

Поль Адриан Морис ДИРАК

Основы квантовой механики

Перевод с английского

М.П. Бронштейна

Под редакцией
Д. Д. Иваненко
Книги из собрания
проф. Д.П. Гречухина
ДАР семьи

Государственное технико-теоретическое издательство

Москва - Ленинград - 1932

WWW.NIX.RU

P. A. M. DIRAC.
THE PRINCIPLES OF QUANTUM MECHANICS.

WWW.NIX.RU

ОТ ИЗДАТЕЛЬСТВА

Издательство поставило задачу ознакомления советской научной общественности с основными крупными работами ученых Западной Европы. Книга Дирака является первой из намеченной серии. Произведение Дирака - оригинальный крупнейший труд по квантовой механике, являющийся центральной областью современной теоретической физики. Знакомство с этим произведением необходимо для тех, кто желает глубже ознакомиться с кругом проблем стоящих перед современной физикой.

Издательство отдает себе ясный отчет, что данное произведение содержит в себе целый ряд совершенно не вяжущихся с диалектическим материализмом взглядов и высказываний.

Но именно необходимость разворачивания борьбы на теоретическом фронте против идеализма, против механизма и целого ряда эклектических учений, ставит перед издательством задачу дать в руки советских ученых тот конкретный материал, который играет сейчас крупную роль в обосновании всех вышеуказанных течений, для того, чтобы этот материал критически освоенный был использован на фронте борьбы за диалектический материализм. Выход этих книг на русском языке даст возможность привлечь широкие круги советских ученых и философов для обсуждения выдвинутых в них вопросов. Кроме того издательство убеждено, что эти книги вызовут встречный поток произведений наших советских ученых по затронутым вопросам и дадут возможность, пользуясь методом диалектического материализма, поставить нашу науку на еще более высокую ступень.

ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ

Перевод «Основ квантовой механики» Дирака, предлагаемый вниманию читателей, является первой серьезной книгой по квантовой механике на русском языке. Еще до выхода в свет английского издания автор привез корректурные листы на Совещание по теоретической физике, созванное Украинским Физико-техническим институтом в Харькове летом 1930 года. Книга вызвала большой интерес и единодушное Одобрение собравшихся советских теоретиков.

Квантовая механика весьма многим обязана Дираку. Символический метод Дирака постепенно стал общепризнанным и в целом ряде областей (теория преобразований, релятивистская теория электрона) вытеснил все другие. После появления работы Дирака по теории возмущений (гл. IX) и теории взаимодействия атома со светом (гл. XII) влияние его становится руководящим. Знаменитое же релятивистское уравнение Дирака (гл. XIII) выдвинуло молодого автора на одно из самых первых мест среди теоретиков.

Мы несомненно пережили уже бурный период развития квантовой механики (так называемая новая, в отличие от теории Бора, квантовая механика появилась осенью 1925 года), и целый ряд авторов предпринял задачу систематизации накопленного материала. Среди всех появившихся книг «Основы» Дирака выделяются прежде всего своей исключительной цельностью и шириной охвата.

Почти вся книга написана Дираком на основании собственных работ, что придает ей специальный вес и особенно увлекательный стиль. Сравнивая с другими лучшими книгами по этому вопросу нашей области, можно сказать, утрируя характеристики, что, рядом с «Основами», дополнительный том «Wellenmechanischer Ergänzungsband» Зоммерфельда выглядит, как сборник решения ряда частных задач; книга де Бройля: «Introduction à l'étude de la mécanique ondulatoire» есть только введение, посвященное главным образом переходу от классической механики к квантовой; «Elementare Quantenmechanik» Борна и Йордана есть изложение сознательно ограниченной части материала, поддающегося обработке специальным методом (в книге нет уравнения Шредингера); наконец «Einführung in die Wellenmechanik» Френкеля наиболее доступная, пожалуй, для чтения книга, как и все упомянутые, не дает, однако, одного – изложения системы квантовой механики. Как раз изложение системы и дает книга Дирака, поистине в наиболее высоком виде, свободном от всякого провинциализма, т.е. пользования узким методом, выдвигания проблем, близких автору, и т.д.

Наиболее близкая по характеру, весьма ценная Дираком, книга Вейля: *Guppentheorie und Quantenmechanik*, на наш взгляд значительно ниже книги Дирака, как по излишнему математическому формализму, так и по самому стилю изложения.

В чем, пожалуй, можно обвинить книгу Дирака, это в ее некоторой аполитичности, отсутствии злободневности, что, конечно, вместе с тем является и преимуществом. Характерно почти полное отсутствие литературных ссылок и цитат. Нельзя не согласиться с американским рецензентом книги Оппенгеймером, сравнившим «Основы» Дирака с «Основами статической механики» Гиббса.

Релятивистская квантовая механика в 1928 году в основном была закончена. Релятивистское уравнение Дирака оказалось почти единственным успешным шагом в направлении построения теории, согласной с принципом относительности. В настоящее время квантовая механика стоит перед двумя основными нерешенными трудностями, препятствующими дальнейшему развитию основ теории: первая из них – трудность отрицательной энергии, о которой говорится в последнем параграфе книги. Вторая трудность есть вопрос о массе или энергии электрона. Точечный электрон, как и в старой теории, в квантовой электродинамике имеет бесконечную энергию. В настоящее время эти две принципиальные трудности тормозят даже конкретные применения теории, например к атомному ядру, теория которого должна быть релятивистской.

Дело будущего решить вопрос: сможет ли аппарат квантовой механики специально в форме, изложенной Дираком, служить орудием в овладении следующим этапом – релятивистской квантовой механикой. Общее мнение склоняется сейчас к необходимости введения существенно новых физических и математических понятий.

Чрезвычайно широкий интерес к квантовой механике среди физиков, математиков и философов, курсы квантовой теории, читаемые в наших вузах, - все это настоятельно требует выпуска на русском языке соответствующих книг.

В настоящее время кроме небольшого введения Гааса, мы ничего не имеем по этому вопросу. Появление книги Дирака на русском языке весьма уместно, хотя и нельзя, конечно, ограничиться изданием одной только книги по квантовой механике. Книга Дирака посвящена абстрактной, скажем, квантовой механике. Приложений в обычном смысле, т. е. Задач из теории металлов, химической физике, радиоактивности и т.д., здесь нет. Нам кажется, что без дальнейшего усиленного развития самостоятельной школы абстрактной, в указанном смысле, самой основой теоретической физики наша советская теоретика не сумеет подняться на максимальный уровень. Конечно, только усиленная работа над приложениями позволяет достигнуть полного расцвета теоретической физики, так что мы здесь наблюдаем, примерно, такое же соотношение, как между физикой теоретической и физикой экспериментальной и еще дальше, в известном смысле, между физикой вообще и техникой. Для подтверждения можно указать Англию, где работы Дирака вызвали значительный рост теоретической продукции во всех направлениях.

Русский перевод книги Дирака (выполненный сотрудником Ленинградского физико-технического института доцентом М.П. Бронштейном) есть существенный шаг, в частности, и в указанном направлении. Текст переведен без всяких изменений. Затруднения представила терминология, главным образом из-за бедности, вернее отсутствия, нашей литературы. Observable переведено как наблюдаемая, по аналогии с variable – переменная. Representation и representative – как представление и представитель. В немецком переводе, просмотренном Дираком, стоит Darstellung и Darsteller. Термины eigenvalue, eigenstate, eigenfunction мы решили перевести, как собственные числа, или значения, собственные состояния, собственные функции. Мы следовали единообразию и твердо укоренившейся в квантовой механике немецкой терминологии: Eigenwert, Eigenfunktion, под влиянием которой Дирак отказался от английских терминов proper function или fundamental function. Тем самым мы отошли от принятых в русской математической литературе терминов: характеристические числа и фундаментальные функции. К новой терминологии присоединился и проф. В.А. Фок, готовя свой русский курс квантовой механики. Перевод снабжен, с согласия Дирака, примечаниями, могущими облегчить чтение. Текст всех примечаний принадлежит переводчику, за исключением дополнений, составленных мною.

Заключение мы считаем долгом принести глубокую благодарность автору книги, искреннему другу советской науки, любезно предоставившему манускрипт до выхода в свет, содействовавшему русскому переводу рядом ценных указаний и дополнившему издание новым нигде не напечатанным материалом.

WWW.NIX.RU

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРА К АНГЛИЙСКОМУ ИЗДАНИЮ.

Пути развития теоретической физики значительно изменились в течение двадцатого столетия. Согласно классической традиции физический мир считался собранием наблюдаемых объектов (части, жидкостей, полей и т.д.), движущихся по определенным законам механики; поэтому было возможно составить наглядное пространственно-временное представление о мире как о целом. Целью физики было как можно более простое объяснение поведения этих наблюдаемых объектов с помощью гипотез о их механизме и о действующих между ними силах. Однако за последнее время становилось все более и более очевидным, что природа устроена иначе. Ее основные законы не управляют непосредственно тем миром, о котором мы составили себе наглядное представление; но в их ведении находится закулисная сторона этого мира, которую мы не можем представить наглядно, не впадая при этом в логические противоречия. Формулировка этих законов требует применения математической теории преобразований. Все важные свойства мира являются инвариантами этих преобразований или по крайней мере «почти инвариантами», т.е. величинами, преобразующимися по очень простым правилам. Мы непосредственно воспринимаем лишь отношения этих «почти инвариантов» к некоторой системе отсчета (системе координат), которая обыкновенно избирается с тем расчетом, чтобы добиться некоторых специальных упрощений, не имеющих впрочем никакого значения с точки зрения общей теории.

Возрастающее применение теории преобразований, которая была применена в теории относительности, а затем и в теории квант, представляет сущность нового метода теоретической физики. Дальнейший прогресс состоит в том, что наши уравнения становятся инвариантными по отношению к все более широким классам преобразований. Такое положение вещей весьма удовлетворительно с философской точки зрения, так как оно указывает на возрастающее признание роли самого наблюдателя в привнесении закономерностей в результаты наблюдений, а также и на признание отсутствия произвола в природе; но изучение физики благодаря этому становится все более и более трудным. Новые теории, независимо от их математического оформления, основаны на таких физических понятиях, которые не могут быть объяснены в терминах, известных прежде, и которые даже не могут быть адекватно объяснены словами вообще. Подобно тем основным категориям (как например понятия смежности и тождества), которыми в этом мире неминуемо должен овладеть каждый, новые физические понятия возможно усвоить лишь при продолжительном знакомстве с их свойствами и с их употреблением.

С математической стороны ознакомление с новыми теориями не представляет затруднений, так как нужные для этого отделы математики (по крайней мере теперешнем состоянии науки) не отличаются существенно от тех, которые уже давно употребляются в физике. Математика есть орудие, специально пригодное для овладения всякого рода абстрактными понятиями, и в этом отношении ее могущество беспредельно. Поэтому всякая книга о современной физике, если она не ограничивается описанием физических экспериментов, должна быть математической книгой. Но не следует забывать, что математика есть только орудие и что нужно уметь владеть физическими идеями безотносительно к их математической форме. Я старалась писать эту книгу так, чтобы физика в ней была на первом плане. Первая глава имеет чисто физический характер, во всех же остальных главах я старалась, где только можно, раскрывать физический смысл формальных математических соотношений. Теоретический материал, который должен быть усвоен читателем перед тем, как он получит возможность подойти к конкретным проблемам, очень обширен, но это совершенно неизбежно и связано с той важной ролью, которую играет теория преобразований. В будущей теоретической физике это обстоятельство вероятно станет еще более заметным.

По отношению к математической форме, в которую можно облечь теорию, автор книги по квантовой механике вынужден с самого начала выбирать между двумя методами. Дин из них – то символический метод, непосредственно абстрактно оперирующий величинами, играющими в теории важную роль (т.е. инвариантами и «почти инвариантами» преобразований); вторым же является метод координат или представителей, оперирующий системами чисел, которые приводятся в соотношение с упомянутыми величинами. Квантовая механика обыкновенно излагается по второму методу (таковы почти все изложения, за

исключением книги Вейля «Grup-pentheorie und Quantenmechanik»). Этот метод известен под именем метода «волновой механики» или «механики матричной», смотря по тому, какие физические понятия выдвигаются на первый план – состояния системы или же динамические переменные. Преимущества такого изложения заключаются в том, что все необходимые для него отделы математики более привычны всем изучающим физику; кроме того этот метод имеет историческое значение.

Символический метод однако позволяет проникнуть в сущность вещей значительно глубже. Он дает возможность выражать физические законы в сжатой и точной форме, и я думаю, что в будущем, когда его будут лучше понимать и когда разовьется его математическая сторона, он получит широкое распространение. Поэтому я избрал символический метод и пользуюсь методом представителей лишь в тех главах книги, где он позволяет облегчить практическую сторону вычислений. Это выудило меня совершенно порвать с исторической формой изложения; но и в этом есть преимущество, а именно – то, что я получил возможность подойти к новым идеям самым прямым и коротким путем. Связь между новой теорией и теорией Бора у меня дана потому, что теория Бора вероятно еще долго останется полезной для элементарных рассуждений.

Вторая половина книги содержит применение квантовой механики ко всем важнейшим областям, в которых она оказалась полезной. Все эти применения логически вытекают из общей теории, изложенной в первой половине книги; исключение составляет лишь последняя глава, содержащая дальнейшее развитие теории.

П.А.М. Дирак.

Сент-Джона Колледж, Кэмбридж.
29мая 1930 г.

WWW.NIX.RU

I. ПРИНЦИП СУПЕРПОЗИЦИИ.

§ I. ЧАСТИЦЫ и волны.

Применение классической электродинамики к атомным явлениям наталкивается на весьма фундаментальные трудности, показывающие, что классическую теорию невозможно примирить с фактами. Например совершенно безнадежно пытаться объяснить на основании классических представлений замечательную устойчивость атомов и молекул, необходимую для того, чтобы вещества обладали определенными физическими и химическими свойствами. Эти трудности вызвали необходимость изменения некоторых основных законов природы и привели к построению новой системы механики, которая была названа квантовой механикой потому, что наиболее разительные (хотя и не самые важные) отличия ее от старой механики заставляют приписать прерывность как некоторым физическим явлениям, так и некоторым динамическим переменным.

Классическая электродинамика является весьма последовательной и очень изящной теорией. Можно было бы думать, что малейшее изменение в ней должно внести в нее произвол и совершенно уничтожить всю красоту теории. Однако это не так: квантовая механика, пройдя ряд этапов развития и подвергшись не один раз самой основательной переделке, приняла теперь такой вид, и котором она может быть логически выведена из очень общих законов, и, несмотря на некоторую еще неполноту, достигла еще большего изящества и прелести, нежели классическая теория в своей области. Это произошло благодаря тому, что произведенные в классической теории изменения, хотя и очень существенны и связаны с введением совершенно новых представлений, тем не менее весьма немногочисленны и притом таковы, что большинство тех свойств, которым классическая теория обязана своей привлекательностью, перенесены в новую теорию без всякого изменения.

Необходимость основательной переделки законов и представлений классической механики обнаруживается наиболее ясно при рассмотрении известных экспериментальных фактов, относящихся к природе света. С одной стороны, явления интерференции и дифракции могут быть объяснены только на основе волновой теории света; с другой стороны, такие явления, как фотоэлектрический эффект и рассеяние света свободными электронами, показывают, что свет состоит из крошечных частиц, называемых фотонами и обладающих определенной энергией и количеством движения в зависимости от частоты. Существование фотонов, повидимому, так же реально, как существование электронов или других частиц, известных физике. Дробная доля фотона никогда не наблюдалась, и мы можем быть уверены в том, что она не может существовать.

