

*На правах рукописи*

**Зорин Александр Валерьевич**

**СИМВОЛЬНО–ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛИ  
КВАНТОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ  
АТОМОВ**

05.13.18 — математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание учёной степени  
доктор физико-математических наук

**Москва — 2021**

Работа выполнена на кафедре прикладной информатики и теории вероятностей ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов»

**Научный консультант:** доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры Прикладной информатики и теории вероятностей ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов»  
**Севастьянов Леонид Антонович**

**Официальные оппоненты:** доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Объединенный институт ядерных исследований, ведущий научный сотрудник Лаборатории теоретической физики  
**Мележик Владимир Степанович**

доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», профессор кафедры общей, теоретической и компьютерной физики  
**Дербов Владимир Леонардович**

доктор физико-математических наук, профессор, ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов», профессор ИФИТ  
**Рудой Юрий Григорьевич**

доктор физико-математических наук, доцент, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», профессор кафедры общей математики и математической физики  
**Цирулев Александр Николаевич**

Защита состоится «15» апреля 2022 г. в 13 ч. 00 мин на заседании диссертационного совета ПДС 0200.001 при Российском университете дружбы народов по адресу: г. Москва, ул. Орджоникидзе д. 3, ауд. 219.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Российского университета дружбы народов по адресу: 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6. (Отзывы на автореферат просьба направлять по указанному адресу.)

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» февраля 2022 г.

Учёный секретарь  
диссертационного совета  
к. ф.-м. н., доцент



А. В. Демидова

## Общая характеристика работы

### Актуальность темы исследования

Предельный переход квантовой механики в классическую статистическую теорию (Блохинцевым Д.И., Терлецкий Я.П.) и возможность введения различных квантовых функций распределения привели к попыткам интерпретировать квантовую механику как статистическую теорию классического типа на основе одной из квантовых функций распределения, рассматриваемой как плотность вероятности в квантовом пространстве, но вскоре выяснилось, что в общепринятой квантовой механике не существует положительно определенной квантовой функции распределения (Коэн). Однако можно поправить правило квантования наблюдаемых величин таким образом, что существует всюду неотрицательная квантовая функция распределения (Курышкин В.В.).

Фактически В.В. Курышкин предложил оригинальную версию квантовой механики, которая отличается от стандартной только правилом квантования, и в некотором смысле близка стандартной. Это правило квантования возникло в другом контексте в работах Вудкевича, поэтому эту версию квантовой механики мы предложили называть квантовой механикой Курышкина-Вудкевича, и представляет собой конструктивную реализацию стандартной модели квантовых измерений Холево-Хелстрёма (Хелстром К, Холево А. С.). В настоящее время уровень эксперимента в квантовой механике подошел к той границе, когда величинами энергии взаимодействия нельзя пренебрегать по сравнению с величиной энергии квантового объекта, поэтому развитие методов исследования математических моделей квантовой теории измерений становится все более актуальной задачей.

Квантовая механика Курышкина (КМК) завершает теоретические работы Терлецкого Я.П. и Блохинцева Д.И. по установлению правила соответствия между классической и квантовой физикой. КМК развивает и совершенствует предложение Вигнера Е.П. о вычислении квантовых поправок к классическим выражениям для термодинамических характеристик с помощью фазовой функции распределения. Важным результатом теории, построенной таким образом, является вероятностный характер функции распределения на фазовом пространстве по

сравнению с квазивероятностным характером функции распределения Вигнера, в то время как модель Вигнера не обеспечивает и корректного предельного перехода квантовой механики в классическую статистическую механику.

Из обобщенного соотношения неопределенностей теории квантовых измерений следует, что точность измерения даже одной, отдельно взятой наблюдаемой, в общем случае ограничена, чему нет аналога в общепринятой квантовой механике. В связи с этим актуальной является изучение модели квантовых измерений и ее компьютерная реализация. Прикладные и вычислительные аспекты теории квантовых измерений к настоящему времени систематически разработаны лишь для задач квантовой оптики, математические модели которой формулируются в виде линейной комбинации (конечной или бесконечной) линейных осцилляторов.

Своим рождением квантовая механика обязана исследованию спектров атомов, а описание спектральных линий водорода стала ее первым успехом. Поэтому модель водородоподобного атома важнейшей и наиболее изученной в стандартной квантовой механике. Механика Курышкина-Вудкевича предлагает для описания водородоподобных атомов модель, отличающуюся от стандартной. Несмотря на всю очевидную важность для сравнения версий квантовой механики, методы исследования этой модели к настоящему времени не развиты. Можно ожидать, что эта модель, будучи моделью квантовой теории измерений, даст спектры, отличающиеся от стандартных небольшим размазыванием линий, вносимым измерением. Поэтому разработка методов исследования модели квантовых измерений в приложении к квантовым системам с одним валентным электроном, их реализация в виде комплекса программ и верификация результатов является актуальной проблемой.

### **Степень разработанности темы**

Результатом работ Я.П. Терлецкого и Д.И. Блохинцева является установление того факта, что в пределе квантовая механика переходит в классическую статистику. В этом направлении опубликованы работы следующих авторов: E. Wigner, I.E. Moyal, C.L. Mehta, C.L. Mehta, L. Cohen, T.S. Shankara, Курышкин В.В., М.А.

Мокульский, Ю.Л. Климонтович, В.П. Силин, К. Imre, E Ozizmir, M. Rosenbaum, P.F. Zweifel, F. Vopp, A.A. Тяпкин, Н. Margenau, R.N. Hill, H.J. Groenewold, J.R. Shewell.

Под руководством Терлецкого Я.П. его ученик Курышкин В.В. сформулировал постулаты квантовой механики с неотрицательной квантовой функцией распределения (КФР). КФР Курышкина является фазовым представлением матрицы плотности. Аналог уравнения Лиувилля для КФР Курышкина переходит в уравнение Лиувилля для классической функции распределения в классическом пределе.

Каждая физическая модель и каждая физическая теория должна верифицироваться экспериментальными данными. Последние извлекаются в процессе измерения наблюдаемой величины. Разработаны два магистральных направления в теории квантовых измерений. *Операциональная теория квантовых измерений* (G. Ludwig, E.B. Davies, J.T. Lewis, K.Kraus, и др.). Она согласуется с понятиями повторных и неразрушающих измерений, созданных в работах E. P. Wigner, H. Araki, M. Yanase, В.Б. Брагинского, Ю.И. Воронцова, Ф.Я. Халили и др. физиков теоретиков и физиков экспериментаторов. *Стандартная теория квантовых измерений*, разработанная трудами Н.Н. Ченцова, М.А. Наймарка, А.С. Холево, Хелстрема (C.W. Helstrom) является законченной математической теорией. Она абстрактна и трудна для практических применений. Своеобразная конструктивная операциональная модель квантовых измерений создана в работах В.В. Курышкина, K.Wodkiewicz, G.M.D'Ariano, U.Leonhardt, H.Paul и др. Опираясь на результаты M.Ozawa, в диссертации показано, что она является частным случаем стандартной теории квантовых измерений. Эта модель обобщена в диссертации для описания измеренных спектральных данных "водородоподобных" атомов щелочных металлов.

Теоретическое исследование математической модели Курышкина-Вудкевича в диссертации базируется на результатах выдающихся ученых: В.Е. Тарасов, Ф.А. Березин, И.М. Гельфанд, Н.Я. Виленкин, Н. Weyl, J.M. Gracia-Bondia, J.C. Varilly, Д.А. Славнов, R. de la Madrid, A. Bohm, M. Gadella, В.М. Клечковский, Ю.Н. Демков, В.Н. Островский, Y. Kitagawara, A.O. Barut, И.И. Собельман, М.Г. Веселов, Л.Н. Лабзовский, J.W. Noh, A. Fougères, L. Mandel. В части прикладного функционального анализа, численных методов математической физики и методов математического моделирования анализ модели опирается на работы выдающихся ученых:

J. Weidmann, K. Jorgens, F. Rellih, T. Kato, М. Рида, Б. Саймона, Е.П. Жидкова, С.Г. Михлина, Р. Рихтмайера, С.В. Христенко, А.И. Шерстюка. Исследование также использовало методы следующих авторов: A. Weinstein, N. Aronszajn, N.W. Bazley, D.W. Fox, O. Goscinski, M.B. Kadomtsev, S.I. Vinitsky, Z. Papp, M. Rotenberg.

## **Цели и задачи диссертации**

**Целью** диссертации является развитие методов исследования энергетических спектров валентных электронов водородоподобных атомов и ионов, атомов щелочных металлов в рамках модели квантовых измерений Курышкина–Вудкевича, и их реализация в виде комплекса программ.

Для достижения поставленных целей были сформулированы и решены следующие **задачи**.

- Сформулировать и обосновать правило квантования Курышкина–Вейля для измеренных наблюдаемых с использованием операторной формулировки квантовой механики Курышкина–Вудкевича.
- Изучить геометрические и спектральные свойства операторов Курышкина–Вейля для квантовых моделей возмущенных водородоподобных атомов.
- Обосновать реализуемость и реализовать конструктивно метод Рэлея–Ритца для количественного описания измеренных энергетических спектров водородоподобных атомов.
- Установить хорошую обусловленность матриц Ритца измеренных операторов Гамильтона водородоподобных атомов в базисе Штурмовских функций в качестве координатных.
- Установить редуцируемость модели квантовых измерений Курышкина–Вудкевича для атомов щелочных металлов к соответствующей модели для водородоподобного атома в виде правила квантования Курышкина–Курышкина–Вейля.
- Вывести формулы для вероятностей оптических переходов в атомах с одним валентным электроном в терминах модели Курышкина–Вудкевича.
- Реализовать на компьютере расчеты измеренных энергетических спектров водородоподобных атомов.

