад, для шварцшільдівської чорної діри маємо:

$$H = \frac{p^2}{2q} + \frac{q}{2},$$

$$L = \dot{q}p - H = \frac{\dot{q}^2 q}{2} - \frac{q}{2},$$

далі

$$\dot{Q} = \dot{q}\sqrt{q}, \quad dQ = \sqrt{q}\,dq, \quad Q = \frac{2}{3}q^{3/2},$$

і в нових змінних функція Лаґранжа

$$L = \frac{\dot{Q}^2}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3}Q^{2/3}.$$

Відтак узагальнений імпульс $P = \dot{Q}$. Легко переконатися, що нова функція Гамільтона описує "обрізаний" ангармонічний осцилятор:

$$H = \frac{P^2}{2} + \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3}Q^{2/3}.$$

Класичні дужки Пуассона $\{P, Q\} = 1$. Оператор Гамільтона

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2} + \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} Q^{2/3}, \quad Q > 0,$$

$$[Q, \hat{P}] = i\hbar.$$

Можна стартувати і з класичної функції Гамільтона, вимагаючи, щоб кінетична енерґія була представлена як квадрат імпульсу

$$H = \frac{P^2}{2} + \frac{q}{2},$$

а спряжену до $P = p/\sqrt{q}$ координату Q знаходимо з умови, щоб класична дужка Пуассона дорівнювала одиниці:

$$\frac{dQ}{dq}\frac{1}{\sqrt{q}} = 1,$$

і ми приходимо до попереднього результату для оператора Гамільтона. Для оператора імпульсу маємо знову неоднозначність:

$$\hat{P} = \frac{1}{q^{1/4}}\hat{p}\frac{1}{q^{1/4}}$$

або

$$\hat{P} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{q}}\hat{p} + \hat{p}\frac{1}{\sqrt{q}}\right),$$

а оскільки комутатор, як легко показати, залишається незмінним, $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar$, то спектр власних значень оператора $\hat{H}$ також не змінюється від вигляду оператора $\hat{P}$.

Розгляньмо ще один “шкільний” приклад. Класичний опис частинки задає функція Лаґранжа (у знерозмірених одиницях) $L = \dot{x}^2/x - x$, $x > 0$. Знайти оператор Гамільтона.

За означенням, імпульс частинки $p = \partial L/\partial \dot{x} = 2\dot{x}/x$ і класична функція Гамільтона $H = \dot{x}p - L = xp^2/4 + x$. При переході від класичних величин x, p до операторів маємо в першому доданку H неоднозначність у їх розташуванні. Уведемо нові канонічно спряжені координату й імпульс Q, P, приймаючи новий імпульс таким, що

$$H = P^2/2 + x,$$

тобто $P = p\sqrt{x/2}$, а координату $Q = Q(x)$ вибираємо так, щоб класична дужка Пуассона $\{Q, P\} = 1$:

$$\sqrt{\frac{x}{2}}\frac{dQ}{dx} = 1,$$

звідси $Q = 2\sqrt{2x}$, $Q \geq 0$. У нових змінних класична функція Гамільтона

$$H = \frac{P^2}{2} + \frac{Q^2}{8}, \quad Q \geq 0$$

і відповідний квантовий оператор

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2} + \frac{\omega^2 Q^2}{2}, \quad \omega = 1/2$$

описують “обрізаний” ($Q \geq 0$) гармонічний осцилятор. Оператор імпульсу можна вибрати рівним $\hat{P} = (\hat{p}\sqrt{x} + \sqrt{x}\hat{p})/2\sqrt{2}$ або $\hat{P} = x^{1/4}\hat{p}x^{1/4}/\sqrt{2}$, причому легко перевірити, що в обох випадках комутатор $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar$. Ця неоднозначність у виборі $\hat{P}$ не впливає на спектр власних значень оператора $\hat{H}$.

Зауважимо, що періодичний рух частинки видно з розв'язку класичних рівнянь руху, $x = 1 + \sin t$ (з початковими умовами $x = \dot{x} = 1$ при $t = 0$).

Ще один приклад. Запишімо оператор Гамільтона для астроїдального маятника — частинки маси m, що рухається в однорідному полі тяжіння напруженості g по астроїді $x = a\sin^3\theta$, $y = a\cos^3\theta$, $0 \le \theta \le \pi/2$, параметр $a > 0$.