Для того, чтобы построить последовательную теорию света, включающую явления интерференции и дифракции, мы должны считать, что фотоны управляются волнами каким-то непонятным с точки зрения обыкновенной механики образом. Эта глубокая связь между частицами и волнами имеет для новой квантовой механики очень большое и очень общее значение. Она проявляется не только в случае света. Все частицы таким же образом связаны с волнами, которые управляют ими и при надлежащих условиях приводят к явлениям интерференции и дифракции. Влияние волн на движение частиц тем менее заметно, чем частицы массивнее, и может быть легко обнаружено только в случае фотонов - самых легких частиц в мире.

Волны и частицы должны рассматриваться как две абстракции, полезные при описании одной и той же физической реальности. Не следует думать, что в реальном физическом мире существуют и волны и частицы и что можно построить механизм, действующий в согласии с классическими законами, который описал бы правильно связь между частицами и волнами и объяснил движение частиц. Всякая попытка построить такой механизм противоречила бы тем принципам, на которых основаны успехи современной физики. Квантовая механика стремится только формулировать свои законы таким образом, чтобы из них можно было заключить совершенно однозначно, что именно должно случиться при тех или иных заданных экспериментальных условиях. Было бы бесполезно и бессмысленно стремиться проникнуть в отношения между частицами и волнами глубже, чем требуется для достижения этой цели.

§ 2. ПОЛЯРИЗАЦИЯ ФОТОНОВ.

Хотя представление о том, что физическая реальность описывается и частицами и волнами, каким-то странным образом связанными друг с другом, имеет колоссальное значение и широкое поле применений, тем не менее это представление является лишь частным случаем более общего принципа - принципа суперпозиции. Этот принцип является основной новой идеей квантовой механики и исходной точкой ее расхождений с классической теорией.

Прежде чем приступить к объяснению принципа суперпозиции (наложения), мы рассмотрим сперва очень простой частный случай применения этого принципа, относящийся к явлению поляризации света. Известно из опыта, что когда фотоэлектрический эффект вызывается плоско-поляризованным светом, существует некоторое преимущественное направление электронного испускания. Отсюда видно, что поляризационные свойства света тесно связаны с его корпускулярными свойствами, и мы должны приписать поляризацию самим фотонам. Так например пучок световых лучей плоско-поляризованных в некотором направлении, должен считаться состоящим из фотонов, плоско-поляризованных в этом же направлении, а пучок лучей, поляризованных по кругу, - состоящим из фотонов, поляризованных по кругу. Каждый фотон, как мы будем говорить, имеет определенное состояние поляризации. Трудность заключается в необходимости согласовать эти представления с тем фактом, что свет можно разложить на поляризованные составляющие и снова сложить эти составляющие.

Предположим например, что пучок плоско-поляризованных лучей проходит через поляризатор и разлагается при этом на две составляющие, поляризованные под углами α и $\alpha + \frac{1}{2}\pi$ к первоначальному направлению поляризации пучка. Согласно классической оптике, интенсивности обеих составляющих будут отличаться от интенсивности первоначального пучка множителями $\cos^2\alpha$ и $\sin^2\alpha$. Условимся называть состояние фотона в первоначальном пучке состоянием 0, а в обеих

составляющих - состояниями α и $\alpha + \frac{1}{2}\pi$. Возникает вопрос: что случается с каждым отдельным фотоном, попадающим в поляризатор? Каким образом фотоны в состоянии 0 превращаются в фотоны в состояниях α и $\alpha + \frac{1}{2}\pi$?

Ответить на этот вопрос невозможно без помощи совершенно нового понятия, чуждого классической физике. Поэтому мы сперва рассмотрим другой вопрос, а именно - что будет окончательным результатом опыта, цель которого установить, что происходит с отдельным фотоном, попадающим в поляризатор? Только такие вопросы действительно важны, и на них квантовая механика дает всегда определенный ответ. Всякий ответ на первый вопрос, т. е. всякое описание того что происходит с фотоном в течение опыта, будет просто мнемоническим правилом для запоминания окончательного результата опыта. Не следует удивляться, если окажется невозможным дать такое описание, основанное на классических представлениях.

Наиболее непосредственный опыт заключался бы в следующем: возьмем падающий луч, состоящий из одного только фотона, и измерим энергию обеих составляющих. Результат, который предсказывает квантовая механика, состоит в том, что, при повторении такого опыта, иногда вся энергия фотона окажется сосредоточенной в одной составляющей, а иногда вся в другой. Такие случаи, когда часть энергии перешла к одной составляющей, а остальная часть к другой, не будут встречаться вовсе. Невозможно найти на опыте дробную часть фотона. Если повторять опыт много раз, то отношение числа опытов, которые покажут, что вся энергия фотона сосредоточена в составляющей α , к общему числу опытов окажется равным $\cos^2\alpha$, а в остальных опытах (число которых составляет дробь $\sin^2\alpha$ от общего числа опытов) мы найдем всю энергию фотона в составляющей $\alpha + \frac{1}{2}\pi$. Можно сказать, что у фотона есть

вероятность $\cos^2\alpha$ перейти в состояние α и вероятность $\sin^2\alpha$ перейти в состояние $\alpha + \frac{1}{2}\pi$. Эти значения вероятностей приводят к правильному классическому распределению энергии между фотонами в том случае, когда число фотонов в падающем пучке велико.

Таким образом индивидуальность фотона во всех случаях сохраняется, но только при этом приходится пожертвовать детерминизмом. Результат опыта не определен, как это было бы в классической теории, условиями, находящимися во власти экспериментатора. Самое большее, что можно предсказать, - это вероятность появления той или иной составляющей. Эта неопределенность, проходящая через всю квантовую механику и составляющая разительный контраст с классической теорией, на первый взгляд может показаться неудовлетворительной, так как она противоречит закону причинности. Следует заметить однако, что всякое измерение, имеющее целью установить величину энергии одной из составляющих (например посредством отражения от подвижного зеркала и измерения полученного зеркалом количества движения), в дальнейшем сделает невозможным такое сложение обеих составляющих, при котором могла бы произойти интерференция. Измерение, как мы увидим из общих законов квантовой механики, неизбежно вызовет изменение фазы, величину которого невозможно с уверенностью предсказать. Поэтому, как было указано Бором¹, отсутствие детерминированности в результате можно приписать неопределенности в величине тех возмущений, с которыми неизбежно связаны измерения, хотя и невозможно узнать детально, каким образом это происходит. Видимое нарушение закона причинности с этой точки зрения объясняется теоретически необходимым несовершенством методов измерения.

Рассмотрим теперь наш первый вопрос и попытаемся дать описание поведения фотона в течение опыта. Описание, дающее непрерывную картину в классическом духе, невозможно. Описание, которое нам позволяет дать квантовая механика, есть только способ выражения, полезный для вывода и для удержания в памяти результата опыта и никогда не приводящий к неверным следствиям. Не следует придавать ему слишком большое значение.

Необходимо предположить, что между различными состояниями поляризации фотона существует своеобразная связь такого рода, что, когда фотон находится например в состоянии 0 , его можно считать находящимся отчасти в состоянии α , а отчасти в состоянии $\alpha + \frac{1}{2}\pi$. Таким образом его можно считать находящимся отчасти в состоянии β , а отчасти в состоянии $\beta + \frac{1}{2}\pi$, где β - любой другой угол, или же отчасти в состоянии правой поляризации по кругу, а отчасти в состоянии левой поляризации по кругу. Можно даже считать его находящимся сразу в двух состояниях плоской поляризации не под прямым углом друг к другу (т.е. отчасти в одном из них, а отчасти в другом), хотя это редко оказывается удобным, или же считать его находящимся не в двух сразу, а в большем числе состояний. Существует много способов описать поведение фотона, и все они равно позволительны и равно хороши с теоретической точки зрения, хотя, несомненно, тот из них, который утверждает, что фотон находится в состоянии 0 , проще, чем тот, который утверждает, что фотон «размазан» по двум или большему числу состояний. Когда мы говорим, что фотон распределен или размазан по двум или большему числу состояний, то это описание, конечно дает только качественную картину. Математическая теория уточняет его, вводя числа, характеризующие это распределение и определяющие тот вес, с которым фотон находится в том или ином из этих состояний.

Нельзя представить себе наглядно, каким это образом фотон может находиться сразу в двух состояниях; еще труднее понять, каким образом это утверждение может быть эквивалентным утверждению, что он находится в какой-то другой паре состояний или в каком-то одном состоянии. Однако нам необходимо привыкнуть к тому соотношению между состояниями, которое описывается этим новым для нас языком, и мы должны построить последовательную математическую теорию этого соотношения.

В наших опытах с поляризацией действие поляризатора представляется очень простым, если мы будем считать падающие фотоны находящимися отчасти в состоянии α , а отчасти в

¹ N Bohr, Nature, p. 580, 1928. Русский перевод см. в сборнике «Причинность», Харьков, 1932 г.

состоянии $\alpha + \frac{1}{2}\pi$. Поляризатор разделяет обе составляющие α и $\alpha + \frac{1}{2}\pi$ на два отдельных пучка, так что после прохождения фотона через поляризатор мы должны говорить, что он входит отчасти в состав пучка с поляризацией α , а отчасти в состав пучка с поляризацией $\alpha + \frac{1}{2}\pi$. Мы не можем говорить, что фотон, прошедший через поляризатор, находится в одном определенном состоянии, если не придадим понятию «состояние» более общий смысл, о котором будет сказано дальше. Простейшим является то описание, которое только что дано и которое предполагает фотон распределенным между двумя состояниями. Других возможных описаний потребовалось бы распределить фотон между тремя и более состояниями; например можно было бы сказать, что он находится отчасти в первом пучке с поляризацией α , отчасти во втором пучке с поляризацией α , отчасти во втором же пучке с поляризацией β (β – произвольный угол) и отчасти во втором же пучке с поляризацией $\beta + \frac{1}{2}\pi$. Но подобное описание окажется полезным лишь в том случае, если второму пучку предстоит пройти через поляризатор еще один раз.

Рассмотрим, что происходит, когда мы определяем энергию фотона в одной из составляющих. Результатом этого измерения может быть энергия всего фотона, или нуль. Это, значит, что фотон должен внезапно перестать принадлежать отчасти одному пучку, а отчасти другому, и перейти целиком в один из пучков. Можно считать, что это внезапное изменение связано у фотона с той пертурбацией, которую неизбежно вызывает сам процесс измерения. Невозможно предсказать, в каком из двух пучков фотон будет найден. Из первоначального распределения фотона по обоим состояниям можно вычислить лишь вероятность того или иного результата этого измерения.

Этот способ описания поведения фотона в течение опыта приводит к одному важному следствию, а именно к тому уже упомянутому обстоятельству, что невозможно осуществить интерференцию между обеими составляющими после того, как измерена энергия одной из них. Когда фотон принадлежит отчасти одному пучку лучей, а отчасти другому, то при наложении этих пучков друг на друга, как покажет математическая теория, интерференция может иметь место. Но эта возможность исчезает, как только измерение энергии заставит фотон избрать один из пучков целиком. Другой пучок тогда перестает участвовать в описании поведения фотона, так что при всех дальнейших опытах, производимых над этим фотоном, он может считаться входящим, как обычно, только в один пучок.

Мы построили описание поведения фотона в течение опыта, основанное на новом и несколько смутных представлениях о возможности для фотона быть отчасти в одном состоянии, а отчасти в другом. Возможно, что читатель имеет право чувствовать, что мы вовсе не разрешили трудности, связанные с противоречием между волновым и корпускулярным представлениями, а только описали эту трудность особым языком и, пользуясь некоторыми свойствами волн и некоторыми свойствами частиц, дали формальное описание явления, не содержащее в себе ничего, чего бы мы не знали и раньше. Однако в действительности трудность. Связанная с противоречием между волнами и частицами, на самом деле разрешается, как только мы получаем возможность дать однозначные ответы на все вопросы, касающиеся результатов опыта. Единственная цель теоретической физики состоит в вычислении результатов, которые могут быть сравнены с опытом, и вовсе нет необходимости в утвердительном описании всего хода явления.

Нам могли бы возразить, что приведенное описание не ведет нас дальше, чем это могло бы сделать те туманные представления о связи между фотонами и электромагнитными волнами, которые существовали например до появления квантовой механики. В ответ на это мы напомним сделанное выше заключение о том, что после измерения энергии одного из пучков интерференция между пучками становится невозможной; такое заключение не могло бы быть получено из туманных представлений; очевидно только, что изложенные в этом параграфе идеи обладают пока еще чересчур качественным характером для того, чтобы достоинства новой теории сразу стали очевидны. В § 5 мы вернемся к вопросу о природе света и употребим несколько более количественный подход, который сделает более выпуклым различие между современной теорией и прежними туманными представлениями.

Во многих элементарных оптических опытах туманные представления окажутся вполне достаточными для того, чтобы дать точный ответ на вопросы, относящиеся к результатам опыта. В этих случаях квантовая механика не скажет вам ничего нового. Задача квантовой механики состоит в расширении того круга вопросов, на которые можно получить ответ, а совсем не в получении ответов настолько подробных, что опыт уже не в состоянии проверить их истинность.

§3 СУПЕРПОЗИЦИЯ И ИНДЕТЕРМИНИЗМ.

Те новые представления, которые мы ввели в описание поведения фотонов, должны быть обобщены и распространены на все атомные системы, т.е. на любую совокупность электронов и атомных ядер, взаимодействующих друг с другом, а также, быть может, и с фотонами. Необходимо сперва дать такое обобщение понятия «состояние», чтобы его можно было применить к любой атомной системе. Подобно тому как в случае фотона мы приписываем ему определенное состояние поляризации, когда он прошел через данный поляризатор точно так же и о любой атомной системе мы скажем, что она находится в данном определенном состоянии после того, как она претерпела определенного рода воздействие; предполагается, что привести ее в то же состояние возможно сколько угодно раз. Воздействие, которому подвергалась система, однозначно определяет ее состояние. В самом общем случае знание состояния системы предполагает знание тех сведений о пространственном ее расположении и внутреннем состоянии, которые вытекают из способа воздействия на систему.