- Верифицировать полученные результаты с помощью вычисленных на компьютере вероятностей соответствующих оптических переходов.
- На основании адекватных аналитических и численных методов и алгоритмов реализовать пакет символьно–численных компьютерных вычислений на базе Maple.

### **Новизна результатов проведенных исследований**

В диссертации впервые исследованы энергетических спектров валентных электронов водородоподобных атомов и ионов, атомов щелочных металлов в рамках модели квантовых измерений Курышкина–Вудкевича.

1. Установлено, что операциональная модель квантовых измерений Курышкина–Вудкевича является частным случаем стандартной модели квантовых измерений Холево–Хелстрема. В отличие от общего случая она обладает конструктивными преимуществами.
2. Измеренные наблюдаемые атомов водорода и атомов щелочных металлов, моделируемые оператором Гамильтона водородоподобного атома в квантовой механике с неотрицательной квантовой функцией распределения, описываются псевдо-дифференциальными операторами, обладающими следующими свойствами:
  - Квантовые измеренные наблюдаемые получаются из классических наблюдаемых с помощью правила квантования Курышкина–Вейля.
  - Квантовые измеренные наблюдаемые являются ограниченными снизу самосопряженными операторами.
  - Квантовые измеренные наблюдаемые являются компактными, равными нулю на бесконечности возмущениями своих аналогов в общепринятой квантовой механике.
  - Дискретный спектр квантовых измеренных наблюдаемых лежит ниже непрерывного спектра, как и для их аналогов в общепринятой квантовой механике.
  - Штурмовские функции атома водорода образуют полную почти ортогональную систему функций для операторов Гамильтона водородоподобного

атома, моделирующих измеренные операторы Гамильтона атомов водорода и щелочных металлов.

3. В рамках символьно-численной реализации операциональной модели Курышкина-Вудкевича:
- Аналитически вычислены операторы Гамильтона водородоподобного атома в квантовой механике с неотрицательной квантовой функцией распределения.
  - Аналитически вычислены матрицы Ритца операторов Гамильтона водородоподобного атома в базисе Штурмовских функций.
  - Реализованы численные методы решения частичной и полной обобщенной задачи на собственные значения и собственные векторы матриц Ритца.
  - Вычислены вероятности радиационных переходов в атомах водорода и щелочных металлов для верификации операциональной модели квантовых измерений Курышкина-Вудкевича.

### **Практическая значимость проведенных исследований**

Теория квантовых измерений изучает взаимодействие квантового объекта с «квантовым» измерительным инструментом. Зависимость экспериментально измеренных величин от расположения и характеристик квантовых анализаторов и детекторов отмечалась многими исследователями на протяжении нескольких десятилетий. Результаты квантовой теории измерений важны для экспериментального исследования квантово-механических объектов, верификации теоретической структуры квантовой механики. К сожалению, в настоящее время возмущения квантовыми измерениями наблюдаемых величин атомных систем редко учитываются в компьютерных алгоритмах и вычислениях. Прикладные и вычислительные аспекты теории квантовых измерений к настоящему времени систематически разработаны лишь для задач квантовой оптики.

Проведенные в диссертации теоретические исследования и разработанный на основе этих исследований алгоритмически-программный комплекс позволяет включить результаты модели квантовых измерений в экспериментальные исследования атомно-молекулярных структур, в том числе и для развития технологии передачи квантовой информации.



## **Теоретическая ценность научных работ соискателя**

Теоретическая ценность результатов, полученных в ходе компьютерного моделирования, заключается в том, что получены:

- Уравнение на собственные значения и собственные векторы оператора Гамильтона.
- Уравнение на состояния с минимальной дисперсией.
- Введение форм-фактора размазки точки в Штурмовских функциях.
- Граничные условия (в нуле и на бесконечности, в том числе по углам) на базисные функции в процедуре разложения в методе Галеркина (методе Канторовича).
- Следствия нецентральности потенциала оператора Гамильтона водородоподобного атома, аналитически вычисленного в пакете Maple.
- Исследование спектральных свойств матрицы Рэлея-Ритца для оператора Гамильтона водородоподобного атома, аналитически вычисленного в пакете Maple.
- Теорема о спектральной сходимости матрицы Рэлея-Ритца к оператору Гамильтона водородоподобного атома, аналитически вычисленного в пакете Мэпл.
- Двусторонние оценки спектра матрицы Рэлея-Ритца для оператора Гамильтона водородоподобного атома, аналитически вычисленного в пакете Maple.

## **Методы исследования**

В ходе проведения диссертационных исследований использовались методы функционального анализа в гильбертовых пространствах, прямые вариационные методы: метод Ритца и метод Галеркина, символьные методы компьютерной алгебры в пакете Maple, численные методы, встроенные в пакет Maple, методы исследования оснащённые гильбертовых пространств, спектральные методы исследования операторов Шредингера, символьные и численные методы компьютерных исследований, асимптотический метод, метод разложения по малому параметру.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

- Показано, что операторы измеренных наблюдаемых описываются правилом квантования Вейля-Курышкина. Явное строение данных операторов описано конструктивной моделью Курышкина-Вудкевича. Изучение данной модели базируется на использовании символьных вычислений явного вида операторов Вейля-Курышкина с использованием систем компьютерной алгебры с помощью Штурмовских функций. Этим вычислениям посвящена первая половина представленной работы.
- Полученные явные выражения для операторов измеренных наблюдаемых (операторов Вейля-Курышкина) позволяют провести их сравнительный анализ с соответствующими операторами ожидаемых наблюдаемых (операторами Вейля-Березина). Проведенный анализ позволяет реализовать численное исследование дискретного спектра операторов Вейля-Курышкина для водородоподобных атомов. Основным инструментом такого исследования является матрица Ритца соответствующего оператора в базисе Штурмовских функций для атома водорода. Символьным вычислениям указанной матрицы Ритца посвящена вторая часть представленной работы.
- Все символьные вычисления проводились в пакете Maple с использованием базовых процедур и дополнительных возможностей. Проведенные символьные вычисления позволили приготовить инструментарий для последующего численного исследования спектральных характеристик измеренных наблюдаемых. Численные исследования показывают состоятельность модели Курышкина-Вудкевича для описания измеренных наблюдаемых квантовых систем водородоподобных атомов.

**Степень достоверности результатов проведенных исследований**

Операциональная модель Курышкина-Вудкевича реализована методом вычислительного эксперимента.

На основе сформированных целевых функций восстановления численно реализован устойчивый алгоритм восстановления параметров смотрового окна по измеренным спектральным данным атомов водорода и щелочных металлов.

По вычисленным вероятностям радиационных переходов (с использованием вычисленных параметров смотровых окон) в атомах водорода и щелочных металлов верифицирована операциональная модель квантовых измерений Курышкина-Вудкевича.

### **Апробация**

Результаты диссертационных исследований докладывались более чем на 40 Российских и Международных конференциях с 1998 года по 2020 год, в том числе:

- 21st International Workshop on Computer Algebra in Scientific Computing, CASC 2019, Moscow, Russia, August 2019.
- Mathematical Modeling and Computational Physics 2019. Stará Lesná, High Tatra Mountains, Slovakia, July 1-5, 2019.
- 11th International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems and Workshops (ICUMT), Dublin, Ireland, 2019.
- Analytical and Stochastic Modelling Techniques and Applications. ASMTA 23 - 25 Oct 2019, РУДН, Москва, Россия.
- 12th International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems and Workshops (ICUMT), Brno, Czech Republic, 2020.

### **Личное участие соискателя в получении результатов, изложенных в диссертации**

Соискателем получены подавляющее большинство теоретических результатов диссертации, большая часть алгоритмических построений и значительная часть проведенных компьютерных экспериментов. В частности, ему принадлежат:

- Теоретическое исследование и численное отыскание состояний с минимальной дисперсией;
- Исследование существенного и дискретного спектра операторов Гамильтона в модели Курышкина-Вудкевича;
- Описание вероятностей оптических переходов в водородоподобных атомах в квантовой механике Курышкина-Вудкевича;
- Построение структуры оснащенного пространства оператора Гамильтона водородоподобного атома в операциональной модели квантовых измерений;

- Изучение квазистационарных состояний оператора Гамильтона водородоподобного атома в стандартной модели квантовых измерений в связи с проблемами квантовой информации;
- Построение модели возмущения дискретного спектра валентного электрона остовом атома щелочного металла в терминах модели Курышкина-Вудкевича.

## Публикации

Основные положения диссертационного исследования отражены в 34 печатных работах [1–34]. Из них 14 публикации выполнены в изданиях, индексируемых в международной БД SCOPUS, 18 статей представлены в изданиях, которые включены в перечень научных журналов, рекомендованных ВАК/РУДН.

## Программный код

Общедоступный репозиторий программного кода, созданного при написании диссертации, находится по адресу <https://github.com/yamadharma/zorin-thesis-progs> [35].

## Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, 9 глав, заключения, библиографии и 1 приложения. Общий объем диссертации 311 страниц, из них 274 —страницы основного текста. Библиография включает 211 наименований на 28 страницах.

## Содержание работы

**Во Введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

**В первой главе** диссертации рассматривается одна из версий квантовой механики с неотрицательной квантовой функцией распределения (КФР) – квантовой механики Курышкина (КМК).