Функція Лаґранжа $L = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - mgy = \frac{m}{2}\left(\frac{3}{2}a\right)^2\dot{\theta}^2\sin^2 2\theta - mga\cos^3\theta$. Зручно вибрати за узагальнену координату Q дугу астроїди (відраховуючи її довжину від кінця):

$$Q = \frac{3}{2}a\cos^2\theta.$$

Тепер функція Лаґранжа

$$L = \frac{m}{2}\dot{Q}^2 - \alpha Q^{3/2}, \quad \alpha = \left(\frac{2}{3}\right)^{3/2} mg/\sqrt{a}.$$

Беручи до уваги, що узагальнений імпульс $P = m\dot{Q}$, легко знаходимо класичну функцію Гамільтона й відповідний її оператор

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \alpha Q^{3/2}, \quad 0 \le Q \le \frac{3}{2}a$$

— ангармонічний маятник з обмеженням на зміну координати Q.

9. На завершення нашої розмови все ж таки про мої "Абу-Касимові капці". Щодо симетризації операторів при переході від класичного опису до квантового, то цікаво навести приклад із теорії рідкого ^{4}He. М. М. Боголюбов і Д. М. Зубарв у 1955 році [8] запропонували для вивчення властивостей багатобозонних систем перейти від декартових координат частинок $(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$ до колективних координат

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}, \quad \mathbf{k} \ne 0,$$

які є компонентами Фур'є флуктуації густини частинок, де N — кількість частинок системи, $\mathbf{k}$ — хвильовий вектор.

Оператор кінетичної енерґії системи частинок у цьому представленні:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\ne 0}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(\rho_{\mathbf{k}}\frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{k}}} - \frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}}\partial\rho_{-\mathbf{k}}}\right) + \sum_{\substack{\mathbf{k}\ne 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{k}'\ne 0}}\sum_{\mathbf{k}'\ne 0}\frac{\hbar^2(\mathbf{k}\mathbf{k}')}{2m\sqrt{N}}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}\frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}}\partial\rho_{\mathbf{k}'}}.$$

Як бачимо, перший доданок тут є неермітовим (у звичайному розумінні), оскільки перехід від декартових координат до колективних неунітарний. Отже, хвильові функції в $\rho_{\mathbf{k}}$-просторі нормуються з ваговою функцією — якобіаном переходу J. Якщо перейти до опису системи зі "звичайними" шредінґерівськими хвильовими функціями, які нормуємо без вагової функції, то гамільтоніан набуває ермітового вигляду:

$$\hat{H}' = \sqrt{J}\hat{H}\frac{1}{\sqrt{J}},$$

причому з умови ермітовості знаходимо й рівняння для величини J і явний вигляд оператора $\hat{H}'$ [11]:

$$\hat{H}' = \sum_{\mathbf{k}\ne 0}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left[-\frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}} + \frac{1}{4}\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{2}\right] + \sum_{\substack{\mathbf{k}\ne 0\\ \mathbf{k}+\mathbf{k}'\ne 0}}\sum_{\mathbf{k}'\ne 0}\frac{\hbar^2(\mathbf{k}\mathbf{k}')}{2m\sqrt{N}}\rho_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}\frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}}\partial\rho_{\mathbf{k}'}}$$

$$+ \sum_{n\ge 3}\frac{(-)^n}{4n(n-1)(\sqrt{N})^{n-2}}\sum_{\substack{\mathbf{k}_1\ne 0\\ \mathbf{k}_1+\ldots+\mathbf{k}_n=0}}\cdots\sum_{\mathbf{k}_n\ne 0}\frac{\hbar^2}{2m}(k_1^2 + \ldots k_n^2)\rho_{\mathbf{k}_1}\ldots\rho_{\mathbf{k}_n}.$$

Отже, оператор гамільтона представлено безмежним рядом нелінійних доданків, які переплутують стани з різними хвильовими векторами. Саме тому задачу не вдається розв'язати точно й потрібно застосовувати різні методи теорії збурень.

10. На цьому я завершу свою розповідь про одну з найстаріших "проблем" квантової механіки.