Необходимо теперь представить себе, что состояния системы находятся в таком соотношении друг с другом, что если система на годится в заданном состоянии, то ее с таким же успехом можно считать находящейся отчасти в том или в ином из двух или большего числа состояний. Первоначальное состояние должно считаться результатом какого-то наложения друг на друга (суперпозиции) двух или большего числа состояний; с точки зрения классической физики такое наложение не имеет никакого смысла. Любое состояние может быть представлено, и притом бесконечным количеством способов, как результат суперпозиции двух или даже большего числа состояний. Обратное, любые два состояния или даже несколько состояний могут быть мысленно наложены друг на друга с тем, чтобы в результате такой суперпозиции получилось новое состояние, даже в том случае, если накладываемые друг на друга состояния относятся к различным положениям системы в пространстве. Так например, в описанном выше опыте с поляризацией фотона, когда фотон находится отчасти в пучке с поляризацией α , а отчасти в состав пучка с поляризацией $\alpha + \frac{1}{2}\pi$, мы можем считать, что он находится целиком в некотором определенном состоянии: ведь то воздействие, которому подвергся фотон, может быть в самом деле, как и требуется в определении, воспроизведено по желанию любое количество раз.¹

Если состояние системы является результатом суперпозиции двух других состояний, то его свойства представляют нечто промежуточное между свойствами этих двух состояний, причем они будут более или менее близки к свойствам одного из состояний в зависимости от того «веса», с которым оно участвует в суперпозиции. Состояние, представляющее результат суперпозиции двух других состояний, определяется совершенно однозначным образом, если даны эти два состояния, веса, с которыми они участвуют в суперпозиции, а также и некоторая разность фаз. Точный смысл весов и фаз будет ясен из общей математической теории, которой посвящена следующая глава. В частном же случае, рассмотренном выше, а именно в случае поляризации фотона, смысл весов и фаз определяется классической оптикой; так например, если накладываются друг на друга два состояния, соответствующие плоской поляризации в двух взаимно-перпендикулярных плоскостях, причем оба состояния обладают одинаковым весом, то результирующее состояние может быть, смотря по разности фаз, поляризованным по кругу в том или ином направлении, плоско-поляризованным под углом

¹ Предполагается, что фотон уже прошел через поляризатор, но что его энергия в той и в иной составляющей еще не была измерена.

$\frac{1}{4}\pi$ или поляризованном эллиптически. Все это верно, разумеется, лишь в том случае, когда оба накладываемые друг на друга состояния относятся к одному и тому же пучку лучей, т. е. когда все то что известно о положении фотона, одинаково относится к обоим складывающимся состояниям.

Теперь уместно слегка изменить смысл слова «состояние» и сделать его более точным. Будем считать, что состояние системы относится не к ее поведению в определенный момент (если бы это было так, то состояние было бы функцией времени), а к ее поведению в течение целого промежутка времени и притом промежутка неопределенной длины. Состояние, следовательно, относится к некоторой области в четырехмерном пространстве-времени, а не к области трехмерного пространства. Система, однажды приведенная в определенное состояние, будет оставаться нем до тех пор, пока мы оставляем ее в покое.

Отсюда не следует, конечно, что с системой не происходит никаких изменений, доступных контролю со стороны опыта. Система, вообще говоря, будет претерпевать ряд изменений, которые все относятся к данному состоянию которые могут быть предсказаны квантовой теорией. Мы можем совершенно условно считать, что система подвергается внешнему воздействию, изменяющему ее состояние, или же мы можем включить и эти внешние воздействия в определение системы и считать, что и после того, как произошло вмешательство этих воздействий, система продолжает претерпевать изменения, относящиеся к тому же самому состоянию. Примером может служить все те же случаи с фотоном, прошедшим через поляризатор и принадлежащим сразу двум пучкам. Мы можем рассматривать действие поляризатора как внешнее воздействие, «возмущающее» фотон и заставляющее его перейти в другое состояние; или же мы можем считать поляризатор частью «поля», в котором движется фотон, - тогда в пучке, падающем на поляризатор, фотон находится в том же самом состоянии, в каком он находится после прохождения через поляризатор, когда он принадлежит сразу двум пучкам и продолжает претерпевать сразу ряд изменений, не выводящих его из данного состояния. Общие законы квантовой механики с одинаковым успехом применяются и к тому и к другому определению «состояния». Существует однако два случая, когда мы, вообще говоря, вынуждены считать внешнее воздействие возмущением, изменяющим состояние системы: один из них – это тот, когда внешнее воздействие заключается в наблюдении над системой, а второй – когда воздействие состоит в приведении системы в заранее заданное состояние.

Ведя новый пространственно-временной смысл слова «состояние», мы должны придать аналогичный смысл и слову «наблюдение». Для этого нужно, чтобы понятие наблюдения включало и определенный момент времени, когда наблюдение должно быть произведено или когда должен вступить в действие предназначенный для производства наблюдения прибор, причем нужно, чтобы этот момент времени был задан по отношению к тому моменту времени, когда система была приведена в данное состояние. Заметим, что имеет смысл говорить о наблюдении, произведенном над системой в данном состоянии, даже и в том случае, когда наблюдение относится к моменту времени, предшествовавшему переходу системы в данное состояние. Ведь если этот переход произошел в момент времени t_0 и если система находится в заданном состоянии после момента t_0 , то мы можем ставить себе представление о том, как система должна была бы вести себя до момента t_0 для того, чтобы без всякого вмешательства извне оказаться в заданном состоянии после t_0 . Иными словами, мы можем продолжить данное состояние назад за момент времени t_0 , а следовательно и говорить о возможных результатах наблюдения, относящегося к данному состоянию и к моменту времени, предшествовавшему t_0 .

Введение неопределенности в результаты наблюдений, сделанное нами при обсуждении опытов с поляризацией фотона, должно быть распространено на более общий случай атомных систем. Если производится наблюдение над атомной системой, подвергшейся определенному воздействию и следовательно находящейся в определенном состоянии, то результат наблюдений, вообще говоря, не может быть определен заранее; иными словами, если несколько раз повторять один и тот же опыт в совершенно одинаковых условиях, то результаты его будут оказываться различными. Если повторить опыт большое количество раз, то число опытов, приводящих к одному и тому же определенному результату, будет

определенной дробной частью полного количества произведенных опытов; поэтому можно говорить что каждый раз, когда производится опыт, существует определенная вероятность получить этот результат. Эту вероятность можно вычислить на основании теории. В частном случае может оказаться, что она равна единице; в этом частном случае результат опыта может быть вполне определен заранее.

Неопределенность результатов наблюдения представляет необходимое следствие тех суперпозиционных соотношений, которые согласно квантовой механике должны существовать между состояниями системы. Предположим, что два состояния А и В таковы, что существует некоторое определенное рода наблюдение, которое будучи произведено над системой в состоянии А, наверно приведет к какому-то определенному результату, а будучи произведено над той же системой в состоянии В, наверно не приведет к этому результату. Такие два состояния мы назовем ортогональными. Допустим теперь, что это же наблюдение производится над системой в таком состоянии, которое является результатом суперпозиции состояний А и В. Не может быть, чтобы результат такого наблюдения можно было заранее предсказать (за исключением лишь того частного случая, когда А или В участвует в суперпозиции с весом равным нулю). Должна существовать конечная вероятность p того, что получится тот результат, который в состоянии А должен бы был получиться наверно, и конечная вероятность $1 - p$ того, что этот результат не получится. Непрерывно меняя относительные веса обоих состояний в суперпозиции, мы получим непрерывный ряд состояний, начиная от чистого А и кончая чистым В, причем вероятность получения того результата наблюдения, который в состоянии А получался наверно, будет меняться непрерывно от 1 до 0.

Выше было упомянуто, что наблюдение не может считаться вполне определенным, если не указан момент времени, когда оно должно производиться. В отдельных частных случаях может оказаться, что результат наблюдения или вероятность получить определенный результат наблюдения не зависит от времени. Если состояние системы таково, что это относится ко всем наблюдениям, которые можно над нею произвести, то это состояние называется стационарным, и мы можем представлять себе дело так, как если бы условия, о которых система находится, оставались неизменными.

Характерная для квантовой механики возможность наложения различных состояний системы друг на друга, причем получаются новые состояния этой системы, связана с тем фактом, что в математической формулировке этой теории уравнения, которыми определяются состояния, оказываются линейными. Нет ничего неестественного в том что была усмотрена аналогия между атомными системами в квантовой механике и такими системами в механике классической, которые описываются линейными уравнениями и для которых следовательно имеет место принцип суперпозиции (например колеблющаяся струна или мембрана). Эта аналогия привела к тому, что квантовую механику иногда называют «волновой механикой». Тем не менее следует подчеркнуть, что суперпозиция, имеющая место в квантовой механике, глубоко отлична от той суперпозиции которая встречается в классической теории. Указанная аналогия может приводить к серьезным ошибкам. Ее недостаточность обнаруживается из такого примера. Сравним состояния атомной системы с состояниями колеблющейся мембраны. Если наложить состояние колеблющейся мембраны на это же самое состояние, то результатом такого наложения будет новое состояние с удвоенной против прежнего амплитудой. Если же, с другой стороны, состояние атомной системы налагается само на себя по правилам квантовой механики, то результирующее состояние ничем не будет отличаться от первоначального. В случае атома нет ничего, что походило бы на абсолютную величину амплитуды колебаний мембраны, определенную независимо от относительных значений амплитуд ее различных точек.

§ 4. СОВМЕСТИМЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ.

Наблюдение, произведенное над какой-либо системой, является, вообще говоря, возмущением, изменяющим ее состояние; после того, как наблюдение произведено, система уже не находится в том состоянии, в каком она была до наблюдения. Только в том случае состояние системы может при этом остаться неизменным, если ее начальное состояние таково,

что при данном наблюдении некоторый определенный результат получается с вероятностью равной единице, т. е. с достоверностью.¹ Это вытекает из следующего рассуждения.

Предположим, что вероятность получить при наблюдении данный результат равняется p . Допустим, что произведенное наблюдение дало как раз этот результат; попробуем немедленно повторить то же самое наблюдение еще раз, пока система находится в том состоянии, котором она оказалась благодаря первому наблюдению. Вероятность получить второй раз тот же самый результат должна быть равна единице, так как мы не можем допустить, что система могла претерпеть какое-либо изменение в бесконечно малый промежуток времени между обоими наблюдениями.

Итак, в то время как первое состояние системы таково, что вероятность получить данный результат определенного наблюдения равна p , второе состояние (то состояние, в котором система оказалась после первого наблюдения) таково, что вероятность того же результата при таком же наблюдении равна единице. Поэтому, если p не равно единице то второе состояние должно отличаться от первого, так как вероятность получить данный результат есть величина вполне определенная для каждого данного состояния. Предполагается при этом, что второе состояние, о котором идет речь, есть состояние, возникшее в упомянутом выше случае, когда первое наблюдение привело именно к данному результату. Если бы результат был иным, то мы получили бы не то второе состояние, как в рассмотренном случае, а другое, но и оно было бы отлично от первого состояния, если только вероятность p , соответствующая этому новому результату, не равна единице.

Поэтому, если над системой, находившейся в данном состоянии, было произведено наблюдение, то, вообще говоря, мы не можем произвести еще одно наблюдение и предполагать при этом, что оно относится к прежнему состоянию системы. Первое наблюдение уже расстроило первоначальное состояние системы, и перед тем как производить второе наблюдение, нужно воспроизвести это состояние вновь.

Может случиться однако, что оба наблюдения обладают друг по отношению к другу таким свойством, что хотя первое наблюдение и расстраивает состояние системы, но это ни в какой мере не отражается на вероятности получения тех или иных результатов второго наблюдения. При этом под вероятностью получения того или иного результата второго наблюдения подразумевается вероятность, вычисленная в начале опыта, т. е. до того, как стал известен результат первого наблюдения, а не вероятность, вычисленная после того, как первое наблюдение уже дало определенный результат. Два наблюдения, обладающие этим свойством при том условии, что мы производим их (или по крайней мере первое из них), не расстраивая состояние системы больше, чем это необходимо в теории (на практике для этого требуются весьма благоприятные условия), называются совместимыми. Три и больше наблюдений называются совместимыми, если совместимы любые два из них. Два или больше наблюдений могут быть совместимыми по отношению к некоторому определенному

¹ Из рассуждения вытекает только то, что состояние системы в этом случае может стать неизменным, но не то, что оно обязано таким остаться; иными словами, если в данном состоянии системы некоторый определенный результат данного наблюдения обладает вероятностью, отличной от нуля и от единицы, то наблюдение неизбежно заставляет систему переменить свое состояние, но если вероятность получения некоторого определенного результата данного наблюдения равна единице, то это наблюдение может (вообще говоря) изменить состояние системы и может оставить его неизменным. В действительности вопрос о том, меняется ли состояние системы при наблюдении, если это состояние таково, что данное наблюдение приводит к однозначному результату, значительно более сложен. Наблюдение может иметь целью установить какое-либо свойство системы в момент времени, предшествовавший наблюдению; возможно и наблюдение, имеющее целью установить то же свойство системы в момент времени, следующий за наблюдением. Мы можем утверждать лишь то, что если наблюдение первого из двух только что описанных родов следует за наблюдением второго рода, то оно приводит к однозначному результату (и то лишь при условии, что каждое наблюдение производится с наименьшей возможной пертурбацией системы).

начальному состоянию системы или же по отношению ко всем возможным начальным состояниям.

В дальнейшем под совместимостью двух или большего числа состояний подразумевается именно вторая возможность, если только не сказано противное.

Условие совместимости двух наблюдений, согласно законам квантовой механики, симметрично по отношению к обоим этим наблюдениям. Если одно из двух совместимых наблюдений, например α_1 , произведено в момент времени t_1 , а другое, например α_2 , в более поздний момент времени t_2 , то согласно сделанному выше определению, вероятность данного результата наблюдения α_2 будет одна и та же как в том случае, когда наблюдение α_2 производится над системой в ее первоначальном состоянии, так и тогда, когда оно производится над системой в том ее состоянии, которое наступает после наблюдения α_1 . Условие симметричности заставляет требовать, чтобы вероятность получения данного результата наблюдения α_1 оказалась одинаковой как в случае первоначального состояния системы, так и в случае состояния, наступающего после наблюдения α_2 ; при этом состояние, наступившее после наблюдения α_2 в момент времени t_2 необходимо продолжить назад за момент времени t_2 (см. предыдущий параграф) для того, чтобы можно было говорить о наблюдении α_1 в этом состоянии в момент времени t_1 . под вероятностью данного результата в состоянии, наступающем после некоторого наблюдения, каждый раз подразумевается среднее значение этой вероятности для всех состояний, которые могут наступить после этого наблюдения, причем при вычислении среднего значения каждое состояние входит с определенным весом, равным вероятности того, что именно оно наступит после данного наблюдения.

Мы уже указывали, что после каждого наблюдения система приходит в такое состояние, в котором это же наблюдение, будучи повторенным, дало бы некоторый определенный результат с вероятностью равной единице.

Предположим теперь, что над системой производят совместимые наблюдения $\alpha_1, \alpha_2, \dots$. Окончательное состояние при этом всегда таково, что если в этом состоянии произвести над системой любое из наблюдений α_r , то некоторый результат этого наблюдения будет обладать вероятностью, равной единице: ведь это утверждение верно в том случае, если система находится в состоянии, наступающем после наблюдения α_r , а вследствие условия совместимости оно останется верным и после того, как над системой были произведены остающиеся наблюдения $\alpha_{r+1}, \alpha_{r+2}, \dots$. Существование состояний, в которых любое из совместимых наблюдений должно с вероятностью, равной единице, дать один определенный результат, является одним из важнейших свойств совместимых наблюдений.

Последовательность, в которой заданы наблюдения, конечно не должна обязательно совпадать с их последовательностью во времени, так как мы имеем право говорить о наблюдении системы в данном состоянии в момент времени, предшествовавший возникновению этого состояния.

Особенно интересен тот случай, когда два совместимые наблюдения относятся оба к одному и тому же моменту времени. Условие совместимости выражается в этом случае так, что если бы одно из этих наблюдений было сделано через очень короткий промежуток времени после другого, то вероятность получить определенный результат была бы такой же самой, как если бы это другое наблюдение не было сделано вовсе.