Конфигурационное пространство изолированного физического объекта (на-  
пример, задачи Кеплера – водородоподобного атома)  $Q = \mathbb{R}^3$ , фазовое  
пространство (кокасательное расслоение)  $T^*Q = \mathbb{R}^3 \oplus \mathbb{R}^3 = \{(q, p)\}$ . Клас-  
сические наблюдаемые  $A(q, p)$  – распределения на фазовом пространстве этого  
объекта (системы). Согласно правилу квантования Вейля квантовые наблюдае-  
мые  $O_W(A)$  – самосопряженные (неограниченные) операторы в оснащенном  
гильбертовом пространстве  $S \subset H = L_2(Q) \subset S'$ , где  $S$  – пространство  
Шварца, а  $S'$  – сопряженное ему пространству. Теория Мехта-Коэна-Курышкина  
о взаимно-однозначном соответствии правила квантования и квантовой функ-  
ции распределения (КФР) ставит правилу Вейля в соответствие КФР Вигнера,  
так что

$$\langle A \rangle_\psi = (O_W(A)\psi, \psi) = \int A(q, p)W_\psi(q, p)dqdp$$

В работах Курышкина В.В. на основе принципа статистического соответствия,  
сформулированного Блохинцевым и Терлецким, построена модель квантовой  
механики с неотрицательной КФР. Правило квантования Курышкина, зависящее  
от набора вспомогательных функций  $\{\varphi_k\}$ , каждой  $A(q, p)$  ставит в соответствие  
оператор, явный вид которого удобно записать с помощью фазового представле-  
ния

$$\Phi_{\{\varphi_k\}}(q, p) = \frac{\exp\{\frac{i}{\hbar}(q, p)\}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \sum_k \varphi_k(q)\tilde{\varphi}_k^*(p) = \sum_k \Phi_k(q, p)$$

вспомогательных функций  $\{\varphi_k\}$ . А именно, действие линейного оператора  
 $O_{\{\varphi_k\}}(A)$  на волновую функцию  $\psi(q)$  определяется равенством:

$$O_{\{\varphi_k\}}(A)\psi(q) = (2\pi\hbar)^{-3} \int \Phi_{\{\varphi_k\}}(\xi-q, \eta-p)A(\xi, \eta)e^{\frac{i}{\hbar}((q-q')p)}\psi(q')d\xi d\eta dpdq. \quad (1)$$

Средние значения операторов (1) представляются в виде

$$\langle A \rangle_\psi^{\{\varphi_k\}} = (O_{\{\varphi_k\}}(A)\psi, \psi) = \int A(q, p)F_\psi^{\{\varphi_k\}}(q, p)dpdq,$$

где

$$F_\psi^{\{\varphi_k\}}(q, p) = (2\pi\hbar)^{-3} \sum_k c_k \left| \int \varphi_k(q - \xi)\psi(\xi)e^{-\frac{i}{\hbar}(\xi, p)}d\xi \right|^2.$$

**Во второй главе** предложена конструктивная реализация измерительного инструмента, параметризованная матрицей плотности  $\rho_a = \sum c_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$  состояний измерительного прибора. Показано, что операциональная квантовая функция распределения Вудкевича измерений наблюдаемой  $A$  в точности совпадает с квантовой функцией распределения Курышкина. При этом измерительному инструменту соответствует правило квантования Курышкина с помощью псевдо-дифференциальных операторов  $O(A)$ , символом которого является свертка символа данного оператора в квантовании Вейля с функцией Вигнера  $W_{\rho_a}$  состояния  $\rho_a$

КФР  $P(q, p)$  квантового объекта, измеренного с помощью квантового фильтра, задается следующим образом. Пусть до процедуры измерения объект находился в состоянии  $\hat{\rho}_1$ , а квантовый фильтр (до процедуры измерения) находился в состоянии  $\hat{\rho}_2$ , тогда распределение измеренных значений наблюдаемой составной системы (объект+фильтр) задается КФР

$$P(q, p) = (W_{\rho_1} * W_{\rho_2})(q, p),$$

так что

$$\langle A \rangle_P = \int A(q, p) P(q, p) dqdp.$$

Свертка любых двух КФР Вигнера является положительно определенной функцией распределения вероятностей. Принцип статистического соответствия, сформулированный в первой главе, был направлен на построение правила квантования, соответствующего положительно определенной КФР, согласно теории Мехта-Коэна-Курышкина

$$\text{Tr} \{O(A) \hat{\rho}\} = \int A(q, p) F(q, p) dqdp$$

для  $\forall A(q, p) \in S(T^*Q)$ .

Таким образом, составная система «объект + фильтр» действует в пространстве  $L_2(Q_1 \oplus Q_2) = L_2(Q_1) \oplus L_2(Q_2)$  с помощью операторов «измеренных» наблюдаемых  $O_W(A) \otimes \hat{I}$ , а ее состояния до процедуры измерения задаются

операторами  $\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$ . Среднее значение измеренной наблюдаемой Холево равно

$$\langle A \rangle_{\rho_1 \otimes \rho_2} = \text{Tr} \left\{ \left( O_W(A) \otimes \hat{I} \right) (\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2) \right\} = \text{Tr}_1 \left\{ O_{\rho_2}(A) \hat{\rho}_1 \right\},$$

где  $\text{Tr}_1$  — частичный след по пространству  $L_2(Q_1)$  и  $O_{\rho_2}(A) = \text{Tr}_2 \left\{ \left( O_W(A) \otimes \hat{I} \right) (\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2) \right\}$  — частичный след по пространству  $L_2(Q_2)$ .

С другой стороны, среднее значение измеренной наблюдаемой равно [25; 29]

$$\langle A \rangle_{\rho_1 \otimes \rho_2} = \int A(q, p) (W_{\rho_1} * W_{\rho_2})(q, p) dq dp,$$

т.е

$$\langle A \rangle_P = \int A(q, p) \int W_{\rho_1}(q - \tilde{q}, p - \tilde{p}) W_{\rho_2}(\tilde{q}, \tilde{p})(q, p) d\tilde{q} d\tilde{p} dq dp.$$

Доказана следующая теорема.

**Теорема 1.** *Правило квантования Курышкина-Вудкевича сопоставляет обобщенной функции  $A \in S'(T^*Q)$  линейный непрерывный оператор вида*

$$O_{\rho_2}(A) = O_W(A * W_{\rho_2}) : S(Q) \rightarrow S'(Q).$$

Для доказательства воспользуемся свойствами КФР Вигнера  $W(-q, p) = -W(q, p)$  и  $W_{\phi}(q, p) = W_{\tilde{\phi}}(p, q)$ , где функция  $\tilde{\phi}$  является Фурье-образом функции  $\phi$ , а также свойством  $W_{\rho}(q, p) = \sum C_k W_{\psi_k}(q, p)$ , где  $\hat{\rho} = \sum C_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$ . Кроме того, используем свойство свертки  $W_1 * W_2 = W_2 * W_1$ . Тогда справедливы равенства  $\langle A \rangle_P = \langle A, W_1 * W_2 \rangle = \langle A, W_2 * W_1 \rangle = (A * (W_2 * W_1))(0, 0) = ((A * W_2) * W_1)(0, 0) = \langle A * W_2, W_1 \rangle$ , так что  $\langle A \rangle_P = \int (A * W_2)(q, p) W_1(q, p) dq dp = \text{Tr}(O_W(A * W_2) \hat{\rho}_1)$ .

Значения измеренных величин распределены в соответствии с положительной определенной функцией распределения вероятностей. Заметим также, что свертка любых двух квантовых функций распределения Вигнера является положительно определенной функцией распределения, но не обязательно является

функцией распределения Вигнера. Мы будем пользоваться тем вариантом теории квантовых измерений, которая базируется на квантовой теории оценивания, построенной в работах Холево и Хелстрёма.

Таким образом, составная система «объект+фильтр (анализатор)» действует в пространстве  $L_2(Q_1 \oplus Q_2) = L_2(Q_1) \oplus L_2(Q_2)$  с помощью операторов «измеренных» наблюдаемых  $O_W(A) \otimes \hat{I}$ , а ее состояния до процедуры измерения задаются операторами  $\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$ . Среднее значение измеренной наблюдаемой равно

$$\langle A \rangle_{\rho_1 \otimes \rho_2} = \text{Tr} \left\{ \left( O_W(A) \otimes \hat{I} \right) \left( \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 \right) \right\} = \text{Tr}_1 \left\{ O_{\rho_2}(A) \hat{\rho}_1 \right\},$$

где  $\text{Tr}_1$  — частичный след по пространству  $L_2(Q_1)$  и

$$O_{\rho_2}(A) = \text{Tr}_2 \left\{ \left( O_W(A) \otimes \hat{I} \right) \left( \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 \right) \right\}$$

— частичный след по пространству  $L_2(Q_2)$ .

С другой стороны, среднее значение измеренной наблюдаемой равно

$$\langle A \rangle_{\rho_1 \otimes \rho_2} = \int A(q, p) (W_{\rho_1} * W_{\rho_2})(q, p) dq dp,$$

$$\text{т.е. } \langle A \rangle_P = \int A(q, p) \int W_{\rho_1}(q - \tilde{q}, p - \tilde{p}) W_{\rho_2}(\tilde{q}, \tilde{p})(q, p) d\tilde{q} d\tilde{p} dq dp.$$

Следовательно, справедлива теорема.

**Теорема 2.** *Правило квантования Курышкина–Вудкевича сопоставляет обобщенной функции  $A \in S'(T^*Q)$  линейный непрерывный оператор вида  $O_{\rho_2}(A) = O_W(A * W_{\rho_2}) : S(Q) \rightarrow S'(Q)$*

**В третьей главе** рассматриваются операторное представление Гамильтониана водородоподобного атома в квантовой механике Куришкина–Вудкевича.

Теорема 2 дает возможность построить оснащенное гильбертово пространство (ОГП), обеспечивающее спектральное разложение оператора  $O_{\rho}(A)$ , обладающего смешанным, дискретным и непрерывным, спектром.

Для отыскания собственных (классических и обобщенных) функций оператора  $O_{\rho}(H)$  вначале фон Нейманом для ограниченных операторов (с дискретным



спектром) в гильбертовом пространстве, а затем Гельфандом и Виленкиным для неограниченных операторов (со смешанным спектром) в оснащённом гильбертовом пространстве было обосновано спектральное разложение существенно самосопряженного оператора.