Насправді, як виявляється, і проблеми немає. Тобто акцент потрібно робити не на тому, як загально теоретичними міркуваннями знайти вдалу процедуру зіставлення класичної системи з "відповідною" квантовомеханічною системою. Такої процедури немає, тому що вимога ермітовості, хоч і звужує клас можливих операторів, але залишає невизначеність. Цю невизначеність може зняти лише дослід. Квантові об'єкти живуть своїм різнобарвним життям, і в них, як нам добре відомо, не обов'язково існують класичні аналоги!

Ця розповідь могла би бути продовженою і про фейнманівську картину квантової механіки, тобто запровадження квантового опису через інтеґрування за шляхами, де працює лише класична функція Лаґранжа і такої неоднозначності нібито не має бути [9]. Але, як відомо, вона захована глибше. Неоднозначність перекидається на спосіб розбиття інтервалу інтеґрування за часом у функції дії [12]. Як відомо, "нечистий ховається в дрібницях"! Можна було б обговорити також і квантування в так званих деформованих просторах, у яких існує фундаментальна величина — мінімальна довжина, або з іншим окремим відгалуженням у криволінійних просторах [13, 14]. Тут насправді ми лише торкнулися цього питання, аби ще раз звернути на нього увагу.

Я складаю подяку за можливість викласти перед Вами свої міркування стосовно невеличкої, але цікавої проблеми у квантовій науці і, можливо, зацікавити цими питаннями особливо молодих людей, яких приваблює яскравий творчий шлях, що перед ними.

На початку нашої розмови я говорив про ностальгійний щем за минулим. Завершую свою розповідь тим, що саме ця невимовна болісна туга разом з неочікуванням чуда щодо заміни часу t на $(-t)$, тобто повернення до минулого, і викликає бажання творити...

Виноградів–Львів, серпень–вересень, 2011.

[1] Ж. Лагранж, *Аналитическая механика. Т. 1, Т. 2*, пер. с француз. В. С. Гохмана, под. ред. и прим. Л. Г. Лойцянского, А. И. Лурье (1 том), Г. Н. Дубошина (2 том) (Государственное изд-во технико-теоретической лит-ры, Москва–Ленинград, 1950); [Перше видання — 1788 р. Переклад з другого — 1811 р.].

[2] Н. Н. Боголюбов, *Введение в нелинейную механику* (Изд-во АН УССР, Киев, 1937); *Избранные труды в 3-х томах. Т. 1* (Наукова думка, Киев, 1969).

[3] Ф. Клейн, *Лекции о развитии математики в XIX столетии. Ч. 1*, пер. с нем. Р. Куранта, О. Нейгебауера (Государственное изд-во технико-теоретической лит-ры, Москва–Ленинград, 1937).

[4] П. А. М. Дирак, *Основы квантовой механики*, пер. с англ. М. П. Бронштейна (Государственное изд-во технико-теоретической лит-ры, Москва–Ленинград, 1932).

[5] В. Паули, *Общие принципы волновой механики*, пер. с нем. под ред. К. В. Никольского (Государственное технико-теоретическое изд-во, Москва–Ленинград, 1947).

[6] B. Podolsky, Phys. Rev. **32**, 812 (1928).

[7] Э. Ферми, *Квантовая механика (конспект лекций)* (Мир, Москва, 1968).

[8] М. Боголюбов, Д. Зубарев, Журн. эксп. теор. физ. **28**, 129 (1955).

[9] Р. Фейнман, А. Хибс, *Квантовая механика и интегралы по траекториям* (Мир, Москва, 1968).

[10] K. V. Kuchař, Phys. Rev. D **50**, 3961 (1994); J. Louko, Phys. Rev. D **54**, 4982 (1996).

[11] І. О. Вакарчук, *Квантова механіка* (ЛНУ імені Івана Франка, Львів, 2007).

[12] Л. Ф. Блажиевский, Теор. мат. физ., **40**, 51 (1979); L. F. Blazhievskii, Theor. Math. Phys., **40**, 596 (1979).

[13] B. Bagchi, A. Banerjee, C. Quesne, V. M. Tkachuk, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 2929 (2005).

[14] C. Quesne, V. M. Tkachuk, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, 4267 (2004).