Часто оказывается удобным считать два или больше совместимых наблюдений одним единственным наблюдением, результат которого выражается двумя или большим количеством чисел (особенно в том случае если рассматриваемые совместимые наблюдения производятся одновременно). Нам придется часто иметь дело с наибольшим возможным числом независимых совместимых наблюдений, производимых над системой одновременно; для краткости мы будем называть такую совокупность наблюдений максимальным наблюдением. Когда над системой производится максимальное наблюдение, то наступающее вслед за тем состояние вполне определяется результатом этого наблюдения и не зависит от предыдущего состояния. Это может считаться аксиомой или более точным определением понятия «состояние».

Состояние в котором система находится после того, как над ней было произведено максимальное наблюдение, обладает тем свойством, что существует некоторое максимальное

наблюдение, которое, будучи произведено над системой в этом состоянии, должно с необходимостью привести к некоторому вполне определенному результату (а именно, если мы повторим еще раз то же самое наблюдение которое уже было произведено, то получим еще раз тот же самый результат).

Каждое состояние может быть охарактеризовано как состояние, наступившее после того, как было произведено максимальное наблюдение, которое привело к некоторому результату, или же оно может быть описано каким-нибудь способом, эквивалентным этому. Мы можем вывести отсюда заключение, что для каждого состояния существует максимальное наблюдение, которое должно с несомненностью привести к некоторому определенному результату, и обратно, если мы рассмотрим некоторый возможный результат максимального наблюдения, то всегда должно существовать такое состояние системы, в котором это наблюдение должно с несомненностью давать именно этот результат.

§ ЕЩЕ О ФОТОНАХ.

Когда квантовая механика применяется к системе, состоящей всего-навсего из одной свободно движущейся частицы, то уравнений, определяющие состояние системы, оказываются, как мы увидим в дальнейшем, обыкновенными уравнениями распределения волн. Это обстоятельство и является причиной того, что частица обладает многими свойствами волн; именно потому мы можем представлять свое дело так, как если бы частица в данном состоянии была связана с данной волной. Для того, чтобы более отчетливо природу соотношений, существующих между волнами и частицами, рассмотрим типичный пример противоречия между волновой и корпускулярной теорией света и то разрешение этого противоречия, которое дает квантовая механика.

Предположим, что луч света был разделен на две составляющие одинаковой интенсивности, между которыми затем происходит интерференция. По старой корпускулярной теории мы сказали бы, что обе составляющие содержат одинаковое количество фотонов, после чего мы потребовали бы, чтобы каждый фотон в одной составляющей пучка интерферировал одним фотоном в другой составляющей. При одних условиях интерференции эти два фотона уничтожали бы друг друга, а при других превращались бы в целых четыре. То противоречит представлению о фотонах как о дискретных частицах и кроме того не может быть согласовано с законом сохранения энергии, который должен соблюдаться в каждом элементарном процессе и быть верным не только статически.

Квантовая механика следующим образом разрешает это затруднение: каждый фотон должен считаться входящим отчасти в одну составляющую пучка, а отчасти в другую, в согласии с представлением о суперпозиции состояний. Каждый фотон интерферирует только с самим собой. Интерференция между двумя фотонами невозможна. Решение уравнений Максвелла, дающее волновую картину явления, относится к одному фотону, а не к целой их совокупности. Вычисляемая из этого решения относительная интенсивность света в различных точках пространства пропорциональна вероятности найти в этих точках фотон, когда производится опыт с целью определить его положение пространстве. При этом важны только относительные интенсивности в различных точках; абсолютная интенсивность не получает в квантовой механике никакого истолкования. Не следует пытаться установить соотношение между абсолютной интенсивностью волн и полным количеством частиц; невозможность этого находится в резком противоречии с изложенными выше старыми идеями о связи между частицами и волнами.

Точка зрения квантовой механики, конечно, не может помочь нам наглядно представить себе нечто среднее между частицами и волнами; польза той формулировки, согласно которой один и тот же фотон принадлежит отчасти одной составляющей пучка, а отчасти другой, заключается в том, что она напоминает нам о тесной связи между обеими составляющими и не позволяет нам приходить интуитивно к неверным заключениям, к которым мы приходим, когда на основании старых воззрений представляем себе, что каждая составляющая обладает своими особыми фотонами. Так например, то требование, согласно которому вероятность найти фотон где-либо в пространстве постоянно равна единице, напоминает нам, что, как бы ни происходила интерференция между обеими составляющими

пучка, они должны усиливать друг друга в одном месте пространства, если они взаимно нейтрализуются в другом, и закон сохранения энергии должен оставаться верным. Поэтому признание справедливости закона сохранения энергии в каждом элементарном процессе не связано ни с какими дальнейшими затруднениями.

§ 6. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СУПЕРПОЗИЦИИ (НАЛОЖЕНИЯ).

Теперь мы дадим определение суперпозиции состояний. Мы говорим, что состояние A может быть получено при суперпозиции (или наложении) состояний B и C , если для каждого возможного результата наблюдения системы в состоянии A существует конечная (т.е. отличная от нуля) вероятность получить тот же результат при производстве этого же наблюдения по крайней мере в одном из состояний B и C .¹ Принцип суперпозиции утверждает, что любые два состояния B и C могут быть наложены друг на друга так, что результирующее состояние A удовлетворяет этому определению; мало того, производя суперпозиции одних и тех же двух состояний B и C различными способами, мы получаем различные результирующие состояния A . Принцип суперпозиции является основанием всей квантовой механики. Он представляет полную противоположность классическим представлениям, согласно которым каждое наблюдение должно приводить к совершенно определенному результату и в случае двух различных состояний всегда существует хотя бы одно наблюдение, которое приводит в одном из этих состояний к одному, а в другом к другому результату.

Из определения суперпозиции непосредственно вытекают следующие элементарные теоремы: сами состояния B и C являются частными случаями тех состояний, которые получаются при суперпозиции B и C ; далее, если при суперпозиции состояний A и B получается состояние P , то при суперпозиции состояния P с состоянием C должно получиться состояние Q , обладающее тем свойством, что если некоторое наблюдение приводит в состоянии Q к некоторому результату, то всегда существует конечная вероятность получить этот же результат при том же наблюдении в одном из двух состояний P и C , а следовательно существует конечная вероятность получить при том же наблюдении этот же результат в одном из трех состояний A , B и C . Таким образом свойство, которым обладает состояние Q , симметрично по отношению ко всем трем состояниям A , B и C , и следовательно порядок, в котором производится суперпозиция этих трех состояний, не играет роли. Ясно, что это совершенно необходимо для того, чтобы слово «суперпозиция» (наложение) действительно удачно описывало соотношение, существующее между состояниями.

Другой пример следствия, вытекающий из определения суперпозиции, таков: если некоторое наблюдение системы в состоянии A должно наверно привести к совершенно определенному результату и если то же самое наблюдение наверно даст тот же самый результат в другом состоянии B , то и во всяком состоянии, возникающем при суперпозиции A и B , это наблюдение должно дать тот же самый результат. Никакой другой результат не может получиться, потому что вероятность этого другого результата в обоих состояниях A и B равна нулю.

На основе понятия о суперпозиции мы могли бы построить всю квантовую механику, ограничившись при этом лишь самым необходимым минимумом добавочных допущений. Хотя такой способ действий был бы всего логичнее, его все же нельзя признать наиболее удобным, так как законы квантовой механики настолько тесно переплелись между собой, что из них очень нелегко выделить то минимальное число аксиом, из которых все остальное вытекает чисто логическим путем; кроме того, такое выделение основных аксиом во всяком случае выглядело бы несколько искусственным. Поэтому мы придерживаемся здесь следующего метода: сперва мы дадим все простые общие законы квантовой механики в той форме, в которой они легче всего формулируются и запоминаются; затем мы выведем из них следствия. Это значит, что мы все время будем выводить заключения, необходимые для того, чтобы оправдать физический смысл теории, или следствия, вытекающие из представления о

¹ Иными словами, если всякий результат наблюдения, обладающий в состояниях B и C вероятностью равной нулю, обладает такой же вероятностью и в состоянии A .

суперпозиции. Такого рода выводы докажут нам законность и внутреннюю непротиворечивость наших основных допущений.

WWW.NIX.RU

II. СИМВОЛИЧЕСКАЯ АЛГЕБРА СОСТОЯНИЙ И НАБЛЮДАЕМЫХ ВЕЛИЧИН. § 7. СЛОЖЕНИЕ СОСТОЯНИЙ.

Для обозначения таких физических понятий, как состояния системы или динамические переменные, мы введем особые символы. Эти символы мы будем применять в особом алгебраическом исчислении, основанном на ряде аксиом, которые будут изложены ниже. Для того, чтобы теория была полна, необходимо обладать правилами, позволяющими выразить любые физические условия в виде уравнений между символами и, наоборот, придавать физическое толкование написанным символическим уравнениям. Типичное вычисление в квантовой механике ведется по следующей примерной схеме: дается, что система находится в определенном состоянии, в котором динамические переменные имеют определенные значения. Это условие записывается в виде уравнений между символами, обозначающими состояние и динамические переменные. Из этих уравнений выводятся в согласии с аксиомами нашей символической алгебры новые уравнения, а из них получаются уже и физические следствия. Истинная сущность каждого из употребляемых символов нигде не уточняется и нет никакой необходимости ее знать. Над символами производятся чисто формальные операции; необходимо знать только алгебраические аксиомы, которым они подчиняются, и соотношения между уравнениями содержащими эти символы, и физическими условиями. Эти аксиомы и эти соотношения содержат ряд физических законов, которые не возможно подходящим образом проанализировать или даже сформулировать каким-либо другим путем.

Каждое состояние механической системы обозначается символом ψ . Различные состояния различаются при этом индексами, например $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_r$. Если состояние ψ_0 может быть получено суперпозицией состояний ψ_1 и ψ_2 , то это соотношение между состояниями записывается уравнением вида

$$\psi_0 = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (1)$$

где c_1 и c_2 - числа, которые могут быть мнимыми или комплексными. Придавая коэффициентам c_1 и c_2 , различные значения, мы получаем ряд состояний, которые образуются при суперпозиции состояний ψ_1 и ψ_2 . Таким образом можно складывать любые

два ψ -символа с произвольными коэффициентами c_1 и c_2 , причем сумма будет новым ψ -символом, обозначающим состояние, получающееся при суперпозиции обоих исходных состояний, если только исключив из рассмотрения тот частный случай, когда сумма равна нулю. Мы допускаем, что при этом соблюдаются обычные алгебраические аксиомы сложения, т. е. аксиома коммутативности

$$c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 = c_2 \psi_2 + c_1 \psi_1$$

и аксиома ассоциативности

$$(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) + c_3 \psi_3 = c_1 \psi_1 + (c_2 \psi_2 + c_3 \psi_3).$$

Первая из этих аксиом имеет тот смысл, что суперпозиция двух состояний симметрична по отношению к этим состояниям, что очевидно из определения, данного в § 6. Вторая аксиома имеет тот же смысл, что и теорема, доказанная в § 6, о том, что при последовательных суперпозициях порядок не играет роли. Итак наши допущения не противоречат определению суперпозиции. Но они идут дальше этого определения и содержат новые физические законы. Например мы можем заключить, что

если состояние ψ_0 может быть получено посредством суперпозиции двух состояний ψ_1 и ψ_2 и следовательно связано с ним уравнением (1), то при условии $c_1 \neq 0$ состояние ψ_1 может быть получено посредством суперпозиции состояний ψ_0 , ψ_1 и ψ_2 . Это мы не сумели бы вывести из определения суперпозиции, данного § 6. Когда между тремя состояниями существует такое симметрическое соотношение, то они называются зависимыми. Обобщая это определение, можно сказать, что n состояний ψ_0 и ψ_2, \dots, ψ_n , зависимы или независимы, смотря потому, существует или не существует между ними соотношение вида

$$c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_n \psi_n = 0. \quad (2)$$

Выше упоминалось, что когда состояние накладывается само на себя, то результирующее состояние совпадает с исходным. Поэтому наша символическая схема должна быть такой, чтобы символ $\psi_1 + \psi_1$ или $2\psi_1$, обозначал то же самое состояние, что и ψ_1 . Мы делаем еще более общее допущение, а именно предполагаем, что $c\psi_1$ обозначает то же самое состояние, что и ψ_1 , если c есть любое отличное от нуля вещественное или комплексное число. Вытекающий из этого допущения характер связи между состояниями и символами станет пожалуй более понятным, если представить себе ψ в виде векторов в пространстве с достаточно большим числом измерений. Требуемое число измерений равно числу независимых состояний системы, которое, вообще говоря, бесконечно. Уравнение вида (1) или (2) может считаться векторным уравнением, в котором векторы, вообще говоря, комплексны. При этом можно считать, что состояние системы вполне определяется направлением вектора. Векторы различной длины, но одинакового направления обозначают одно и то же состояние.

Введем теперь другой ряд символов $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, также обозначающих состояния.

Всякое состояние, обозначенное ψ -символом ψ_r может быть обозначено также и φ -символом φ_r с тем же самым индексом. Когда ψ -символы, соответствующие трем состояниям, удовлетворяют соотношению (1), мы допускаем, что φ -символы тех же самых состояний удовлетворяют соотношению

$$\overline{\varphi_0} = \overline{c_1} \overline{\varphi_1} + \overline{c_2} \overline{\varphi_2} \quad (3)$$

(черта над буквой обозначает комплексно-сопряженную величину). О символах φ предполагается, что и они обладают коммутативными и ассоциативными свойствами сложения, а также и всеми другими свойствами ψ -символов. Так например, $c\varphi_1$,

обозначает то же состояние, что и φ_1 . Далее, n состояний $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ могут считаться по определению независимыми, если между ними не существует соотношения вида

$$c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + \dots + c_n \psi_n = 0. \quad (4)$$

Теория совершенно симметрична по отношению к символам φ и ψ . Сумма символа ψ и символа φ не имеет никакого смысла и потому нигде не встретится в теории.

Введение φ -символов, обозначающих состояния системы на ряду с ψ -символами, может показаться излишним, но в действительности оно совершенно необходимо, если коэффициенты c_r принимают комплексные значения и желательно сохранить симметрию между обоими квадратными корнями из -1 . Нужно, чтобы суперпозиция, описываемая уравнением (1) и характеризующаяся двумя комплексными числами c_1 и c_2 , определялась с таким же удобством и двумя сопряженными комплексными числами c_1 и c_2^* ; поэтому мы и вынуждены ввести уравнение (3) на равных правах с уравнением (1).