Если возьмем наблюдаемую  $A(q, p, t) = A(q, t)$ , то операторы  $O_\rho(\mathbb{H})$  являются самосопряженными вида:

$$[O(A)\Psi](q, t) = \Psi(q, t) \int \alpha_0(\xi, t) A(q + \xi, t) d\xi, \quad (2)$$

где

$$\alpha_0 = \sum_k |\varphi_k(q, t)|^2 = \int \Phi(q, p, t) dp.$$

Наблюдаемой  $A(q, p, t) = p_j$  ставится в соответствие оператор  $O(P_j) = \langle p_j \rangle_0 - i\hbar \nabla_j$ , так что  $O(\vec{p}) = \langle \vec{p} \rangle_0 - i\hbar \vec{\nabla}$ , где  $\langle g(p) \rangle_0 \stackrel{\text{not}}{=} \int g(p) \beta_0(p) dp$ ,  $\beta_0(p) = \sum_k |\tilde{\varphi}_k(q, t)|^2 = \int \Phi(q, p, t) dq$ .

Следовательно,

$$O\left(\sum_{j=1}^N p_j^2\right) = \sum_{j=1}^N \{ \langle p_j^2 \rangle_0 + 2\langle p_j \rangle_0 (-i\hbar \nabla_j) + (-i\hbar \nabla_j)^2 \}. \quad (3)$$

А также

$$O(A(\vec{p}, t)) = \int \beta_0(\vec{\eta}) A\left(\vec{\eta} - i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{q}}, t\right) d\vec{\eta}.$$

Наблюдаемой, полиномиально зависящей от импульсов, т.е.

$$A(q, p, t) = \sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}}(q, t) \prod_{j=1}^N p_j^{n_j},$$

сопоставляется оператор  $O(A)$ , который записывается в виде дифференциального оператора вида

$$O\left\{ \sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}}(q, t) \prod_{j=1}^N p_j^{n_j} \right\} =$$

$$= \int \Phi(\xi, \eta, t) \sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}}(q+\xi, t) \left\{ \prod_{j=1}^N \left[ \sum_{k_j=0}^{n_j} C_{n_j}^{k_j}(\eta_j)^{k_j} d\xi d\eta (-i\hbar \nabla_j)^{n_j-k_j} \right] \right\}.$$

В частности, для момента импульса  $L_i = \varepsilon_{ijk} r_j p_k$  оператор

$$O(L_i) = \varepsilon_{ijk} \int \Phi(\xi, \eta, t) (r_j + \xi_j) (\eta_k - i\hbar \nabla_k) d\xi d\eta,$$

а также

$$O(\vec{L}^2) = \sum_i \varepsilon_{ijk} \int \Phi(\xi, \eta, t) (r_j + \xi_j)^2 (\eta_k - i\hbar \nabla_k)^2 d\xi d\eta.$$

Абстрактное ядерное счетно-гильбертово пространство и его классическая реализация. Это гильбертово пространство  $H = L_2(Q)$  и его подмножество  $S$  бесконечно дифференцируемых функций  $\psi \in H$ , убывающих на бесконечности быстрее любого полинома, так что величины  $\|\psi\|_{n,l}$  ограничены для любой функции  $\psi \in S$ :

$$\|\psi\|_{n,l} = \max_{\vec{q} \in Q} \left| \left(1 + |\vec{q}|^2\right)^n \frac{\partial^{l_1+l_2+l_3} \psi}{\partial q_1^{l_1} \partial q_2^{l_2} \partial q_3^{l_3}}(\vec{q}) \right| \quad (4)$$

Величины  $\|\psi\|_{n,l}$  задают счетную систему норм в пространстве  $S$  (пространство Шварца). Тройка непрерывно вложенных пространств

$$S \subset H = L_2(Q) \subset S',$$

где  $S'$  пространство сопряженное к  $S$ , т.е. пространство линейных функционалов, непрерывных в топологии, заданной системой (4) норм  $\|\psi\|_{n,l}$ .

Система норм (4) в силу соотношений (2)–(3) оказывается эквивалентной системе норм

$$\|\psi\|_{n,l,m}^p = \int \left| \left(1 + |\vec{q}|^2\right)^l (1 - \Delta)^n O_\rho(H^m) \psi(\vec{q}) \right| d\vec{q}$$

Таким образом, конструкция ядерного оснащенного гильбертова пространства модифицирована для модели квантовых измерений.

Сколько вспомогательных функций следует выбирать для адекватного описания квантовомеханической системы?

В силу (2) оператор

$$O(A) = \sum_{k=1}^n O_k(A). \quad (5)$$

С помощью неравенства треугольника и оценок

$$\|O_k(A)\| \leq |C_k|^2 \|A\|, \quad (6)$$

получаем аналогичную оценку для (5), (??).

$$\|O(A)\| \leq \left( \sum_k |C_k|^2 \right) \|A\| = \|A\|. \quad (7)$$

Оценки (7), (6), в совокупности дают нам соотношение:

$$\|O(A)\| = \sum_k C_k^2 \|O_k(A)\| = \|A\|. \quad (8)$$

Причем

$$\|O_k(A)\| = \|A\|. \quad (9)$$

Левая часть соотношения (8) позволяет рассмотреть возмущение операторов  $O(A)$  наблюдаемой  $A$  в случае перехода от набора субквантовых функций  $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}$  к набору вспомогательных функций  $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}, \varphi_n$ , задающих состояние "фильтра"

$$O^{(n)}(A) = \sum_{k=1}^n C_k^2 O_k(A) = O^{(n-1)}(A) + C_n^2 O_n(A).$$

Отсюда получаем оценку

$$\|O^{(n)}(A) - O^{(n-1)}(A)\| \leq C_n^2 \|O_n(A)\|,$$

в которой следует учесть соотношение (9)

$$\|O^{(n)}(A)\| = \|O^{(n-1)}(A)\| = \|O_n(A)\| = \|A\|.$$

Так что относительное возмущение оператора удовлетворяет оценке

$$\|O^{(n)}(A) - O^{(n-1)}(A)\| / \|O_n(A)\| \leq C_n^2. \quad (10)$$

Если вспомнить, что  $\sum_k C_k^2 = 1$ , то легко видеть, что  $|C_k|^2 \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$ . Таким образом при увеличении набора вспомогательных функций относительное возмущение  $O^{(n)}(A)$  стремится к нулю по норме при увеличении количества вспомогательных функций  $\{\varphi_k\}_{k=1}^n$ .

**Замечание 1.** Соотношения (7)–(10) имеют смысл в случае  $A \in L_2$ , когда операторы  $O(A)$  являются ограниченными. Если же наблюдаемая  $A(q, p)$  является умеренно растущим распределением, то вместо нормы можно использовать счетную систему полунорм оснащенного счетно–гильбертова пространства. Для каждой из этих полунорм, для неограниченных операторов  $O(A)$  будут выполняться аналоги соотношений (7)–(10), обеспечивающие стремление к нулю относительного возмущения  $O^{(n)}(A)$  в метрике оснащенного счетно–гильбертова пространства.

**В четвёртой главе** рассматривается структура спектра операторов Гамильтона в квантовой механике Курышкина–Вудкевича.

В квантовой механике с неотрицательной квантовой функцией распределения (КФР) уравнение Шредингера для водородоподобного атома имеет вид

$$H^1 \psi_{nlm}(\vec{r}) \stackrel{def}{=} \left\{ c_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta - Ze^2 \int \frac{\alpha_0(|\vec{\zeta}|)}{|\vec{r} + \vec{\zeta}|} d\vec{\zeta} \right\} \psi_{nlm}^1(\vec{r}) = E_{nl}^1 \psi_{nlm}^1(\vec{r}),$$

отличающийся от уравнения Шредингера для водородоподобного атома в общепринятой квантовой механике:

$$H^0 \psi_{nlm}(\vec{r}) \stackrel{def}{=} \left\{ c_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r} \right\} \psi_{nlm}^0(\vec{r}) = E_{nl}^0 \psi_{nlm}^0(\vec{r}). \quad (11)$$

Если рассматривать оператор  $H^1$  как возмущение оператора  $H^0$ , то можно поставить вопрос об исследовании расщепления  $n^2$ -кратных уровней энергии (11) под действием возмущения  $V(\vec{r}) = H^1 - H^0$ . Если  $u_1(\vec{r})$  сферически-симметричная, как в  $O_1(H)$ , то в этом случае будем ее обозначать  $v_1(r)$ . В этом случае возмущение оператора Гамильтона

$$V(r) = H^1 - H^0 = -\frac{Ze^2}{r} - v_1(r)$$

зависит лишь от длины  $r$  радиус-вектора  $\vec{r}$ . Следовательно, вся информация о расщеплении энергетических уровней оператора  $H^1$  содержится в смещениях уровней энергии однократного спектра оператора радиальной части уравнения Шредингера.

**Теорема 3.** *Самосопряженные операторы*

$$A_l^1 = -\frac{d^2}{dr^2} + \hat{V}_l^1$$

и

$$A_l^0 = -\frac{d^2}{dr^2} + \hat{V}_l^0$$

ограничены снизу границами, возможно отличающимися от нижней грани оператора  $A_0$ :

$$D(A_0) = D(A_l^0), \quad A_0 f = -\frac{d^2 f}{dr^2} + r^2.$$

В силу условий

$$V_l^1(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad V_l^0 \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$$

существенные спектры операторов  $A_0, A_l^0, A_l^1$  совпадают между собой и с интервалом  $[0, \infty)$ . Следовательно, изолированные собственные значения (связанные энергетические уровни) конечной кратности лежат в интервале  $(-\infty, 0)$ .