ДО 80-ЛІТНЬОГО ЮВІЛЕЮ ПРОФЕСОРА МИКОЛИ ОЛЕКСІЙОВИЧА РОМАНЮКА

IN HONOUR OF PROFESSOR MYKOLA ROMANYUK ON THE OCCASION OF HIS 80th BIRTHDAY

28 серпня 2011 виповнилося 80 років докторові фізико-математичних наук, заслуженому професорові ЛНУ імені Івана Франка Романюкові Миколі Олексійовичу, який народився в селі Качанівці Підволочиського району Тернопільської області. Батьки — Текля й Олекса — працьовиті й шановані місцеві хлібороби. На думку Миколи Олексійовича, вони мали добру опінію, яка постійно підтримувала його з братом, є їхнім багатством, орієнтиром, опорою та неписаним заповітом. Він вдячний батькам за розуміння, допомогу та підтримку.

У 1949 р. Микола Романюк вступив на фізичне відділення фізико-математичного факультету Львівського державного університету імені Івана Франка і в 1954 р. закінчив фізичний факультет цього ж університету по кафедрі експериментальної фізики за спеціальністю "фізична оптика і спектроскопія". Навчався у професорів: В. С. Міліянчука, М. О. Зарицького, А. Ю. Глаубермана, С. А. Каплана; тоді у студентів відчувався особливий потяг до знань, панувала атмосфера пошани до спеціалістів, інтелектуалів, інтеліґентів.

Трудова діяльність Миколи Олексійовича пов'язана з Львівським університетом: асистент (1954 р.), доцент (1963 р.), професор кафедри експериментальної фізики (1985 р.). Він читав лекційні курси з прикладної оптики, загальної фізики для хіміків, загальної оптики для фізиків, кристалооптики, акустооптики, фізики діелектриків та вів відповідні практикуми.

Його наукова робота пов'язана з дослідженням оптичних властивостей номінально чистих й опромінених кристалів сеґнетової солі та групи тригліцинсульфату, а також чистих і змішаних кристалів групи A2BX4: двійникова будова, спектральна рефрактометрія, електронна спектроскопія, спонтанні та індуковані параметричні ефекти, кристалооптична метрологія.

Навчаючись в аспірантурі (1957–1960), експериментальну частину дисертаційної роботи "Дослідження електричної та п'єзоелектричної поляризації кристалів сеґнетової солі за спостереженнями доменної структури" вин виконував і захистив у 1962 р. в Інституті кристалографії АН СРСР (Москва), де в 1962 р. захистив дисертацію під керівництвом відомого вченого в галузі фізики сеґнетоелектриків проф. І. С. Жолудєва. Отримані експериментальні результати не втратили актуальності й сьогодні, вони значною мірою є модельними під час досліджень спонтанних та індукованих параметричних ефектів у фероїках. Використання фотографічного методу реєстрації доменної структури кристалів сегнетової солі та її змін під впливом електричного поля й механічних напруг, спряжених зі спонтанною поляризацією та деформацією зразків, дало змогу отримати одні з перших (1959 р.) даних про геометрію доменів, місця їх зародження, особливості росту та закономірності релаксації двійників. Докторську дисертацію "Оптика фазових переходів у кристалах сеґнетової солі і тригліцинсульфату" О. М. Романюк захистив у Ростовському університеті в 1984 р. У роботі встановлено прояви електронної підсистеми під час фазових переходів другого роду та її роль у таких переходах.

По закінченні аспірантури учений багато працював над організацією на кафедрі експериментальної фізики лабораторій вакуумного ультрафіолету та кристалооптики. На їхній базі розгортаються дослідження сеґнетоелектриків у Львівському університеті. Розробляються методики дослідження спектрів відбивання в ділянці до 25 еВ для різних кутів падіння, що дозволило отримати частково поляризовані спектри у ВУФ. Використання фотографічного та імерсійного методів Обреїмова для вимірювання показників заломлення дало змогу розширити досліджувані ділянки спектра й температур, що створило основи для спектральної рефрактометрії діелектричних фероїків, у т. ч. матеріалів із низькотемпературними фазовими переходами, та дозволило наблизитися до смуг фундаментального поглинання.