Мы видели, что φ -символ или \square -символ может быть помножен на любое число, после чего он обозначает то же самое состояние, какое обозначал до помножения. Поэтому можно положить

$$\psi_r = a_r \psi_r^*, \quad \varphi_s = b_s \varphi_s^*, \quad (4)$$

где a и b — любые не равные нулю числа, и рассматривать вместо символов ψ и φ символы ψ^* и φ^* . Для того однако, чтобы связь между уравнениями (1) и (3) сохранилась и для символов со звездочками, коэффициенты a и b должны удовлетворять некоторым соотношениям. Уравнения (1) и (3) дают

$$\begin{aligned} \psi_0^* &= \frac{c_1 a_1}{a_0} \psi_1^* + \frac{c_2 a_2}{a_0} \psi_2^* \\ \varphi_0^* &= \frac{c_1 b_1}{b_0} \varphi_1^* + \frac{c_2 b_2}{b_0} \varphi_2^* \end{aligned}$$

Для того, чтобы коэффициенты второго из написанных только что уравнений были сопряженными по отношению к коэффициентам первого из них, необходимо должно иметь место

$$b_1 : b_0 = \overline{a_1 : a_0}, \quad b_2 : b_0 = \overline{a_2 : a_0},$$

отсюда

$$b_r = f \overline{a_r}, \quad (5)$$

где число f не зависит от индекса r .

Связь между уравнениями (1) и (3) и условие (5), которому должно подчиняться преобразование (4) для того, чтобы эта связь сохранялась, приводят к заключению, что φ_r пропорционально величине, сопряженной с соответствующим φ_r . При надлежащей

величине коэффициента \int в преобразовании (4) и (5) эта пропорциональность становится равенством. Таким образом, если мы будем пользоваться наглядным изображением символов ψ в виде векторов, символ φ будет сопряженным комплексным вектором по отношению к соответствующему ψ_r . Следует заметить однако, что характер сопряжения символов ψ и φ не совсем такой же самый, как у обыкновенных комплексных чисел, поскольку мы не можем придать определенный смысл расщеплению символа ψ на вещественную и мнимую части. Желая выделить вещественную часть обыкновенного комплексного числа, мы должны взять арифметическую среднюю между этим числом и числом, ему сопряженным; но в случае ψ -символа мы не можем так поступить, потому что нельзя складывать ψ и φ . Таким образом соотношение между ψ_r и φ_r не совсем такое же, как между двумя сопряженными комплексными числами. Для того, чтобы удержать в памяти это различие, мы будем называть символ ψ и соответствующий ему символ φ мнимо-сопряженными, называя комплексно-сопряженными только такие количества, которые могут быть разбиты на вещественную и мнимую части (например обыкновенные комплексные числа). Обыкновенные векторы, разумеется, могут быть разбиты на вещественную и мнимую части, как и числа, вследствие чего наглядное изображение символов ψ и φ в виде векторов оказывается не вполне точным, хотя иногда оно и бывает полезно. Поэтому, пользуясь наглядным векторным изображением, мы должны помнить, что такое изображение несовершенно, так как, позволяя складывать ψ -вектор с φ -вектором, оно наделяет символы ψ и φ такими новыми свойствами, которые с точки зрения квантовой механики не являются ни необходимыми ни дозволенными.¹

§ 8. ПЕРЕМНОЖЕНИЕ СОСТОЯНИЙ.

До сих пор мы рассматривали только такие функции символов φ и ψ , которые являются линейными комбинациями одних только ψ или одних только φ , причем коэффициентами служат числа. Теперь мы предположим, что любой символ может быть помножен на любой символ и что произведение их будет числом, вообще говоря, комплексным. Такое произведение всегда будет писаться в виде $\varphi\psi$, т. е. сперва φ , а потом ψ . Произведения вида

$\psi\varphi, \psi_1\psi_2, \varphi_1\varphi_2$ не имеют смысла и никогда не встретятся в нашей теории.

При этом делается допущение, что произведения удовлетворяют дистрибутивной аксиоме умножения, т. е.

$$\left. \begin{aligned} (\varphi_1 + \varphi_2)\psi &= \varphi_1\psi + \varphi_2\psi \\ \varphi(\psi_1 + \psi_2) &= \varphi\psi_1 + \varphi\psi_2 \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

а также и аксиоме

$$\varphi(c\psi) = (c\varphi)\psi = c(\varphi\psi), \quad (7)$$

¹ Это место нуждается в разъяснении. В наглядном векторном изображении φ - и ψ - символам соответствуют ковариантный и контравариантный векторы, которых нельзя складывать так как такая операция не имеет инвариантного смысла. Теория, разумеется, остается совершенно симметричной по отношению к этим обоим векторам: если физическая величина является вектором, то в ее природе совсем не заключается ковариантный или контравариантный характер; состояние механической системы может быть с одинаковым успехом изображено и в виде φ -вектора и в виде ψ -вектора. Эти свойства векторного изображения выступают еще отчетливее, если пользоваться методом представителей (см. главу IV; для простоты предположим, что мы имеем дело с ортогональными представлениями). В этом случае представителем ψ -символа или ψ -вектора будет матрица, состоящая из одного столбца чисел (составляющих вектора); представителем φ -символа или φ -вектора будет матрица, состоящая на одной строки чисел, комплексно-сопряженных по отношению к числам первой матрицы. Отсюда видно, что обе матрицы являются эрмитовски-сопряженными друг по отношению к другу; само собой понятно, что их сложение не имеет смысла. Вектора φ и ψ можно было бы называть эрмитовски-сопряженными или адьюнгированными, то же самое- относится и к наблюдаемым a и \bar{a} .

Дирак расчленяет это понятие, называя эрмитовски-сопряженные величины комплексно-сопряженными в том случае, если они представляются квадратными взаимно-адьюнгированными матрицами и потому могут складываться, и мнимо-сопряженными в том случае, если они представлены прямоугольными взаимно-адьюнгированными матрицами и поэтому складываться не могут. При этом Дирак, говоря о векторном изображении, повсюду подразумевает векторы в обыкновенном вещественном пространстве; совокупность канонических преобразований квантовой механики (см. главу V) не может быть однозначно отображена совокупностью вращений координатной системы в вещественном пространстве (заметим, что, говоря о вещественном пространстве, Дирак не предполагает при этом, что сами векторы должны обладать вещественными составляющими; он имеет в виду только- то, что коэффициенты линейных преобразований вещественны). В этом смысле, действительно, векторное изображение несовершенно. Однако нет надобности пользоваться обязательно вещественным пространством; векторное изображение в комплексном пространстве (в котором, например, обычные ортогональные преобразования аналитической геометрии заменяются более общими так называемыми унитарными преобразованиями) дает квантовой механике метод столь же совершенный, как и дираковский метод φ - и ψ - символов.

Примечание переводчика.

где c —любое число. В наглядном изображении состояний при помощи векторов мы можем считать число $\varphi\psi$ скалярным произведением двух векторов φ и ψ . Условия (6) и (7) при этом будут удовлетворены. Однако векторное изображение позволяет составлять и

произведения вида $\varphi_1 \varphi_2$ и $\psi_1 \psi_2$. Таким образом мы снова видим, что векторное изображение дает символам ψ и φ больше свойств, чем требуется квантовой механикой.¹

В соответствии с нашим взглядом на ψ и φ как на мнимо-сопряженные величины, мы сделаем следующие два допущения:

$$\begin{aligned} \varphi_r \psi_s &= \overline{\varphi_s \psi_r} \\ \varphi_r^* \psi_r &> 0. \end{aligned} \quad (8),(9)$$

Из первого допущения в частном случае $s = r$ вытекает, что $\varphi_r \psi_r$ вещественно. Второе допущение заставляет считать $\varphi_r \psi_r$, не только вещественным, но и положительным. Желая исследовать законность этих допущений, рассмотрим, что произойдет в случае преобразования вида (4) и (5). Равенство (8) дает

$$f \overline{a_s} a_s \varphi_r^* \psi_s^* = \overline{f a_s a_r \varphi_s^* \psi_r^*},$$

а неравенство (9) дает

$$f \overline{a_r} a_r \varphi_r^* \psi_r^* > 0.$$

Из этих соотношений мы получаем

$$\varphi_r^* \psi_s^* = \overline{\varphi_s^* \psi_r^*}, \quad \varphi_r^* \psi_r^* > 0$$

в том и только в том случае, когда f есть вещественное положительное число. Это ограничение следовательно должно быть наложено на преобразования (4) и (5) для того, чтобы условия (8) и (9) оставались ненарушенными.

В дальнейшем мы будем придерживаться того взгляда, что каждый φ -символ не только пропорционален, но и равен величине, мнимо-сопряженной с соответствующим символом ψ . Теоретически вполне возможно и не делать такого ограничения, но при этом не получается ничего интересного. Это значит, что наши уравнения должны быть инвариантными по отношению к преобразованиям вида (4), если только $b_r = \overline{a_r}$, т. е. если в формуле (5) f равно единице. При этом автоматически выполняется и то условие, которому должны подчи-

¹ Если мы представим ψ -вектор матрицей, состоящей из одного столбца, а φ -вектор матрицей, состоящей из одной строки, то произведения типа $\varphi_1 \varphi_2$ и $\psi_1 \psi_2$ будут невозможны, а произведение типа $\psi\varphi$ не будет числом. Вообще говоря, перемножая два вектора, мы можем получать четыре различных проявления, но три из них будут не числами, а тензорами второго ранга (ковариантным, контравариантным и смешанным), и только одно будет числом, получающимся при «сокращении» упомянутого смешанного тензора.
Примечание переводчика.

няться преобразования (4) для того, чтобы (8) и (9) были инвариантны.

Мы будем часто предполагать, что символ ψ_r , и мнимо-сопряженный с ним символ

φ_r , удовлетворяют условию

$$\varphi_r \psi_r = 1.$$

В этом случае говорят, что ψ и φ нормированы к единице или просто нормированы. Неравенство (9) показывает, что всегда возможно нормировать ψ или φ посредством помножения на некоторое число, модуль которого определяется совершенно однозначно, но аргумент которого произволен.

Из неравенства (9) вытекает, что если

$$\left. \begin{aligned} \varphi_r \psi_r &= 0 \\ \varphi_r &= 0 \end{aligned} \right\}$$

тождественно для всех то ψ_r , то (10)

В самом деле, если бы φ_r , не равнялось нулю, то мнимо-сопряженный с ним символ ψ_r представлял бы пример φ не удовлетворяющего условию $\varphi_r \psi_r = 0$. Если в этой теореме подставить φ на место ψ и наоборот, то она очевидно останется верной.

Докажем теперь, что если φ_r и φ_s нормированы, то

$$|\varphi_r \psi_s| \leq 1, \quad (11)$$

причем равенство имеет место только в том случае, когда символы φ_r и ψ_s , и относятся к одному и тому же состоянию. Применим неравенство (9) к состоянию, обозначенному символом $\psi_r - e^{ia} \psi_s$ или $\varphi_r - e^{-ia} \varphi_s$, где a —любое вещественное число. Мы получим

$$(\varphi_r^* - e^{-ia} \varphi_s^*) (\psi_r - e^{ia} \psi_s) > 0$$

или

$$\varphi_r^* \psi_r - e^{ia} \varphi_r^* \psi_s - e^{-ia} \varphi_s^* \psi_r + \varphi_s^* \psi_s > 0.$$

Применяя условия нормировки $\varphi_r \psi_r = \varphi_s \psi_s = 1$, найдем:

$$e^{ia} \varphi_r^* \psi_s + e^{-ia} \varphi_s^* \psi_r < 2.$$

В левой части этого неравенства складываются два комплексно-сопряженных числа. Следовательно вещественная часть числа $e^{ia} \varphi_r^* \psi_s$ меньше единицы. Так как это должно

быть верным для любого вещественного a , то модуль числа $\varphi_r^* \psi_s$ должен быть меньше единицы. Отсюда и следует (11), если только принять во внимание, что неравенство заменяется равенством, если возможно найти такое вещественное a , при котором

$\psi_r - e^{ia} \psi_s = 0$ (такая возможность равносильна допущению, что φ_r и ψ_s , обозначают одно и то же состояние).

Введя произведения символов φ и ψ , мы до сих пор рассматривали вопрос чисто математически, не делая никаких физических выводов. Придадим теперь произведению $\varphi_r \psi_s$ определенный физический смысл. Рассмотрим соответствующее состоянию φ_r максимальное наблюдение, при котором вероятность получить некоторый определенный результат равна единице. Мы видели, что такое максимальное наблюдение всегда существует.

Предположим теперь, что то же самое наблюдение произведено над системой в состоянии ψ_s . Тогда будет существовать определенная вероятность получить такой же самый результат, вероятность, которую мы назовем вероятностью согласования ψ_s и φ_r . Она является

числом, зависящим только от обоих состояний ψ_s и φ_r . В частном случае, когда и ψ_s и φ_r обозначают одно и то же состояние, она равна единице. Допустим теперь, что вероятность согласования ψ_s с φ_r , равна $|\varphi_r \psi_s|^2$, если ψ_s и φ_r , нормированы. Такое допущение вполне разумно, так как только что было доказано, что эта величина никогда не бывает больше единицы. Кроме того единственное преобразование, которому возможно подвергнуть нормированные φ или ψ , не нарушая их нормировки, состоит в помножения на

комплексное число с модулем 1. Это не изменит значения величины $|\varphi_r \psi_s|^2$ которая следовательно обладает свойством инвариантности, необходимым для того, чтобы ей было возможно приписать данное физическое значение.

После того как произведению $\varphi\psi$ придан физический смысл, аксиомы и допущения (6), (7), (8), (9) становятся до известной степени физическими законами, так как теперь из них уже возможно извлекать и физические следствия. Например, из (8) вытекает, что вероятность согласования ψ_s с ψ_r равна вероятности согласования ψ_r с ψ_s . Далее, из (6) и (7) можно

вычислить, как меняется с изменением коэффициентов c_1 и c_2 вероятность согласования

состояния с состоянием $c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$, образованным посредством суперпозиции состояний

ψ_1 , и ψ_2 . Рассмотрим случай, когда и ψ_1 и ψ_2 ортогональны, т. е. когда существует наблюдение, которое наверно приведет в состояниях и к разным результатам, откуда следует, что вероятность их согласования равна нулю. Поэтому

$$\varphi_1 \psi_2 = 0, \quad \varphi_2 \psi_1 = 0.$$

Если мы хотим, чтобы $c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$ было нормировано так же, как и ψ_1 и ψ_2 мы должны положить

$$1 = (\bar{c}_1 \varphi_1 + \bar{c}_2 \varphi_2) (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = |c_1|^2 \varphi_1 \psi_1 + |c_2|^2 \varphi_2 \psi_2 = |c_1|^2 + |c_2|^2.$$

Если ψ_0 ортогонально к ψ_2 то вероятность согласования ψ_0 с $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ равна

$$|\langle \psi_0 | (c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \rangle|^2 = |\langle \psi_0 | c_1\psi_1 \rangle|^2 = |c_1|^2 |\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle|^2,$$

т. е. в $|c_1|^2$ раз больше, чем вероятность согласования ψ_0 с ψ_1 . В такой формулировке этот результат не имеет физического значения, так как величина $|c_1|^2$ до сих пор не имела никакого иного физического смысла, и потому ее можно приравнять отношению вероятности согласования ψ_0 с $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ к вероятности согласования ψ_0 с ψ_1 . Но тот факт, что это отношение не зависит от состояния ψ_0 , если это состояние ортогонально к ψ_2 имеет физический смысл и служит одним из примеров физических следствий, выводимых из аксиом (6) и (7).