Оператор Гамильтона водородоподобного атома в квантовой механике Курышкина  $O_n(H) = \sum_j a_j^2 O^{(j)}(H)$ . В случае, если правило квантования Курышкина задано пятью вспомогательными функциями:  $\varphi_1(\vec{r}) = a_1 \psi_{100}(\vec{r}/b_1)$ ,  $\varphi_2(\vec{r}) = a_2 \psi_{200}(\vec{r}/b_2)$ ,  $\varphi_3(\vec{r}) = a_3 \psi_{210}(\vec{r}/b_3)$ ,  $\varphi_4(\vec{r}) = a_4 \psi_{211}(\vec{r}/b_4)$ ,  $\varphi_5(\vec{r}) =$

$a_5 \psi_{21-1}(\vec{r}/b_5)$ , операторы  $O^{(j)}(H)$  принимают вид [24; 26] (в атомных единицах):

$$O^{(j)}(H) = -\Delta + \frac{1}{b^2 n^2(j)} - \frac{2Z}{r} + Q_j(r, \cos \theta; b) \exp\left\{\left\{-\frac{r}{bn(j)}\right\}\right\},$$

где  $n(1) = 1, n(2) = n(3) = n(4) = n(5) = 2$  — главное квантовое число. Полный оператор Гамильтона в этом случае имеет вид

$$O_n(H) = -\Delta + c\hat{I} - \frac{2Z}{r} + \sum_{j=1}^n a_j^2 Q_j(r, \cos \theta; b) \exp\left\{\left\{-\frac{r}{bn(j)}\right\}\right\}$$

причем  $\sum a_j^2 = 1, 0 < b_1^2 \leq b_j^2 \leq b_2^2$ .

Отметим в начале несколько элементарных свойств оператора  $O_n(H)$ . Во-первых,  $O_n(H) = \hat{H}_c + c\hat{I} = (O_n(H) - c\hat{I}) + c\hat{I}$ , причем резольвенты  $R(O_n(H))$  и  $R(O_n(H) - c\hat{I})$  связаны соотношениями  $R_{\lambda+c}(O(H)) = R_\lambda(O(H) - c\hat{I})$  при  $\forall \lambda \in \mathbb{C}$ , так что дискретный и существенно непрерывный спектр оператора  $O_n(H)$  сдвинут на константу  $c = \sum_j \frac{a_j^2}{b^2 n^2(j)}$  по сравнению с аналогичными спектрами оператора

$$O_n(H) - c\hat{I} = \hat{H}_c = -\Delta - \frac{2Z}{r} + \sum_j a_j^2 Q_j(r, \cos \theta; b) \exp\left\{\left\{-\frac{r}{b_j n(j)}\right\}\right\}.$$

**Замечание.** Оператор  $O_n(H)$  является аналитическим возмущением оператора  $H_0 = -\Delta$ , и также аналитическим возмущением оператора  $\hat{H} = \Delta - \frac{2Z}{r}$  в области  $G = \left\{a_1, a_2, \dots, a_5, b : \sum_{j=1}^5 a_j^2 = 1, b_1^2 \leq |b_j|^2 \leq b_2^2\right\}$ .

Структура оператора  $\hat{H}_c$ , проистекающая из правила квантования Курышкина, позволяет воспользоваться результатами  $\hat{H}_0$ -ограниченных и  $\hat{H}_0$ -малых на бесконечности возмущений существенно самосопряженного оператора  $\hat{H}_0$ .

**Теорема 4.**  $\hat{H}_c$  является  $\hat{H}_0$ -ограниченным  $\hat{H}_0$ -малым на бесконечности, следовательно (теорема Като),  $\hat{H}_c$  является существенно самосопряженным и ограниченным снизу с нижней гранью, равной минус единице.

Существенный спектр оператора  $\hat{H}_c$  совпадает с неотрицательной вещественной полуосью:  $C_\sigma(\hat{H}_c) = [0, \infty)$ . Спектр  $\hat{H}_c$  на отрицательной вещественной

полуоси состоит только из изолированных собственных значений конечной кратности:  $P_\sigma(\hat{H}_c) \subset [-1 - c_1, 0)$

У оператора  $O(H) = \hat{H}_c + c\hat{I} = c\hat{I} + \hat{H} + \hat{V}^-$  существенный непрерывный спектр совпадает с полуосью  $[c, \infty)$ . Нижняя грань  $\gamma$  оператора  $O(H)$ , являющаяся нижней гранью дискретного спектра, смещается относительно нижней грани  $\gamma_0$  оператора  $\hat{H}$ . При этом грань смещается вниз на величину  $c_1(\vec{a}, b)$  и вверх на величину  $c(\vec{a}, b)$ , одновременно каждое собственное значение  $\lambda_j$  сдвигается на  $c(\vec{a}, b) - c_1(\vec{a}, b)$ . Эти смещения, а также тот факт, что наблюдаемые спектры излучения  $(\lambda_j - \lambda_k)$  должны совпадать с  $(\frac{1}{n^2(j)} - \frac{1}{n^2(k)})$ , подсказывают правила для установления параметров  $(\vec{a}, b)$ . А именно, минимизация функционала

$$\sum_{i < j} \left[ \left( \lambda_j + \frac{1}{n^2(j)} \right) - \left( \lambda_i + \frac{1}{n^2(i)} \right) \right]^2 \rightarrow \min_{(\vec{a}, b)}$$

приведет к минимальному отклонению предсказаний квантовой механики Курьшикина от экспериментально наблюдаемого спектра излучения водородоподобного атома.

Следствие вытекает из утверждения теоремы 4 и из свойств резольвенты для операторов  $O(H)$  и  $\hat{H}_c$ .

**В пятой главе** рассматриваются матрицы Ритца операторов Гамильтона.

Оператор  $O(H)$  самосопряжен и ограничен снизу константой  $(C - 1)$ . Константа  $C$  зависит от выбора вспомогательных функций.

В виду неортогональности используемой системы координатных функций, для нахождения спектра необходимо решать обобщенную задачу на собственные значения

$$M\vec{x} = \lambda B\vec{x},$$

где  $M$  — матрица Ритца оператора  $O(H)$ , а  $B$  — матрица скалярных произведений координатных функций. Элементы матрицы Ритца рассчитываются по формуле:  $M_N = \sum a_j M_{(j)}$ , где

$$M_{kl}^{(j)} = \int \psi_k^{E_0}(\vec{r}) \left[ O_j \left( \frac{\vec{p}^2}{2\mu} \right) + O_j \left( \frac{Z_{eff} e^2}{r} \right) \right] \psi_l^{E_0}(\vec{r}) d\vec{r}.$$

В итоге получается матрица, которая зависит от параметров  $E_0, b_j, a_j$  и  $Z_{eff}$ . Эти параметры используются впоследствии для нахождения вычисленного спектра матрицы Ритца, наилучшим образом соответствующего экспериментальным данным.

Следующим этапом моделирования оптических свойств водородоподобных атомных объектов является фиттирование вычисленного спектра  $\{\lambda_j\}$  матрицы Рэля–Ритца к экспериментально наблюдаемому спектру конкретного элемента. С этой целью по параметрам  $(\vec{a}, \vec{b}, E)$  минимизируем целевую функцию

$$F[\vec{a}, \vec{b}, E] = \sum_{j=1}^{N_0 < N} (\lambda_j(\vec{a}, \vec{b}, E) - \lambda_j)^2 / (\lambda_j)^2.$$

**Утверждение 1.** Самосопряженный оператор  $\hat{V}$ , заданный на области определения  $D(\hat{H}_1)$  по формуле  $\hat{V}\psi \equiv \hat{H}_1\psi - \hat{H}\psi$ , является оператором умножения на функцию

$$V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \sum_{k=1}^5 \left( \frac{a_k}{n(k)b_k} \right)^2 + Ze^2 \sum_{k=1}^5 a_k^2 Q_{n\ell m}(r, \theta, \varphi; b_k) e^{-\frac{2r}{n(k)b_k}}.$$

Потенциалы  $V_1(\vec{r}) = V(\vec{r}) - \frac{Ze^2}{r}$  и  $V_0(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r}$  удовлетворяют условиям теоремы Като о существенном спектре оператора, поэтому справедлива

**Теорема 5.** Самосопряженные операторы  $\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V_1(\vec{r})$  и  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V_0(\vec{r})$  ограничены снизу гранями, не обязательно совпадающими с нижней гранью оператора  $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{Ze^2}{|\vec{r}|}$ .

Рассмотрим задачу на собственные значения и собственные векторы оператора  $\hat{H}_1 = O(H)$ , а именно задачу отыскания таких  $E \in (-\infty, C_1)$  и таких  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ , что выполняются соотношения

$$\hat{H}_1\psi_E = E \cdot \psi_E.$$

Штурмовские функции  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = S_{nl}(kr) Y_{lm}(\theta, \phi)$  образуют ортонормированный базис гильбертова пространства  $H$ , следовательно, любой



собственный вектор  $\psi_E$  оператора  $\hat{H}_1$  можно представить в виде ряда Фурье по функциям  $\psi_{n\ell m}$  :

$$\psi_E(r, \theta, \varphi) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{n\ell m}^E \psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi),$$

так что

$$\hat{H}_1 \sum_{n,\ell,m} a_{n\ell m}^E \psi_{n\ell m} = E \sum_{n,\ell,m} a_{n\ell m}^E \psi_{n\ell m}. \quad (12)$$

Умножая соотношение (12) на каждую функцию  $\psi_{pqr}$  поочередно, получаем эквивалентную систему алгебраических уравнений для координат  $a_{n\ell m}^E$ .