У результаті багаторічних досліджень уперше показано високу чутливість оптичних властивостей кристалів-фероїків з органічною підґраткою до жорсткої радіації, знайдено відповідні смуги поглинання в ультрафіолеті, на основі експерименту пов'язано їх з певними елементами радіаційної деструкції ґратки та з відповідними змінами діелектричних властивостей опромінених зразків.

Для двовісних кристалів виявлено інверсію знака двопроменезаломлення, установлено її температурно-спектральні діаграми, що охоплюють ділянки температур від 4.2 до 1000 K. На цій основі запропоновано новий метод визначення температури, створення реперних температурних точок, їх зберігання та передачу.

Виявлено аномалії п'єзооптичних коефіцієнтів під час фазових переходів, які не були передбачені наявними теоріями. Вони пояснені баричними зміщеннями температур фазових переходів і пов'язаним із цим п'єзоелектричним ефектом.

Ці роботи відкрили нову сферу застосування діелектричних кристалів, розширили можливості лазерної метрології в загалом важкій галузі термометрії, а спектральну рефрактометрію перетворили з ділянки, що давала окремі числа, у напрямок широких температурно-спектральних досліджень матеріялів та відповідних фізичних процесів. На базі згаданих лабораторій працювала активна група молодих дослідників, чотирнадцять із яких захистили кандидатські і троє докторські дисертації. Тут Микола Олексійович виступив як науковий керівник або консультант. Із цим колективом, як і з колективом кафедри в цілому, працювалося добре. Він має понад 450 публікацій, поміж ними понад 20 авторських свідоцтв на винаходи, понад 10 методичних праць, у тому числі посібники з грифом Мінвузу України ("Кристалооптика", "Акустооптика").

Поряд із науково-педагогічною роботою М. О. Романюк виконував низку обов'язків, пов'язаних із роботою факультету, а частково й університету. Працював заступником декана і деканом фізичного факультету (1964–1974) у період його зростання, зокрема будівництва та освоєння нових приміщень.

Працював заступником відповідального секретаря та відповідальним секретарем приймальної комісії університету (1967–1969) та головою місцевого комітету профспілки викладачів і працівників університету (1977–1980). На ту пору з нестандартних робіт припало будівництво й заселення житлових будинків для працівників університету, організація роботи хорової капели співробітників університету.

Тривалий час Микола Олексійович працює у спеціалізованій раді із захисту докторських дисертацій (вчений секретар, заступник голови, член Ради), є членом редколегії "Журналу фізичних досліджень" та "Вісника Львівського університету. Серія фізична". Обирався головою ревізійної комісії Українського оптичного товариства, член НТШ, член Українського фізичного товариства. Завідував кафедрою експериментальної фізики (1977–1996). За цей час викристалізувалися та зміцніли напрямки досліджень люмінесценції, спектроскопії нелінійних кристалів та спектральної рефрактометрії фероїків, захищено 7 докторських та декілька десятків кандидатських дисертацій, зареєстровано відкриття явища електрогірації у кристалах.

М. О. Романюка з повним правом можна вважати фундатором Львівської школи кристалооптики. З кафедри експериментальної фізики тоді виділилася кафедра нелінійної оптики, створено філіал кафедри на ВО "Полярон", забезпечено навчальний процес за двома спеціальностями тощо. Тепер Микола Олексійович працює професором цієї ж кафедри, у 2001 р. йому присвоєно звання заслуженого професора Львівського національного університету імені І. Франка.

Друзі та колеги щиро вітають Миколу Олексійовича з 80-літтям і бажають йому міцного здоров'я, оптимізму, талановитих учнів та довгих років творчої активності!

ОЛЕКСАНДР ІВАНОВИЧ ОЛЄМСКОЙ (1949–2011)

ALEXANDR IVANOVICH OLEMSKOI (1949–2011)

Наукова грамадськість України зазнала великої втрати — 3 серпня 2011 року після важкої хвороби помер відомий фізик-теоретик Олександр Іванович Олємской, доктор фізико-математичних наук, професор, заслужений діяч науки і техніки України.