Мы видим, что эти аксиомы придают физический смысл коэффициентам c_1 и c_2 , определяющим суперпозицию, или по крайней мере квадратам модулей этих коэффициентов. Простейший физический смысл получится в том случае, когда мы положим в нашем примере ψ_0 равным ψ_1 или ψ_2 . Мы найдем, что $|c_1|^2$ есть вероятность согласования $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ с ψ_1 , а $|c_2|^2$ есть вероятность согласования $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ с ψ_2 . Сумма обеих вероятностей согласования равна единице, как можно заключить из определения суперпозиции в § 6. Величины $|c_1|^2$ и $|c_2|^2$ являются как бы весами, с которыми ψ_1 и ψ_2 участвуют в суперпозиции. Состояние $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ не определяется этими весами вполне, так как для этого необходимо еще знать фазу, т. е. аргумент отношения.

$$\frac{c_1}{c_2}.$$

Фазы однако не имеют такого же простого физического смысла, как веса.

§ 9. АЛГЕБРА НАБЛЮДАЕМЫХ ВЕЛИЧИН.

Необходимо теперь ввести в теорию динамические переменные. В классической механике динамическая переменная, независимо от состояния системы, является некоторой функцией времени и в этом смысле относится ко всем моментам времени сразу. В теории квант динамическая переменная уже не может быть представлена в виде обыкновенной функции времени, хотя и здесь она должна относиться ко всем моментам времени сразу, если только нужно, чтобы она была аналогом классической динамической переменной. В квантовой механике более удобно иметь дело с величинами, относящимися к одному определенному моменту времени, а не ко всем сразу, т. е. с величинами, аналогичными значению классической динамической переменной в определенный момент времени. Мы будем называть такие величины наблюдаемыми величинами, или просто наблюдаемы им. Как в классической механике, так и в квантовой, всякое наблюдение состоит в измерении наблюдаемой; результат наблюдения есть число. Измерение динамической переменной в данном состоянии системы дает в классической теории функцию времени, а в квантовой теории, вообще говоря, не имеет смысла.

Каждую наблюдаемую мы будем обозначать особым символом. Например, значение декартовой координаты электрона в определенный момент времени t_1 , есть наблюдаемая; ее

можно обозначить символом $x(t)$. Динамическая переменная вроде $x(t)$ может считаться наблюдаемой, зависящей от параметра t , обозначающего время. Символы, обозначающие наблюдаемые величины, будут употребляться и теории наравне с символами, обозначающими состояния, в согласии с определенными правилами и аксиомами, к изложению которых мы приступим.

Каждый символ a , обозначающий наблюдаемую, может быть помножен на любой символ ψ обозначающий состояние, причем произведение записывается в виде $a\psi$, где множитель ψ стоит на втором месте. Это произведение имеет тот же характер, что ψ , т. е. обозначает состояние и может складываться с другими ψ -символами.

В векторном способе выражения можно говорить, что наблюдаемая a есть оператор, который, действуя на вектор ψ , дает другой вектор $a\psi$. Мы допускаем, что и здесь имеет место аксиома дистрибутивности, т. е. что

$$a(\psi_1 + \psi_2) = a\psi_1 + a\psi_2. \quad (12)$$

Точно так же мы допускаем, что

$$a(c\psi) = c(a\psi), \quad (13)$$

где c — любое число. В векторном способе выражения это значит, что оператор a есть линейный оператор, состоящий из вращений и однородных растяжений или сжатий векторного поля. Помножение ψ на обыкновенное число есть тоже операция, удовлетворяющая тем же самым условиям, так что и обыкновенное число может считаться частным случаем наблюдаемой. Его физический смысл будет рассмотрен ниже (§ 11).

Если наблюдаемая a обладает тем свойством, что $a\psi = 0$ для всех ψ , то мы примем $a = 0$. Это значит, что наблюдаемая вполне определена, если известен результат ее помножения на любой символ ψ , так как разность двух наблюдаемых равна нулю, если они дают одинаковые произведения при помножении на любой данный ψ -символ. Сумма

$a_1 + a_2$ двух наблюдаемых a_1 и a_2 определяется условием

$$(a_1 + a_2)\psi = a_1\psi + a_2\psi \quad (14)$$

при любом ψ . Коммутативное и ассоциативное правила сложения наблюдаемых вытекают сразу из этого определения и из коммутативного и ассоциативного правил сложения ψ -символов. Произведение $a_1 a_2$, двух наблюдаемых a_1 и a_2 определяется условием

$$(a_1 a_2)\psi = a_1(a_2\psi) \quad (15)$$

для любых ψ . Ассоциативное и дистрибутивное правила перемножения наблюдаемых вытекают сразу из этого определения; например для ассоциативного правила мы имеем:

$$[(a_1 a_2) a_3]\psi = (a_1 a_2)(a_3\psi) = a_1[a_2(a_3\psi)] = a_1[(a_2 a_3)\psi] = [a_1(a_2 a_3)]\psi,$$

а так как это верно для любого ψ то мы получаем:

$$(a_1 a_2) a_3 = a_1(a_2 a_3).$$

Коммутативное правило при перемножении наблюдаемых, вообще говоря, не имеет места, иными словами $a_1 a_2$, вообще говоря, не равно $a_2 a_1$. В том частном случае, когда

$a_1 a_2$, равно $a_2 a_1$, мы говорим, что a_1 , коммутирует (или переместимо) с a_2 или что a_1

и a_2 коммутативны. Если даны три наблюдаемые или больше, то мы говорим, что они коммутативны, если каждая из них коммутирует со всеми остальными.

Так как теория должна быть симметрична по отношению к ψ и φ , то умножение любой наблюдаемой a на любой φ -символ тоже должно иметь смысл. Произведение, которое мы будем записывать в виде φa (φ на первом месте и a на втором), должно быть той же самой природы, что и φ , т. е. должно быть символом состояния и складываться с другими φ -символами. В соответствии с (12) и (13) мы должны иметь

$$(\varphi_1 + \varphi_2) a = \varphi_1 a + \varphi_2 a$$

и

$$(c \varphi) a = c (\varphi a).$$

Наша символическая алгебра нуждается еще в одной аксиоме, а именно в ассоциативной аксиоме умножения, гласящей:

$$(\varphi a) \psi = \varphi (a \psi).$$

Поскольку эта аксиома имеет место, скобки излишни, и мы можем писать просто $\varphi a \psi$ (без скобок).

Эта же аксиома позволяет доказать, что сумма и произведение двух наблюдаемых, определенные посредством условий (14) и (15), ничем не отличаются от их суммы и произведения, определенных аналогичным способом посредством условий

$$\left. \begin{aligned} \varphi(a_1 + a_2) &= \varphi a_1 + \varphi a_2 \\ \varphi(a_1 a_2) &= (\varphi a_1) a_2, \end{aligned} \right\} (16)$$

верных для всех возможных φ .¹ Так например, в случае суммы из определения (14) с помощью (6) следует

$$\varphi(a_1 + a_2) \psi = \varphi a_1 \psi + \varphi a_2 \psi$$

или

$$[\varphi(a_1 + a_2) - \varphi a_1 - \varphi a_2] \psi = 0$$

тождественно в φ и ψ . С помощью (10) заключаем, что

$$\varphi(a_1 + a_2) - \varphi a_1 - \varphi a_2 = 0,$$

а это совпадает с тем, что требуется доказать (формула 16). Таким же образом поступают и в случае произведения. Подобное же рассуждение позволяет показать, что из допущения: «если $a\varphi = 0$ для всех φ , то $a = 0$ » вытекает следствие: «если $\varphi a = 0$ для всех φ , то $a = 0$ ».

¹ Теперь читателю ясно, почему Дирак пишет φa , а не $a\varphi$. Если бы он писал $a\varphi$, то произведение двух наблюдаемых a_1 и a_2 определенное посредством формулы (15), удовлетворяло бы равенству

$$(a_1 a_2) \varphi = a_2 (a_1 \varphi),$$

гораздо более неуклюжее и трудное для запоминания, чем вторая формула (16).
Примечание переводчика.

§ 10. КОМПЛЕКСНО-СОПРЯЖЕННЫЕ НАБЛЮДАЕМЫЕ.

Весьма удобно было бы считать суммы и произведения каких угодно наблюдаемых величин новыми наблюдаемыми величинами. Как мы сейчас увидим, это приводит к такому расширению понятия наблюдаемой, при котором наблюдаемая становится аналогом комплексной функции классических динамических переменных или, точнее, аналогом значения такой комплексной функции в определенный момент времени. Таким образом наблюдаемая не должна быть обязательно величиной, которую можно непосредственно измерить при одном единственном наблюдении; она представляет теоретическое обобщение такой величины.

В более общем смысле можно считать наблюдаемой любой оператор, помноженный на символы ψ и φ в согласии с перечисленными аксиомами. Таким образом наблюдаемую a возможно определить, указав для всех ψ значения в $a\psi$, с тем лишь однако условием, чтобы при этом соблюдалось (12). Если взять полную систему независимых ψ -символов ψ_r (полной системой называется такой ряд ψ -символов, что любой ψ -символ может быть выражен линейно через символы этого ряда), то можно выбрать совершенно произвольно значения $a\psi_r$, для всех членов ψ_r этой системы, причем значение $a\psi$ для ψ -символа, не принадлежащего к системе, определяется из условия (12), и оператор a будет этим совершенно определен. Можно поступить и иначе, а именно выбрать совершенно произвольно числа $\varphi_s a\psi_r$, где φ_s , так же как и ψ_r образуют полную систему независимых символов. Оператор a этим определяется совершенно однозначно, что следует из (10).

Пусть a будет некоторая наблюдаемая; рассмотрим уравнение

$$\overline{\varphi_s a \psi_r} = \varphi_r \beta \psi_s, \quad (17)$$

где ψ_r , и ψ_s представляют любые два ψ -символа, а φ_r , и φ_s , — мнимосопряженные с ними φ -символы. Легко доказать, что если (17) верно для двух каких-то символов ψ_r , то оно верно и для любой линейной комбинации этих двух символов и что то же самое относится к φ_s . В самом деле, если (17) верно для $\psi_r = \psi_1$ и для $\varphi_r = \varphi_2$, то мы имеем

$$\overline{\varphi_s a \psi_1} = \varphi_1 \beta \psi_s, \quad \overline{\varphi_s a \psi_2} = \varphi_2 \beta \psi_s,$$

откуда

$$\overline{\varphi_s a (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2)} = \overline{c_1 \varphi_s a \psi_1 + c_2 \varphi_s a \psi_2} = \overline{c_1 \varphi_1 \beta \psi_s + c_2 \varphi_2 \beta \psi_s} = (\overline{c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2}) \beta \psi_s,$$

иными словами — (17) верно и для $\psi_s = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$. Поэтому, если считать, что уравнение (17) верно для полной системы независимых ψ_r и для полной системы

независимых ψ_s , то оно может рассматриваться как определение новой наблюдаемой β .

Такая наблюдаемая называется комплексно-сопряженной, по отношению к наблюдаемой a и обозначается символом \bar{a} . Итак,

$$\overline{\varphi_s a \psi_r} = \varphi_r \bar{a} \psi_s. \quad (18)$$

Наоборот, a является комплексно-сопряженной по отношению к \bar{a} . Термин «комплексно-сопряженная», а не «мнимо-сопряженная», употребляется потому, что наблюдаемую величину можно сложить с ее комплексно-сопряженной: ведь обе они представляют величины одной и той же природы. Поэтому из любой наблюдаемой a можно выделить вещественную часть $\frac{1}{2}(a + \bar{a})$ и мнимую часть $\frac{1}{2}(a - \bar{a})$. Наблюдаемая a вещественна, если выполняется условие

$$\overline{\varphi_s \alpha \psi_r} = \varphi_r \alpha \psi_s. \quad (19)$$

В том частном случае, когда наблюдаемая a есть число, комплексно-сопряженная наблюдаемая, определенная из условия (18), оказывается тоже числом, комплексно-сопряженным с первым.

Докажем теперь, что если ψ_1 и φ_1 представляют мнимо-сопряженные символы, то символы $a\psi_1$ и $\varphi_1 a$, где a — любая наблюдаемая, тоже должны быть мнимо-сопряженными. Если обозначить через φ символ мнимо-сопряженный символу $a\psi_1$ то из (8)

следует для любого ψ_s

$$\varphi \psi_s = \overline{\varphi_s \alpha \psi_1}.$$

Но из определения (18) вытекает

$$\overline{\varphi_s \alpha \psi_1} = \varphi_1 \bar{\alpha} \psi_s.$$

Отсюда

$$\varphi \psi_s = \varphi_1 \bar{\alpha} \psi_s.$$

А так как это верно для любого ψ_s , то из условия (10), в котором φ поставлено на место ψ и наоборот, следует

$$\varphi = \varphi_1 \bar{\alpha}, \quad (20)$$

что и требовалось доказать.

Найдем наблюдаемую, комплексно-сопряженную по отношению к произведению $a_1 a_2$ двух наблюдаемых a_1 и a_2 . Уравнение, с помощью которого определяется эта комплексно-сопряженная наблюдаемая, есть

$$\varphi_p \alpha_1 \alpha_2 \psi_q = \overline{\varphi_q \alpha_1 \alpha_2 \psi_p}, \quad (21)$$

где символы φ_p и φ_q произвольны. Если в формуле (8) положить

$$\psi_s = \varphi_q \alpha_1, \quad \psi_r = \alpha_2 \psi_p,$$

откуда, в согласии с теоремой (20), получится

$$\psi_s = \alpha_1 \psi_q, \quad \varphi_r = \varphi_p \bar{\alpha}_2.$$

то окажется

$$\varphi_p \bar{\alpha}_2 \alpha_1 \psi_q = \overline{\varphi_q \alpha_1 \alpha_2 \psi_p}.$$

Так как это верно для любых φ_p и φ_q , то из сравнения с (21) находим

$$\overline{\alpha_1 \alpha_2} = \overline{\alpha_2 \alpha_1}. \quad (22)$$

Итак, для того, чтобы найти комплексно-сопряженную по отношению к произведению, необходимо отыскать комплексно-сопряженную для каждого множителя отдельно и перемножить в обратном порядке. Это правило верно и в том случае, когда число множителей больше двух, что может быть доказано последовательным применением того же правила для двух множителей, например:

$$\overline{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} = \overline{\alpha_3 \alpha_2 \alpha_1} = \overline{\alpha_3 \alpha_2} \alpha_1.$$

Из этой теоремы вытекает следствие: если a_1 , и a_2 — вещественные наблюдаемые, то

$a_1 a_2 + a_2 a_1$ также вещественно, а $a_1 a_2 - a_2 a_1$ есть чисто-мнимая наблюдаемая.¹ Только

в том случае, когда a_1 , и a_2 , к тому же коммутативны, $a_1 a_2$ будет вещественно. Ур-ние (18) и теорема, выраженная формулой (20), показывают, что имеет место следующее общее правило: если хотят построить мнимо-сопряженную и комплексно-сопряженную по отношению к любой возможной комбинации символов, обозначающих наблюдаемые и состояния, то нужно переменить порядок множителей и взять мнимо-сопряженную или комплексно-сопряженную для каждого множителя отдельно.

§ 11. ФИЗИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ АЛГЕБРЫ НАБЛЮДАЕМЫХ.

Аксиомы и допущения, сделанные нами относительно наблюдаемых величин, имели чисто математический характер и не давали возможности делать физические выводы. Теперь мы дадим физическое толкование, которое сделает эти аксиомы и допущения законами физики. Предполагается, что все наблюдаемые, о которых идет речь в этом параграфе, вещественны.