Введем сокращенные обозначения для троек индексов:  $J = (n, \ell, m)$ ,  $I = (p, q, r)$ , тогда координатная запись (12) примет вид

$$\sum_J \langle \psi_I | \hat{H}_1 | \psi_J \rangle C_J^E = \sum_J E \delta_{IJ} C_J^E, \quad \forall I,$$

или в эквивалентной записи

$$\sum_J (H_{IJ} - E \delta_{IJ}) C_J^E = O_I, \quad \forall I. \quad (13)$$

Соотношение (13) хорошо знакомо как задача на собственные значения  $E$  и собственные векторы  $\vec{C}^E = \{C_J^E\}$  для бесконечной матрицы

$$H_{IJ} = \langle \psi_I | \hat{H}_1 | \psi_J \rangle.$$

Будем рассматривать последовательность конечномерных матриц  $H_{IJ}^N = \langle \psi_I | H_1 | \psi_J \rangle^N$  с размерностями  $\dim(N) = \sum_{n=1}^N n^2$ , так что  $\dim(1) = 1$ ,  $\dim(2) = 5$ ,  $\dim(3) = 14$  и т.д. естественным образом вложенные друг в друга. Матричные элементы  $H_{n\ell m, pqr}^N = \langle \psi_{n\ell m} | \hat{H}_1 | \psi_{pqr} \rangle^N$  вычисляются при  $n \leq N$ ;  $\ell = 0, \dots, n-1$ ;  $m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell$ ;  $p \leq N$ ;  $q = 0, \dots, n-1$ ;  $r = -q, -q+1, \dots, q$ . Операторы  $\hat{H}_1$  и  $\hat{H}$  являются сходными, так что система функций  $\psi_{n\ell m}$ , являющаяся ортонормированной относительно скалярного произведения  $\langle \psi_{n\ell m}, \psi_{pqr} \rangle_0 = \langle \psi_{n\ell m} | \hat{H}_1 | \psi_{pqr} \rangle = \delta_{np} \delta_{\ell q} \delta_{mr}$ , является почти ортонормированной относительно скалярного произведения  $\langle \psi_{n\ell m}, \psi_{pqr} \rangle_1 =$

$\langle \psi_{n\ell m} | \hat{H}_1 | \psi_{pqr} \rangle$ . Следовательно, матрицы  $H_{IJ}^N$  — хорошо обусловленные и их «числа обусловленности»  $\rho(N) = \Lambda_{max}^{(N)} / \lambda_{min}^{(N)}$  ограничены независимо от  $N$  (здесь  $\Lambda_{max}^{(N)}$  и  $\lambda_{min}^{(N)}$  — максимальное и минимальное соответственно собственные числа матрицы  $H_{IJ}^N$ ).

Таким образом для задачи Кеплера получены следующие результаты. В качестве примера операциональной модели квантовых измерений рассмотрена задача Кеплера с функцией гамильтона  $H(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{|\vec{q}|}$ . В случае, когда квантовая система является изолированной, оператор (проквантованный по Вейлю) наблюдаемой  $H$  имеет вид  $\hat{H} \equiv O_W(H) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{Ze^2}{|\vec{q}|}$ . В случае, когда к ней применяется процедура измерения с квантовым фильтром в состоянии  $\hat{\rho} = \sum C_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$ , оператор измеренной наблюдаемой  $O_\rho(H)$  имеет вид:

$$[O_W(H * W_\rho) u](q) = \int (H * W_\rho) \left( \frac{q+\tilde{q}}{2}, p \right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} p(q - \tilde{q}) \right\} u(\tilde{q}) d\tilde{q}. (*)$$

При этом  $W_\rho(q, p) = \sum C_k W_{\psi_k}(q, p)$ , где  $W_{\psi_k}(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int \bar{\psi}_k(q + \eta) \psi_k(q - \eta) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} 2p\eta \right\} d\eta$ .

Для операторов  $O_\rho(H)$  получены следующие результаты.

**Утверждение 1** Операторы  $O_\rho(H)$  являются ограниченными снизу существенно самосопряженными.

**Утверждение 2** Операторы  $O_\rho(H)$  являются  $\hat{H}$  - компактными и  $C(\hat{\rho})$  - ограниченными на бесконечности.

**Утверждение 3** Штурмовские функции  $\psi_k$  оператора  $\hat{H}$  образуют почти ортогональную относительно оператора  $O_\rho(H)$  полную систему функций.

**Утверждение 4** Спектр оператора  $O_\rho(H)$  состоит из дискретной и существенно непрерывной части. Дискретная часть спектра принадлежит отрезку  $[C(\hat{\rho}) - 1, C(\hat{\rho})]$ , где  $C(\hat{\rho})$  - константа, зависящая от (состояния фильтра)  $\hat{\rho}$ , и расположена ниже непрерывной части спектра. Следовательно, для отыскания собственных значений оператора  $O_\rho(H)$  можно использовать принцип минимакса.

**Теорема 6.** 1. Матрица Рунца  $M_{kl}^N(H, \hat{\rho}) = \langle \psi_k, O_\rho(H) \psi_l \rangle$ ,  $k, l = 1, \dots, N$  оператора  $O_\rho(H)$  со штурмовскими функциями оператора  $\hat{H}$  в качестве координатных функций является хорошо обусловленной при любой размерности  $N$  (числе координатных функций  $\{\psi_k, k = 1, \dots, N\}$ ).

2. Собственные значения матрицы Ритца  $M_{kl}^N(H, \hat{\rho})$  образуют монотонную последовательность  $\lambda_j^N$ , сходящуюся к собственным значениям  $\lambda_j^\infty$  оператора  $O_\rho(H)$ .
3. Собственные векторы матрицы Ритца  $M_{kl}^N(H, \hat{\rho})$  образуют минимизирующую последовательность  $\psi_j^N$ ,  $j = 1, \dots, N$  функционала Ритца для отношения Рэля в принципе минимакса, сходящуюся к собственным векторам  $\psi_j^\infty$  оператора  $O_\rho(H)$ .

**В шестой главе** рассматривается вид оператора Гамильтона валентного электрона в атоме щелочного металла.

Конструктивная форма модели квантовых измерений Курышкина-Водкевича ранее была подробно разработана для квантовой задачи Кеплера. Для более сложных квантовых объектов такая конструкция была неизвестна. В то же время стандартная (неконструктивная) модель квантовых измерений Холево-Хелстрема подходит для любого квантового объекта. В данной главе конструктивная модель квантовых измерений обобщена на более широкий класс квантовых объектов, а именно на оптический спектр атомов и ионов с одним валентным электроном. Вывод модели основан на обосновании одночастичной потенциальной модели для описания энергетического спектра оптических электронов в атомах щелочных металлов. Представление возмущения одночастичного потенциала в виде свертки потенциала электрона в атоме водорода с функцией Вигнера определенного эффективного состояния остова в представлении атома щелочного металла позволяет редуцировать все алгоритмы расчета для щелочных металлов к соответствующим алгоритмам для атома водорода.

**Теорема 7.** Пусть  $\delta V_\rho(\vec{r})$  – возмущение потенциала  $V_1(\vec{r}) = -\frac{1}{r}$ , которое обращается в ноль на бесконечности. Тогда существует состояние  $\hat{\rho} = \sum_j c_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|$ , однозначно определенное на подпространстве  $H^N = \sum_{j=1}^N c_j \psi_j$  размерности  $N$  в гильбертовом пространстве  $L_2(\mathbb{R}^3)$ , такое что соответствующая функция Вигнера порождает это возмущение путем свертки. Другими словами, мы можем сказать, что «возмущение потенциала порождается сверткой».

Следующим шагом является получение матричных элементов физических операторов, которые необходимы для точного теоретического определения атомных

энергетических уровней, орбиталей и данных о радиационных переходах для атомов и ионов с открытой оболочкой. Эта процедура выполняется с использованием матрицы Ритца произвольной размерности. Их матричные элементы выражаются через волновые функции Штурма, не совпадающие со вспомогательными функциями, используемыми для описания возмущения измерением спектра атома водорода.

Результатом является матрица, которая зависит от  $E_0, b_j, a_j$  и  $Z_{eff}$ . Эти параметры можно варьировать, чтобы рассчитать желаемые участки спектра с заданной точностью. Для этого строятся штрафные функции.

$$F_{\Omega} = \sum_{k \in \Omega} (\lambda_k - E_k^{exp})^2 / (E_k^{exp})^2,$$

где  $\lambda_k$  - собственные значения матрицы Ритца, а  $E_k^{exp}$  предоставлены базой данных атомных спектров NIST. Напомним, что все матрицы симметричны. Определенный интерес представляет вычисление степени разреженности полученных матриц Ритца. Оказывается, эти матрицы довольно разреженные (примерно 800 нулевых элементов из общего числа 900 в случае матриц 30 на 30). Для этих вычислений можно использовать более продвинутый пакет в Maple, например LinearAlgebra.

**В седьмой главе** проводится верификация полученных ранее результатов.

В отличие от атома водорода в случае щелочных металлов невозможно построить единый эффективный потенциал, способный описать уровни энергии для различных квантовых чисел  $n, l$ . Это происходит по причине взаимодействия внешнего электрона с внутренними электронами, а характер такого взаимодействия принципиально различается для различных значений орбитального числа  $l$ .

Для проверки качества модели и правильности выбора вспомогательных функций был проведен расчет переходных вероятностей. В данной главе переходные вероятности рассчитываются методом Галёркина со штурмовскими функциями атома водорода в качестве координатных функций, что позволяет свести вычисления к алгебраическим операциям с матричными элементами, которые вычисляются аналитически.

**В восьмой главе** рассматриваются состояния с минимальной дисперсией.

Рассмотрим операторы  $O(H)$ ,  $O(\vec{L}^2)$  и  $O(L_z)$ , чтобы проанализировать какие свойства ОКМ остаются в силе для этой тройки операторов, а какие свойства изменяют свой характер.