О. І. Олємской народився 19 вересня 1949 року в селі Єкатеринівці Лискінського району Воронезької області. Після навчання у Воронезському політехнічному інституті протягом 1973–1978 років працював у науковому секторі Воронезького політехнічного інституту, у 1977 році захистив кандидатську дисертацію. Починаючи з 1978 року викладав у Балаківській філії Саратовського політехнічного інституту, був доцентом Курського політехнічного інституту. Від 1984 до 1988 рр. О. І. Олємской — науковий співробітник, завідувач лабораторії Інституту фізики міцності та матеріалознавства Сибірського відділення АН СРСР у м. Томську. У 1987 році на фізичному факультеті Московського державного університету захистив докторську дисертацію на тему "Теорія впорядкованих і гетерофазних структур із довільним масштабом неоднорідності". Матеріали цієї дисертації лягли в основу його першої книги [А. А. Кацнельсон, А. И. Олемской, *Мироксопическая теория неоднородных структур* (Москва, Изд-во Моск. ун-та, 1987)], що стала настільною у науковій групі, яку створив О. І. Олємской у м. Сумах, куди його запросили для організації відділу теоретичної фізики Сумського відділення Інституту металофізики АН УРСР (тепер — Інститут прикладної фізики НАН України). Від 1988 року життя проф. Олємского тісно пов'язане з Сумами. Від 1995 року він завідує кафедрою фізичної електроніки в Сумському державному університеті, а з 2006 року одночасно очолює лабораторію мікроструктурних досліджень реакторних матеріалів Інституту прикладної фізики НАН України. У 1997 році за успіхи в науковій та педагогічній роботі О. І. Олємскому присвоєно звання Соросівського професора, з цього ж року він член редколегії "Журналу фізичних досліджень". У 1999 р. Президія НАН України присудила О. І. Олємскому (спільно з Ю. І. Горобцем та В. Ф. Клепіковим) премію імені С. І. Пекаря за цикл праць "Фазові перетворення і неоднорідні структури у впорядкованих системах". У 2004 році йому присвоєне звання заслуженого діяча науки і техніки України, а у 2005 році його обирають іноземним членом Російської академії природничих наук (РАЕН). У 2009 р. Президія НАН України нагородила проф. Олємского нагрудним знаком "За наукові досягнення".

Діапазон наукових зацікавлень О. І. Олємского надзвичайно широкий, як з погляду об'єктів, що його цікавили, так і з точки зору різноманіття теоретичних методів, якими він досконало володів. Уміння глибоко проникати в суть досліджуваних явищ, вловлювати їхні найсуттєвіші риси й майстерно створювати відповідні моделі, володіння стилем наукової розповіді — ці риси поєднувались у ньому з надзвичайною працездатністю, живою зацікавленістю в долях близьких і не настільки близьких до нього людей, відкритістю до дискусії і щирим бажанням допомогти. Усе це свідчило про людину непересічного таланту й високої моралі, про доброго Вчителя і щирого Друга.