Если состояние ψ_r и наблюдаемая a таковы, что измерение этой наблюдаемой, произведенное над системой в указанном состоянии, должно обязательно дать число a , то этот факт записывается в виде уравнения

$$a \psi_r = \psi_r a. \quad (23)$$

Обратно, если дано такое уравнение, то мы будем предполагать, что его физический смысл заключается в следующем: измерение наблюдаемой a , произведенное в системе в состоянии

ψ_r обязательно даст в результате число a или, употребляя классический способ выраже-

¹ Это следует из теоремы $c_1 a_1 + c_2 a_2 = c_1 a_1 + c_2 a_2$, которую легко вывести из (18).

При этом чисто-мнимой наблюдаемой называется такая наблюдаемая a , которая удовлетворяет условию $\varphi_s a \psi_r = -\psi_r a \varphi_s$ или $\bar{a} = -a$.

Примечание переводчика.

ния, вполне дозволённый в данном случае, наблюдаемая a имеет значение a в состоянии ψ_r . Уравнение (23) эквивалентно уравнению

$$\psi_r a = a \psi_r, \quad (24)$$

если только наблюдаемая a вещественна; в самом деле, согласно теореме, выраженной уравнением (20), уравнение (24) получится, если обе части уравнения (23) заменить их мнимосопряженными. Таким образом симметрия между символами φ и ψ сохранена.

В том частном случае, когда наблюдаемая a есть число, уравнение (23) будет, верно для всякого состояния ψ_r , если a есть это же число. Это значит, что наша наблюдаемая настолько тривиальна, что каждое ее измерение неизменно приводит к одному и тому же результату, независимо от состояния системы.

Выведем теперь из нашей теории некоторые физические следствия. Например, если в заданном состоянии ψ наблюдаемая a_1 имеет значение a_1 , а наблюдаемая a_2 имеет значение a_2 то из соответственных уравнений:

$$a_1 \psi = a_1 \psi, \quad a_2 \psi = a_2 \psi$$

вытекает

$$(a_1 + a_2) \psi = (a_1 + a_2) \psi; \quad a_1 a_2 \psi = a_1 a_2 \psi,$$

иными словами наблюдаемая $a_1 + a_2$ имеет в состоянии ψ значение $a_1 + a_2$, а наблюдаемая

$a_1 a_2$ — значение $a_1 a_2$. Эти следствия необходимы для того, чтобы в теории не было

противоречий, так как измерения наблюдаемых a_1 и a_2 в системе в состоянии ψ совместимы между собой, поскольку ни одно из них не изменяет состояния системы, а следовательно обычные классические представления об измерении должны быть применимы. По этой же причине нам необходимо также и то следствие, легко получаемое из первого уравнения (25) по способу математической индукции, которое гласит, что $f(a_1)$ в состоянии

ψ имеет значение $f(a_1)$, где f — любая функция, заданная в виде степенного ряда. В

дальнейшем мы введем класс функций еще более общий, нежели функции, разложимые в степенной ряд, и докажем, что это следствие остается в силе даже и для такого более общего класса функций наблюдаемых величин. Это свойство ляжет в основу определения такого класса функций.

Далее, если нам дано, что наблюдаемая a имеет значение a в обоих состояниях ψ_1 и

ψ_2 то из уравнений $a\psi_1 = a\psi_1$, $a\psi_2 = a\psi_2$ а вытекает:

$$a(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = a(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2),$$

т. е. a имеет это же значение a в любом состоянии, которое может быть получено из ψ_1 и

ψ_2 посредством суперпозиции. В § 6 это же следствие было выведено из определения суперпозиции; тот факт,

¹ При этом нужно воспользоваться и тем обстоятельством, что a есть вещественное число. В самом деле. $\varphi_r a \psi_r = \varphi_r a \psi_r = a \varphi_r \psi_r$. Так как a вещественна,

$$\varphi_r a \psi_r = \varphi_r a \psi_r, \text{ т.е. } a \varphi_r \psi_r = a \varphi_r \psi_r. \text{ Из (9) следует } a = \bar{a}.$$

Примечание переводчика.

что оно могло быть получено также и из данного круга идей, иллюстрирует отсутствие внутренних противоречий в нашей теории.

В классической механике наблюдаемая величина имеет вполне определенное значение в каждом данном состоянии. Иначе обстоит дело в квантовой механике, где необходимо специальное условие (23) для того, чтобы наблюдаемая имела в данном состоянии определенное значение. Вообще говоря, измерение наблюдаемой величины в данном состоянии может привести с той или иной вероятностью к одному из целого ряда возможных численных значений. Необходимо теперь рассмотреть вопрос о том, каково может быть самое общее соотношение между наблюдаемой величиной и различными состояниями. Задавшись

наблюдаемой a и двумя состояниями φ_r и ψ_s можно построить число $\varphi_r a \psi_s$. Это

единственный общий способ получения чисел, относящихся к данной наблюдаемой и к различным состояниям. Таким образом наблюдаемая обладает численными значениями, связанными с каждой данной парой состояний, что представляет резкий контраст с классической теорией, в которой наблюдаемая обладает численными значениями, связанными лишь с отдельными состояниями, т. е., попросту говоря, обладает в каждом данном состоянии определенным численным значением.

В частном случае можно взять мнимо-сопряженные символы φ_r и ψ_r , обозначающие

одно и то же состояние, и построить число $\varphi_r a \psi_s$. Таким образом получается число, вполне

определяемое наблюдаемой a и одним состоянием ψ_r , если только φ_r и ψ_r нормированы

(легко проверить, что $\varphi_r a \psi_s$ инвариантно по отношению к любым преобразованиям (4),

которые удовлетворяют условию $b_r = a_r$, необходимому для того, чтобы φ_r и ψ_r ,

оставались нормированными). Итак вполне возможно связать с каждым состоянием ψ_r

определенное число для данной наблюдаемой a ; но было бы нецелесообразно называть это

число значением наблюдаемой a в состоянии ψ_r , и вот почему. Если в данном состоянии

значение наблюдаемой a_1 , есть a_1 , а значение a_2 есть a_2 , то нам хотелось бы, чтобы

$a_1 + a_2$ было значением наблюдаемой $a_1 + a_2$ и чтобы $a_1 a_2$, было значением

наблюдаемой $a_1 a_2$. Если принять предлагаемое определение «значения наблюдаемой в

данном состоянии», то из $a_1 = \varphi_r a_1 \psi_r$, $a_2 = \varphi_r a_2 \psi_r$ действительно вытекает

закключение, что

$$a_1 + a_2 = \varphi_r(a_1 + a_2) \psi_r,$$

т. е. что $a_1 + a_2$ есть значение наблюдаемой $a_1 + a_2$. Но из тех же равенств не удается вывести, что

$$a_1 a_2 = \varphi_r a_1 a_2 \psi_r,$$

Это последнее равенство, вообще говоря, не верно, и потому мы не можем утверждать, что $a_1 a_2$ есть значение наблюдаемой $a_1 a_2$. Поэтому $\varphi_r a \psi_r$ не может быть общим определением значения наблюдаемой a в состоянии. Необходимо обратиться к ур-нию (23) для того, чтобы дать определение значения наблюдаемой в данном состоянии в тех частных случаях, когда ур-ние (23) действительно имеет место.

Тот факт однако, что нам не удалось провести желаемое доказательство только в случае произведения $a_1 a_2$, но не в случае суммы $a_1 + a_2$ позволяет нам назвать $\varphi_r a \psi_r$,

средним значением наблюдаемой a в состоянии ψ_r . Действительно, среднее значение суммы

двух величин должно равняться сумме их средних значений, но среднее значение произведения может и не равняться произведению средних значений. Таким образом наша символическая алгебра позволяет без всякой несообразности называть определенное число средним значением наблюдаемой в данном состоянии. Допущение, что определенное таким образом среднее значение действительно совпадает с тем, которое получится при вычислении среднего значения результата многократного измерения данной наблюдаемой (после каждого измерения система, разумеется, должна быть вновь приведена в прежнее состояние), составляет важнейшее звено в цепи, связывающей символическую алгебру с физическими фактами. Мы покажем ниже (§ 18), что другие указанные нами звенья (допущение, что

$|\varphi_r \psi_s|^2$ есть вероятность согласования φ_r с ψ_s и что уравнение $a\psi = a\psi$ имеет место,

когда измерение наблюдаемой a в состоянии ψ наверное приводит к результату a)

представляют частные следствия этого главного допущения.

Если наблюдаемая a имеет в состоянии ψ_r значение a , иными словами— если уравнение (23) справедливо, мы можем вывести, что

$$\varphi_r a \psi_r = \varphi_r a \psi_r = a \varphi_r \psi_r = a,$$

если только φ_r и ψ_r нормированы. Поэтому среднее значение наблюдаемой a в состоянии

ψ_r оказывается равным a , что необходимо для того, чтобы теория не содержала противоречий. Разумеется, мы не можем сделать обратное заключение, т. е. вывести (23) из

$$\varphi_r a \psi_r = a.$$

Получаемые из теории числа $\varphi_r a \psi_s$ где φ_r и ψ_s — различные состояния, не имеют

такого же непосредственного физического смысла, как числа $\varphi_r a \psi_r$. Мы увидим

впоследствии, что число $|\varphi_r a \psi_s|^2$ совпадает, с точностью до некоторого множителя, с

вероятностью перехода из состояния ψ_s в состояние φ_r , под влиянием возмущающей энергии, интеграл которой, взятый по времени, есть a . (см. § 52).

§ 12. ПРИМЕР ИЗ АЛГЕБРЫ НАБЛЮДАЕМЫХ.

В качестве примера символической алгебры наблюдаемых, которая совпадает с обыкновенной алгеброй за тем лишь исключением, что в ней не действует коммутативное правило умножения, рассмотрим некоторые свойства двух наблюдаемых p и q , удовлетворяющих условию

$$qp - pq = i, \quad (26)$$

где i — квадратный корень из минус единицы. Из § 10 видно, что этому условию могут удовлетворять две вещественные наблюдаемые.

Если помножить (26) сперва на q слева, а потом на q справа, то мы получим два равенства:

$$q^2 p - qpq = iq \quad \text{и} \quad qpq - pq^2 = iq.$$

Складывая, находим:

$$q^2 p - pq^2 = 2iq.$$

Этот результат возможно обобщить. Если помножить (26) сперва на q^{n-1} слева, затем на q^{n-2} слева и на q справа, затем на q^{n-3} слева и на q^2 справа и т. д. и в конце концов на q^{n-1} справа, то мы получим ряд равенств:

$$\begin{aligned} q^n p - q^{n-1} pq &= iq^{n-1}, \\ q^{n-1} pq - q^{n-2} pq^2 &= iq^{n-1}, \\ q^{n-2} pq^2 - q^{n-3} pq^3 &= iq^{n-1}, \\ \dots & \\ qpq^{n-1} - pq^n &= iq^{n-1}, \end{aligned}$$

которые при сложении дают:

$$q^n p - pq^n = n iq^{n-1}.$$

Этот результат может быть записан в виде

$$q^n p - pq^n = i \frac{dq^n}{dq}.$$

Отсюда следует, что если $f(q)$ есть любая функция q , которую можно разложить в степенной ряд, то

$$fp - pf = i \frac{df}{dq}, \quad (27)$$

так как это равенство верно для каждого члена разложения в отдельности.

В частном случае возьмем функцию f в виде ряда

$$f(q) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ic)^n q^n}{n!},$$

где c — число. Мы можем обозначить эту функцию e^{icq} ; для нее будут верными все свойства показательных функций, поскольку при их доказательстве не появляются символы, не коммутирующие с q , которые могли бы тем самым нарушить сходство между символической и обычной алгеброй. Подставив это выражение функции f в (27), мы получим:

$$e^{icq} p - p e^{icq} = -c e^{icq} \quad \text{или} \quad e^{icq} p = (p - c) e^{icq}.$$

III. Собственные значения и собственные состояния.

§ 13. Определения и основные свойства.

В этой главе мы рассмотрим некоторые свойства вещественных наблюдаемых. Пусть α будет такой наблюдаемой;

$$\alpha \psi = a \psi, \quad (1)$$

где a – число, может рассматриваться как уравнение относительно двух неизвестных: a и ψ . Если некоторые определенные a и ψ представляют решение уравнения (1) То a называется собственным числом, или собственным значением, $a \psi$ – собственным ψ - символом наблюдаемой α . Легко видеть, что все собственные числа вещественны; в самом деле, помножив уравнение 1) на ψ - символ, мнимо-сопряженный с ψ , мы получим:

$$\varphi \alpha \psi = a \varphi \psi.$$

Но $\varphi \alpha \psi$ и $\varphi \psi$ оба вещественны, как вытекает при $r=s$ из уравнений (19) и (8) предыдущей главы; поэтому a тоже вещественно.

Аналогично уравнению (1) можно написать уравнение

$$\varphi \alpha = a \varphi. \quad (2)$$

Если a и ψ представляют решение уравнения (1), то это же число a и символ $-\varphi$, мнимо-сопряженный по отношению к ψ , удовлетворяют уравнению (2), так как обе части уравнения (2) мнимо сопряжены по отношению к соответственным частям уравнения (1). Мы будем называть φ - символы, удовлетворяющие уравнению (2), собственными φ - символами, а состояния, обозначенные собственными ψ или φ , – собственными состояниями наблюдаемой α .

Каждому собственному ψ , собственному φ или собственному состоянию соответствует одно и только одно собственное значение, которому, как мы будем говорить принадлежит это собственное состояние.

Физический смысл собственного значения заключается в том, что существует некоторое состояние (собственное состояние, принадлежащее этому собственному значению) такое, что измерение наблюдаемой в этом состоянии необходимо приведет к результату, равному этому собственному значению. Собственные значения наблюдаемой являются возможными результатами ее измерения. Каждый возможный результат измерения должен быть собственным числом, потому что он должен удовлетворять уравнению (1), если вместо ψ подставить в это уравнение состояние системы непосредственно после измерения. Совокупность всех собственных чисел наблюдаемой должна представлять дискретный ряд чисел, или непрерывный их ряд, или то и другое вместе. Вычисление собственных значений есть одна из важнейших задач квантовой механики.

В том частном случае, когда наблюдаемая есть число, она имеет одно только собственное значение (a именно это же самое число);

Всякое состояние является в этом случае собственным. Пусть α будет какая угодно наблюдаемая, а c – число; тогда, как сразу вытекает из определений, каждое собственное число наблюдаемой $\alpha+c$ превышает на c собственное число наблюдаемой α , и всякое собственное состояние $\alpha+c$ есть собственное состояние α . Таким же образом всякое собственное значение $c + a$ в c раз больше собственного значения a , а всякое собственное состояние $c + \alpha$ есть собственное состояние α .