Воспользуемся формулами предыдущих глав и получаем

$$O(L_z) = -i\hbar(x\nabla_y - y\nabla_x),$$

а также

$$O(\vec{L}) = -i\hbar[\vec{r} \times \vec{\nabla}].$$

Оператор, соответствующий квадрату момента импульса, имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 = \delta_{ij}\hat{L}_i \cdot \hat{L}_j \equiv & -\hbar^2(y^2 + z^2)\nabla_x^2 - \hbar^2(x^2 + z^2)\nabla_y^2 - \hbar^2(x^2 + y^2)\nabla_z^2 + \\ & + 2\hbar(xy\nabla_x\nabla_y + xz\nabla_x\nabla_z + yz\nabla_y\nabla_z) \end{aligned}$$

Таким образом, тройка коммутирующих операторов  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{L}^2$  из общепринятой квантовой механики при измерении переходят, в общем случае, в тройку некоммутирующих операторов согласно теореме Вигнера–Араки–Яназе.

Предполагаемая в данной работе математическая модель позволяет вычислить операторы  $O(H)(\vec{a}, b)$ ,  $O(L_z)(\vec{a}, b)$  и  $O(\vec{L}^2)(\vec{a}b)$  при любых допустимых вспомогательных параметрах  $(\vec{a}, b)$ .

Вычисленные (приближенно) значения параметров  $(\vec{a}, b)$ , которые обеспечивают совместную минимальность дисперсий трех величин  $L_z$ ,  $\vec{L}^2$ ,  $H$  в состоянии  $\Psi_\lambda$ , можно принять за искомое значение.

Вычисление приближенных решений задачи

$$\langle [O(H^2) - \langle O(H)\psi_n, \psi_n \rangle^2] \psi_n, \psi_n \rangle \xrightarrow{\|\psi\|=1} \min = \delta_n. \quad (14)$$

много сложнее вычисления приближенных решений задачи

$$\langle O(H)\psi_n, \psi_n \rangle \xrightarrow{\|\psi\|=1} \min = \lambda_n. \quad (15)$$

При поиске точки локального минимума задачи (14) в виде  $\tilde{\psi}_k = \psi_k + \delta\psi_k$ , где  $\psi_k$  — точка локального минимума задачи (15) и  $\|\delta\psi_k\| \ll 1$  задача на состояние с минимальной дисперсией принимает вид:

$$F(\psi + \delta\psi) \xrightarrow[\psi + \delta\psi \neq 0]{} \min,$$

где

$$F(\psi + \delta\psi) \equiv \frac{\langle O_p(H^2)(\psi + \delta\psi), (\psi + \delta\psi) \rangle}{\langle (\psi + \delta\psi), (\psi + \delta\psi) \rangle} - \left( \frac{\langle O_p(H)(\psi + \delta\psi), (\psi + \delta\psi) \rangle}{\langle (\psi + \delta\psi), (\psi + \delta\psi) \rangle} \right)^2.$$

Необходимым условием существования  $\delta\psi_k$  является соотношение:

$$\begin{aligned} & \left[ \langle (\psi + \delta\psi), (\psi + \delta\psi) \rangle^2 O_p(H^2) - 2 \langle (\psi + \delta\psi), (\psi + \delta\psi) \rangle \right. \\ & \quad \left. \langle O_p(\psi + \delta\psi), (\psi + \delta\psi) \rangle \right] (\psi + \delta\psi) = \\ & = \left[ \langle (\psi + \delta\psi), (\psi + \delta\psi) \rangle \langle O_p(H^2)(\psi + \delta\psi), (\psi + \delta\psi) \rangle \right. \\ & \quad \left. - 2 \langle O_p(H)(\psi + \delta\psi), (\psi + \delta\psi) \rangle^2 \right] (\psi + \delta\psi). \quad (16) \end{aligned}$$

Нелинейную систему уравнений (16) решаем относительно  $\delta\psi_k$  методом разложения по малому параметру, традиционным для задач квантовой механики с малыми возмущениями.

**В девятой главе** рассматривается программный пакет QDF аналитических и численных вычислений на базе стандартного пакета Maple, разработанный в ходе проведения теоретических и компьютерных исследований энергетического спектра валентного электрона водородоподобного атома.

Программа QDF написана на языке MAPLE по описанному ниже алгоритму. На рисунке 1 представлена общая схема программы. Он состоит из девяти этапов. Первый этап представляет собой оригинальный пакет для расчета необходимых функций. Второй этап посвящен расчетам операторов потенциальной энергии. Третий этап посвящен расчетам операторов кинетической энергии. Четвертый этап посвящен расчетам матриц Ритца. Пятый этап посвящен генерации кодов

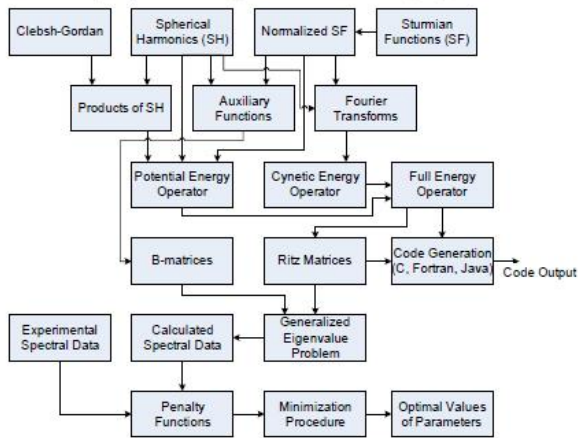


Рис. 1. Глобальная структура программы, QDF.

матриц Ритца для последующего использования в других программах. Шестой этап посвящен расчету спектров оператора Гамильтона для электрона в водородоподобных атомах. Седьмой этап посвящен оптимизации параметров модели для водорода. Заключительный этап посвящен оптимизации параметров модели для щелочных металлов. Наконец, расчет переходных вероятностей для проверки модели. Структуры частей программного пакета показаны более подробно: для расчета вспомогательных функций (рисунок 2), для расчета матриц и уровней энергии (рисунок 3), и для вычисления вероятностей перехода (рисунок 4).

Опишем также алгоритм восстановления эффективных параметров потенциала валентного электрона в атоме щелочного металла и параметров возмущения энергетического спектра этого валентного электрона в процессе измерения.

**В заключении** приводится обзор основных результатов, полученных в диссертации.

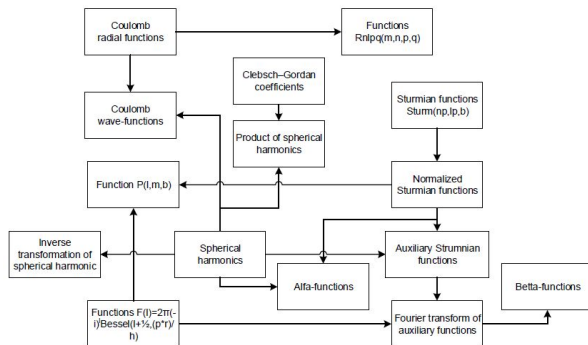


Рис. 2. Структура части программы для расчета вспомогательных функций.

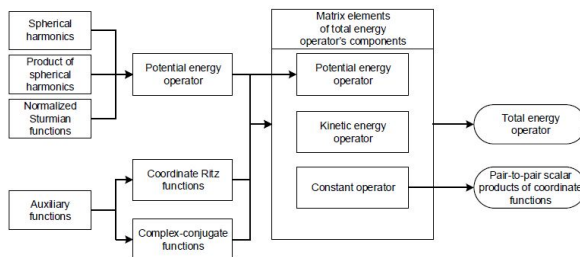


Рис. 3. Структура части программы для расчета матриц и уровней энергии.

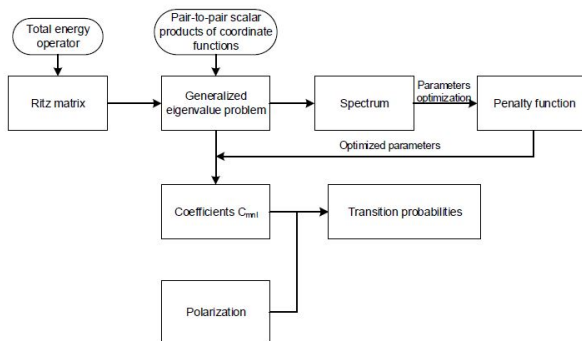


Рис. 4. Структура части программы расчета вероятностей переходов.



## Список литературы

1. *Zorin A. V., Sevastianov L. A., Tretyakov N. P.* Dissipativity of the Quantum Measurement Model // Analytical and Stochastic Modelling Techniques and Applications / ed. by M. Griboudo, E. Sopin, I. Kochetkova. — Cham : Springer International Publishing, 2020. — P. 171–185. — ISBN 978-3-030-62885-7. — DOI: 10.1007/978-3-030-62885-7\_13.
2. *Zorin A., Tretyakov N.* Quantum mechanics with non-negative distribution and measurements // International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems and Workshops. 2020–October. — 2020. — P. 185–188. — DOI: 10.1109/ICUMT51630.2020.9222429.
3. *Zorin A., Tretyakov N.* Calculation of Transition Probabilities in Quantum Mechanics with a Nonnegative Distribution Function in the Maple Computer Algebra System // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2020. — No. 60. — P. 82–89. — DOI: 10.1134/S0965542520010157.
4. *Zorin A. V., Sevastianov L. A., Tretyakov N. P.* States with Minimum Dispersion of Observables in Kuryshkin-Wodkiewicz Quantum Mechanics // Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). — 2019. — Vol. 11965 LNCS. — P. 508–519. — DOI: 10.1007/978-3-030-36614-8\_39.
5. *Zorin A. V.* Approximate Computation of States with Minimal Dispersion in Kuryshkin-Wodkiewicz Quantum Mechanics // 2019 11th International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems and Workshops (ICUMT). — 2019. — P. 1–5. — DOI: 10.1109/ICUMT48472.2019.8971007.
6. *Zorin A. V., Sevastianov L. A., Tretyakov N.* Application of the Model of Quantum Measurements of Valence Electrons of Alkali Metals to Modelling of Quantum Communication Channels // Proceedings of 10th ICUMT. — IEEE Communications Society. 2018.