Доречно згадати тут про основні наукові результати проф. Олємского, наводячи одночасно певні приклади, що демонструють його особливий стиль роботи й розповідають про атмосферу наукових досліджень у його групі. О. І. Олємской наполегливо залучав студентів та молодих науковців до активної наукової роботи. За спогадами його учнів, проводячи багато часу в наукових бібліотеках Росії, він завжди повертався в університет із численними копіями статей із закордонних журналів. Ці статті разом із ним вивчали як науковці, так і студенти. Такий стиль роботи давав змогу проф. Олємскому завжди бути на передньому краї науки, оволодівати новітніми теоріями та підходами для дослідження нерівноважних конденсованих систем. Активні виступи на численних конференціях, семінарах у багатьох наукових установах та характерна властивість збирати навколо себе цікавих людей постійно розширювали коло його друзів. Це дозволяло йому запрошувати провідних науковців із різних наукових закладів для читання лекцій молодим ученим. При цьому опановувалися нові теоретичні підходи та розширювався науковий світогляд групи. Працюючи в такий спосіб, він розвинув теорію фрактальних об'єктів у фізиці конденсованого стану, яку потім було покладено в основу теорії ієрархічних систем. Із часом ця теорія була застосована до опису спінового скла та формування ієрархічної структури дефектів у твердому тілі. Його завжди приваблювала краса, елеґантність та пізнавальна сила теорій, що спроможні простою фізичною мовою пояснити поведінку складних систем, здатних до перебудови через фазові переходи або ж самоорганізацію. Працюючи з молодим колективом, він розвинув суперсиметричний опис конденсованих систем, який потім використано для пояснення поведінки полімерів. Після виходу його оглядової статті з фізики полімерів у журналі УФН його неодноразово запрошували до Карлового університету та Інституту фізики (м. Прага, Чехія). Такі реґулярні візити до Чехії дали змогу йому налагодити зв'язки між Карловим університетом та Сумським державним університетом, результатом яких стало навчання в аспірантурі в наукових закладах Чехії студентів із очолюваної ним кафедри фізичної та біомедичної електроніки Сумського державного університету. Коло наукових зацікавлень О. І. Олємского не обмежувалося згаданими проблемами. Його постійна зацікавленість статистичною фізикою та нерівноважними системами привела до розробки теорії стохастичних систем із сингулярним шумом. Після появи його чергового огляду в УФН за цією тематикою видавництво Nova Science Publishers запропонувало йому видати книгу, яка вийшла в 1999 році [A. I. Olemskoi, *Theory of Structure Transformations in Non-equilibrium Condensed Matter* (N.-Y., NOVA Science, 1999)]. За підтримки Російського фонду фундаментальних досліджень за кілька років побачила світ ще одна його книжка [А. И. Олемской, А. А. Кацнельсон, *Синергетика конденсированной среды*, (Москва, Едиториал УРСС, 2003)], де висвітлено теорію формування когерентних станів у системах різної природи. Основи теорії фазових перетворень у нерівноважних стохастичних системах та теорії аномальної дифузії викладено в монографії [А. И. Олемской, Д. О. Харченко, *Самоорганизация самоподобных стохастических систем*, (Москва, Ижевск, НИЦ РХД, 2007)], яка теж була опублікована за підтримки Російського державного фонду фундаментальних досліджень. Роком пізніше вийшла наступна книга проф. Олємского [А. И. Олемской, *Синергетика сложных систем: Феноменология и статистическая теория*, (Москва, изд-во КРАСАНД, 2009)], що присвячена опису процесів самоорганізації. Активно спілкуючись із багатьма науковцями, обдумуючи та опрацьовуючи новітні підходи в теоретичній фізиці, проф. О. І. Олємской сформулював засади теорії складних систем, що ґрунтується на розвинутій ним же теорії самоорганізованої критичності, теорії фракталів, теорії ієрархічного зв'язку та теорії мереж. Останніми роками його цікавили підходи, що дають змогу описувати складні системи з використанням узагальненої математики із деформованими численнями. У 2010 році побачила світ остання з його книг — А. И. Олемской, И. А. Шуда, *Статистическая теория самоорганизации сложных систем* (Сумы, Изд-во Сум ГУ, 2010), де розвивинуто теорію деформованих числень та теорію складних систем.

Учні проф. Олємского, наукова молодь з особливим теплом згадують атмосферу довіри та поваги, яка панувала в групі. За кожною розробленою ним теорією завжди стояли молоді вчені, які згодом захищали кандидатські та докторські дисертації. О. І. Олємской був керівником понад 10 кандидатських та консультантом кількох докторських дисертацій. Студенти завжди з інтересом ходили на його лекції, де, окрім основного матеріалу, що викладався в доступній для сприйняття манері, можна було почути також цікаву інформацію про новітні досягнення в галузі теоретичної фізики, теорію та практику наносистем, історію нобелівських лауреатів і ще багато цікавих фактів, які зазвичай важко знайти самостійно. Він допомагав своїм учням не лише в розв'язанні фізичних чи математичних проблем, але завжди відгукувався на будь-яке прохання та вчив поважати себе і навколишніх. Завдяки старанням О. І. Олємского в Сумах виросла ціла школа молодих учених, які вміють працювати, мають авторитет і ставлять перед собою амбітні цілі.

Перебуваючи в лікарні, вже в останні дні свого життя проф. Олємской працював над розвитком статистичної теорії поля в межах підходу деформованих числень, продовжував спілкуватися зі своїми колегами та учнями...

Вічна пам'ять Учителю за покликанням, Ученому від Бога та щирому другові Олександрові Івановичу Олємскому.