7. *Zorin A. V., Sevastyanov A. L., Sevastianov L. A.* Application of the noncommutative theory of statistical decisions to the modeling of quantum communication channels // 2017 9th International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems and Workshops (ICUMT). — 2017. — P. 26–31. — DOI: 10.1109/ICUMT.2017.8255195.
8. *Sevastianov L. A., Zorin A. V.* The Computer-Based Model of Quantum Measurement // Physics of Atomic Nuclei. — 2017. — Vol. 80, no. 4. — P. 774–780. — DOI: 10.1134/S1063778817040238.
9. *Sevastianov L., Zorin A., Gorbachev A.* A quantum measurements model of hydrogen-like atoms in Maple // Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). — 2013. — Vol. 8136 LNCS. — P. 369–380. — DOI: 10.1007/978-3-319-02297-0\_30.
10. *Sevastyanov L., Zorin A., Gorbachev A.* Pseudo-Differential Operators in an Operational Model of the Quantum Measurement of Observables // Mathematical Modeling and Computational Science / ed. by G. Adam, J. Buša, M. Hnatič. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2012. — P. 174–181. — ISBN 978-3-642-28212-6. — DOI: 10.1007/978-3-642-28212-6\_17.
11. *Зорин А. В., Севастьянов Л. А., Третьяков Н. П.* Компьютерное моделирование водородоподобных атомов в квантовой механике с неотрицательной функцией распределения // Программирование. — 2007. — Т. 33, № 2. — С. 50–62.
12. *Zorin A. V., Sevastianov L. A., Belomestny G. A.* Numerical search for the states with minimal dispersion in quantum mechanics with non-negative quantum distribution function // Lecture Notes in Computer Science. Vol. 3401. — 2005. — P. 613–620. — DOI: 10.1007/978-3-540-31852-1\_75.
13. *Zhidkov E. P., Zorin A. V.* Quantum Theory with Statistical Interpretation The Hydrogen-Like Atom Problem // Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering. — 2002. — Vol. 2, no. 1/2. — P. 293–307. — DOI: 10.3233/JCM-2002-21-240.

14. Горбачев А. В., Зорин А. В., Севастьянов Л. А. Модель квантовых измерений Курышкина–Вудкевича для атомов и ионов с одним валентным электроном // Вестник РУДН. Серия: Математика, информатика, физика. — 2016. — № 2. — С. 44–52.
15. Зорин А. В. Модель квантовых измерений водородоподобного атома в оснащем гильбертовом пространстве // Вестник РУДН. Серия: Математика, информатика, физика. — 2015. — № 4. — С. 38–45.
16. Зорин А. В. Операционная модель квантовых измерений Курышкина–Вудкевича // Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2012. — № 2. — С. 43–55. — ISSN 2658-7149. — URL: <http://journals.rudn.ru/miph/article/view/8657>.
17. Зорин А. В. Моменты наблюдаемых величин в модели квантовых измерений Курышкина–Вудкевича // Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2010. — № 4. — С. 112–117.
18. Зорин А. В., Севастьянов Л. А. Моменты наблюдаемых величин в модели квантовых измерений Курышкина–Вудкевича // Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2010. — № 3. — С. 99–104.
19. Зорин А. В. Переходные вероятности в квантовой механике Курышкина // Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2008. — № 4. — С. 68–74.
20. Численное исследование дискретного спектра оператора Гамильтона водородоподобного атома в квантовой механике Курышкина / А. А. Гусев [и др.] // Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2007. — № 3/4. — С. 76–84.
21. Зорин А. В., Севастьянов Л. А., Беломестный Г. А. Наборы наблюдаемых в квантовой механике Курышкина и разделение переменных // Вестник РУДН. Серия: Прикладная и компьютерная математика. — 2005. — Т. 4, № 1. — С. 115–121.

22. *Зорин А. В.* Метод исследования существенного и дискретного спектров оператора Гамильтона водородоподобного атома в квантовой механике Курышкина // Вестник РУДН. Серия: Прикладная и компьютерная математика. — 2004. — Т. 3, № 1. — С. 121—131.
23. *Зорин А. В., Севастьянов Л. А., Беломестный Г. А.* Аналитическое вычисление матриц наблюдаемых водородоподобного атома в квантовой механике Курышкина // Вестник РУДН. Серия: Прикладная и компьютерная математика. — 2004. — Т. 3, № 1. — С. 106—120.
24. *Зорин А. В., Севастьянов Л. А.* Математическое моделирование квантовой механики с неотрицательной КФР // Вестник РУДН. Серия: Прикладная и компьютерная математика. — 2004. — Т. 3, № 1. — С. 81.
25. *Зорин А. В.* Приближенное отыскание состояний с минимальной дисперсией в квантовой механике Курышкина // Вестник РУДН. Серия: Физика. — 2004. — № 12. — С. 81—87.
26. Аналитическое вычисление операторов наблюдаемых водородоподобного атома в квантовой механике Курышкина / А. В. Зорин [и др.] // Вестник РУДН. Серия: Прикладная и компьютерная математика. — 2003. — Т. 2, № 1. — С. 25—51.
27. *Зорин А., Севастьянов Л.* Состояния с минимальной дисперсией наблюдаемых в квантовой механике Курышкина // Вестник РУДН. Серия: Физика. — 2002. — № 10. — С. 72—92.
28. *Зорин А. В., Севастьянов Л. А.* Метод оценок снизу для собственных значений дифференциального оператора Гамильтона в квантовой механике Курышкина // Вестник РУДН. Серия: Прикладная и компьютерная математика. — 2002. — Т. 1, № 1. — С. 134—144.
29. *Зорин А. В., Курышкин В. В., Севастьянов Л. А.* Описание спектра водородоподобного атома // Вестник РУДН. Серия: Физика. — 1998. — Т. 6, № 1. — С. 62—66.

30. *Zorin A. V. Kuryshkin-Wodkiewicz quantum measurement model for alkaline metal atoms // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science. — 2020. — Vol. 28, no. 3. — P. 274–288. — ISSN 2658-7149. — DOI: 10.22363/2658-4670-2020-28-3-274-288. — URL: <http://journals.rudn.ru/miph/article/view/24706>.*
31. *Зорин А., Третьяков Н. Расчет вероятностей перехода в квантовой механике с неотрицательной функцией распределения в системе компьютерной алгебры MAPLE // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2020. — Т. 60, № 1. — С. 88–95. — DOI: 10.1134/S0965542520010157.*
32. *Жидков Е. П., Зорин А. В. Описание спектра водородоподобного атома в квантовой механике с последовательно вероятностной интерпретацией. — Дубна : Изд-во ОИЯИ, 2000. — P11-2000-316.*
33. *Zorin A., Sevastianov L. Hydrogen-like atom with nonnegative quantum distribution function // Physics of Atomic Nuclei. — 2007. — Vol. 70, no. 4. — P. 792–799. — DOI: 10.1134/S1063778807040229.*
34. *Матричные представления в квантовой механике с неотрицательной КФР на примере водородоподобного атома / Е. П. Жидков [и др.]. — Дубна : Изд-во ОИЯИ, 2002. — P11-2002-253.*
35. *Пакет программ QDF. — 2021. — URL: <https://github.com/yamadharma/zorin-thesis-progs>.*

**Зорин Александр Валерьевич**

**Символьно–численная реализация модели квантовых измерений водородоподобных атомов**

Проведенные в диссертации теоретические исследования и разработанный на основе этих исследований алгоритмически-программный комплекс позволяет включить результаты модели квантовых измерений в экспериментальные исследования атомно-молекулярных структур. Методы моделирования непрерывного и дискретного спектра квантовых наблюдаемых обобщены с класса дифференциальных операторов на класс псевдо-дифференциальных операторов. Развита качественные и количественные методы исследования дискретного спектра псевдо-дифференциальных операторов Гамильтона специального вида с нецентральными потенциалами. Проведена разработка, обоснование и тестирование эффективных числительных аналитических методов исследования спектральных характеристик псевдо-дифференциальных операторов с применением современных компьютерных технологий. Реализованы эффективные численные методы и алгоритмы отыскания дискретного спектра псевдо-дифференциальных измеренных операторов Гамильтона с учетом возрастающей сложности моделей в зависимости от сложности квантового измерительного инструмента в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения серии численных экспериментов.

**Zorin Alexander Valerievich**

**Symbolic–numerical implementation of the model of quantum measurements of hydrogen-like atoms**

The theoretical studies carried out in the dissertation and the algorithmic–software complex developed on the basis of these studies allows the inclusion of simulation results quantum measurements to be included in experimental studies of atomic–molecular structures. Methods for modeling the continuous and discrete spectrum of quantum observables are generalized from the class of differential operators to the class of pseudo-differential operators. Qualitative and quantitative methods for studying the discrete spectrum of pseudo-differential Hamilton operators of a special form with off-center potentials are developed. The development, substantiation and testing of effective numeral analytical methods for studying the spectral characteristics of pseudo-differential operators using modern computer technologies. Effective numerical methods and algorithms for finding the discrete spectrum of pseudo-differential measured Hamilton operators are implemented taking into account the increasing complexity of the models depending on the complexity of the quantum measuring instrument in the form of problem-oriented software complexes for conducting a series of numerical experiments.

Подписано в печать \_\_.\_\_.2022. Формат 60×84/16.

Тираж 150 экз. Усл. печ. л. 2. Заказ № \_\_\_\_.

Типография Издательства РУДН

115419, ГСП-1, г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3