Докажем теперь теорему, что два собственных состояния, принадлежащих двум различным собственным значениям, ортогональны друг к другу. Пусть ψ_1 будет собственным состоянием, принадлежащим собственному значению a_1 , а ψ_2 – собственным состоянием, принадлежащим собственному значению a_2 . Тогда мы имеем

$$\alpha \psi_1 = a_1 \psi_1 \quad (3)$$

$$\varphi_2 \alpha = a_2 \varphi_2. \quad (4)$$

Помножая (3) на φ_2 слева и (4) на ψ_1 справа, получим

$$\varphi_2 \alpha \psi_1 = a_1 \varphi_2 \psi_1 \quad \text{и} \quad \varphi_2 \alpha \psi_1 = a_2 \varphi_2 \psi_1,$$

следовательно

$$(a_1 - a_2) \varphi_2 \psi_1 = 0,$$

так что, если $a_1 \neq a_2$, должно быть $\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = 0$ т.е. оба состояния ψ_1 и ψ_2 ортогональны. Та же теорема вытекает из физического смысла собственных состояний, так как если два собственных состояния наблюдаемой α принадлежат разным собственным числам, то, наверное, существует наблюдение, приводящее в двух этих состояниях к различным результатам: таким наблюдением является измерение наблюдаемой α . Поэтому оба состояния, согласно определению, ортогональны.

Если ψ_1 и ψ_2 являются двумя собственными ψ - символами, принадлежащими одному и тому же собственному числу, то, очевидно, что любая линейная комбинация $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ также будет собственным ψ - символом, принадлежащим этому же собственному числу. Докажем теперь, что никакая линейная комбинация собственных ψ , принадлежащих разным собственным числам, не может быть собственным ψ , иными словами – что собственные ψ , принадлежащие различным собственным числам обязаны быть независимыми друг от друга.

Если бы эта теорема была неверна, то мы имели бы между несколькими собственными ψ , принадлежащими различным собственным числам, соотношение типа

$$\sum_r c_r \psi_r = 0, \quad (5)$$

где c_r – численные коэффициенты. Без ущерба для общности мы можем предположить, что между этими собственными ψ не существует иного линейного соотношения, которое было бы независимым от (5). В самом деле, если бы существовало несколько независимых линейных соотношений типа (5) между теми же ψ , то мы могли бы некоторые ψ из них исключить; при этом получилось бы одно единственное соотношение этого же типа между остальными ψ .

$$0 = \alpha \sum_r c_r \psi_r = \sum_r c_r \alpha \psi_r = \sum_r c_r a_r \psi_r \quad (6)$$

где a_r есть собственное значение, принадлежащее состоянию ψ_r . Но равенство (6) есть линейное соотношение с численными коэффициентами между символами ψ_r , и потому, согласно сделанному предположению, не может быть независимым от соотношения (5). Поэтому все a_r должны быть равны друг другу, а это значит, что все ψ_r принадлежат одному и тому же собственному числу.

То же самое можно было бы заключить из данного в § 6 определения суперпозиции из физического смысла собственных состояний. Соотношение типа (5) обозначает, что одно из собственных состояний, например ψ_r может быть получено в результате суперпозиции состояний ψ_1, ψ_3, \dots , откуда следует, что если наблюдение системы в состоянии ψ_1 дало некоторый результат, то существует конечная вероятность получить тот же результат, производя то же самое наблюдение, по крайней мере, в одном из состояний ψ_1, ψ_3 . Но это было бы невозможно, если бы состояния ψ_r были собственными состояниями наблюдаемой α , принадлежащими различным собственным значениям a_r , и если бы наблюдение, о котором идет речь, состояло в измерении наблюдаемой α поэтому соотношение типа (5) невозможно.

§ 14. Теорема о разложении

Теорема о разложении гласит, что любой ψ - символ может быть представлен в виде суммы собственных ψ - символов любой вещественной наблюдаемой т.е.

$$\psi = \sum_p \psi_p, \quad (7)$$

где все ψ_p являются собственными ψ вещественной наблюдаемой α .

Такое разложение должно быть единственным, потому что в противном случае существовало бы соотношение типа (5) между собственными ψ , принадлежащими различным собственным числам.¹

Если собственные числа наблюдаемой α образуют не дискретное, а непрерывное множество чисел или если они образуют и то и другое, то мощность множества собственных ψ в формуле (7) может быть больше мощности исчислимого множества и равняться мощности множества

¹ Всегда можно без ущерба для общности предположить, что все ψ_p в формуле (7) принадлежат различным собственным числам.

точек прямой. В этом случае для того, чтобы выразить любой ψ - символ, нам может понадобиться интеграл типа

$$\psi = \int \psi_p dp \quad (8)$$

или же интеграл и сумма. Изложенная в предыдущей главе теория ψ - символов не дает строгого определения интеграла типа (8). Для того чтобы сформулировать такое строгое определение, понадобилось бы ввести в теорию ψ - символов много новых допущений, относящихся к понятиям предела и непрерывности, что вывело бы нас за рамки этой книги. Для всех физических целей будет совершенно достаточно, если мы не будем стремиться к построению строгой теории всех этих вещей, но удовольствуемся грубыми интуитивными представлениями о пределах и о непрерывности, например теми представлениями, которые можно извлечь из наглядного изображения ψ - символов, в виде векторов. Из этих интуитивных представлений вытекает, что если имеется ψ - символ ψ_p зависящий достаточно непрерывным образом от некоторого параметра p то, возможно, дифференцировать или интегрировать по p , причем результатом этого действия будет новый ψ - символ.

При всем этом, конечно, невозможно пытаться дать на основе символической алгебры строгое доказательство теоремы о разложении.

Нижеследующее рассуждение, однако, делает эту теорему весьма вероятной. Рассмотрим ψ - символ, ψ_τ который является функцией параметра τ и удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \psi_\tau = i\alpha \psi_\tau. \quad (9)$$

Если ψ_τ дано для некоторого значения τ то из этого уравнения определяется ψ_τ для некоторого чуть большего значения τ . Поэтому мы можем думать, что уравнение (9) имеет одно и только одно решение при любом данном начальном значении ψ_τ , т.е. при условии, что ψ_τ при $\tau=0$ равняется некоторому произвольно выбранному ψ_0 . Предположим теперь, что это решение, рассматриваемое как функция от τ , может быть представлено в виде ряда Фурье; для определенности рассмотрим случай интеграла, а не ряда, т.е. положим

$$\psi_\tau = \int e^{ip\tau} \psi_p dp, \quad (10)$$

где ψ_p не зависит от τ , но содержит новый параметр p

Подставляя это выражение в уравнение (9), находим:

$$\int ip e^{ip\tau} \psi_p dp = i\alpha \int e^{ip\tau} \psi_p dp \quad \text{или} \quad \int p e^{ip\tau} \psi_p dp = \int e^{ip\tau} \alpha \psi_p dp.$$

Так как это равенство справедливо при всех значениях τ , то коэффициенты при $e^{ip\tau}$ в обеих частях равенства должны быть равны друг другу, т.е. $p\psi_p = \alpha\psi_p$. Это значит, что ψ_p является собственным ψ - символом наблюдаемой α , принадлежащим собственному значению p .

Положив $\tau=0$ в равенстве (10), мы получим:

$$\psi_0 = \int \psi_p dp,$$

т.е. разложение типа(8) произвольного ψ_0 по собственным ψ - символам ψ_p . Дискретная сумма типа (7) появится в том случае, если вместо интеграла Фурье (10) нужно будет ввести ряд Фурье.

Слабым пунктом предыдущего доказательства является допущение возможности разложения ряда Фурье (10). Если воспользоваться наглядным векторным изображением и представить себе ψ_τ в виде вектора непрерывно меняющегося с изменением параметра, τ то легко допустить, что то, или иное разложение ряда Фурье возможно, за исключением лишь того случая, когда абсолютная величина вектора при $\tau \rightarrow \infty$ стремится к бесконечности [это очень легко может случиться с уравнением движения¹ типа (9)]. Но эта возможность сразу исключается, если воспользоваться тем обстоятельством, что наблюдаемая α вещественна (для не вещественной наблюдаемой теорема о разложении может оказаться и неверной). Если

¹ Параметр τ для наглядности можно представить себе в виде времени, а символ p , в виде скорости некоторой материальной частицы; тогда уравнение (9) будет уравнением движения частицы, движущейся под влиянием силы трения, линейно зависящей от скорости.

φ_τ есть φ - символ, мнимо-сопряженный по отношению к ψ_τ то он должен удовлетворять уравнению, мнимо-сопряженному по отношению к (9), т.е.

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \varphi_\tau = -i \varphi_\tau \alpha.$$

Отсюда следует

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} (\varphi_\tau \psi_\tau) &= \varphi_\tau \frac{\partial \psi_\tau}{\partial \tau} + \frac{\partial \varphi_\tau}{\partial \tau} \psi_\tau = \\ &= \varphi_\tau i \alpha \psi_\tau - i \varphi_\tau \alpha \psi_\tau = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Поэтому, $\varphi_\tau \psi_\tau$ т.е. квадрат абсолютной величины вектора ψ_τ остается постоянным.

Приведенное нестрогое доказательство теоремы о разложении заставляет думать, что можно было бы доказать эту теорему и совершенно строго, если добавить к числу аксиом символической алгебры надлежащие аксиомы о пределах и непрерывности. Должны быть верны, разумеется, также и соответствующие теоремы относительно символов φ . Для определенности мы предположим, что все разложения, с которыми нам придется иметь дело в этой главе, содержат только суммы, но не интегралы. Все теоремы, которые мы докажем, останутся верными и в случае интегралов; понадобится только внести формальные изменения в доказательства. Для этих формальных изменений, однако, понадобятся новые обозначения, которые и будут введены в следующей главе. (см. §22).

§15. Функции наблюдаемых

Теорема о разложении позволяет формулировать определение функции вещественной наблюдаемой, не уступающее в общности обычному определению функции вещественной переменной. Пусть α будет вещественной наблюдаемой и пусть ψ_p будет одним из ее собственных ψ -символов, принадлежащим собственному числу a_p т.е. $\alpha \psi_p = a_p \psi_p$. Очевидно, как и было упомянуто в §11, что если $f(x)$ обозначает любую функцию, которую можно представить в виде степенного ряда, то

$$f(\alpha) \psi_p = f(a_p) \psi_p. \quad (12)$$

Мы примем то же самое соотношение и для более общего типа функций. Если $f(x)$ есть некоторая функция вещественной переменной (x), имеющая смысл в точке $x = a_p$, то правая часть равенства (12) имеет смысл, и мы можем определить $f \alpha \psi_p$ так, чтобы равенство (12) было справедливо. Если одному и тому же собственному числу a_p принадлежат различные собственные ψ -символы, например ψ_p', ψ_p'', \dots , и, следовательно, между ними возможны линейные соотношения типа, $\sum c' \psi_p' = 0$ где c' суть числа, то определение (12) не будет содержать никакого противоречия, так как из него вытекает

$$f(\alpha) \sum c' \psi_p' = \sum c' f(\alpha) \psi_p' = \sum c' f(a_p) \psi_p' = 0.$$

Поэтому, если функция вещественной переменной $f(x)$ имеет смысл, когда x равно любому из собственных чисел наблюдаемой. Но тем самым мы можем придать определенный смысл результату умножения $f(\alpha)$ на любой собственный ψ -символ, так как этот символ можно представить в виде суммы собственных ψ -символов наблюдаемой α и затем помножить $f(\alpha)$ на каждый член такого разложения в отдельности.

Итак, можно придать определенный смысл функции $f(\alpha)$, где $f(x)$ есть любая функция вещественной переменной x , даже нерегулярная или разрывная, если только все собственные числа наблюдаемой α лежат в области определения функции $f(x)$. В область определения этой функции могут входить, кроме собственных значений наблюдаемой α , также и другие точки, но значения функции $f(x)$ в этих точках не оказывают никакого влияния на $f(\alpha)$. Все это представляет необходимое следствие из физического истолкования собственных значений.

Если α есть наблюдаемая, то $f(\alpha)$ также является наблюдаемой, если только функция вещественной переменной $f(x)$ имеет смысл для всех тех значений x , которые являются возможными результатами измерения наблюдаемой α , т.е. ее собственными значениями: ведь тем же самым прибором и в том же самом эксперименте, который служит для измерения α , измеряется на самом деле также и $f(\alpha)$.

Из (12) следует, что любой собственный ψ -символ наблюдаемой α является собственным ψ -символом наблюдаемой $f(\alpha)$. Обратное утверждение, а именно—что каждый собственный ψ -символ наблюдаемой $f(\alpha)$ есть в то же время собственный ψ -символ наблюдаемой α , не всегда верно; оно верно лишь в том случае, когда α является функцией (и притом, разумеется, однозначной функцией) наблюдаемой $f(\alpha)$. Из (12) также следует, что собственные значения наблюдаемой $f(\alpha)$ равны функции f от соответствующих собственных значений наблюдаемой α ; например собственные значения наблюдаемой α^2 равны квадратам собственных значений наблюдаемой α . Ясно, что все это необходимо для того, чтобы было справедливым физическое истолкование собственных значений и собственных состояний. Далее, из определения (12) легко вывести, что сумма или произведение двух функций одной наблюдаемой есть новая функция той же наблюдаемой, а также—что функция от функции наблюдаемой есть функция той же наблюдаемой; необходимость этих следствий вытекает также и из физических соображений.

Для определения $f(\alpha)$ можно воспользоваться вместо собственных ψ -символов собственными φ -символами. Мы положим, $\varphi_p f(\alpha) = f(a_p) \varphi_p$, где φ_p есть любой собственный символ наблюдаемой α . Согласно §10 это уравнение является мнимо-сопряженным уравнением по отношению к (12) и, следовательно, вытекает из уравнения (12)¹. Поэтому оба определения функции $f(\alpha)$ эквивалентны друг другу.

Докажем теперь теорему о том, что всякая наблюдаемая, коммутирующая с α , коммутирует также и с $f(\alpha)$. Эта теорема совершенно очевидна, если можно представить f в виде степенного ряда.

Пусть β будет любой наблюдаемой, и с α , т.е. удовлетворяющей условию $\beta\alpha = \alpha\beta$. Пусть ψ_p будет собственным ψ -символом наблюдаемой α , принадлежащим собственному числу a_p , и пусть таким же образом φ_q будет собственным φ -символом той же наблюдаемой, принадлежащим собственному числу a_q . Мы не делаем предположения, что a_q обязательно равно a_p . Имеем:

Поэтому

$$\alpha \psi_p = a_p \psi_p, \quad \varphi_q \alpha = a_q \varphi_q,$$

и

$$\varphi_q \beta \alpha \psi_p = \varphi_q \beta a_p \psi_p = a_p \varphi_q \beta \psi_p$$

$$\varphi_q \beta \alpha \psi_p = \varphi_q \alpha \beta \psi_p = a_q \varphi_q \beta \psi_p.$$

Отсюда следует

$$(a_p - a_q) \varphi_q \beta \psi_p = 0.$$

Поэтому или $\varphi_q \beta \psi_p = 0$ или $a_p = a_q$. Из второй возможности следует $f(a_p) = f(a_q)$

Поэтому и в том и в другом случае

$$[f(a_p) - f(a_q)] \varphi_q \beta \psi_p = 0.$$

Но

$$\varphi_q \beta f(\alpha) \psi_p = \varphi_q \beta f(a_p) \psi_p = f(a_p) \varphi_q \beta \psi_p$$

и

$$\varphi_q f(\alpha) \beta \psi_p = f(a_q) \varphi_q \beta \psi_p,$$

Откуда

$$\varphi_q [\beta f(\alpha) - f(\alpha) \beta] \psi_p = [f(a_p) - f(a_q)] \varphi_q \beta \psi_p = 0.$$

¹ Предполагается, что функция $f(x)$ вещественной переменной x принимает только вещественные значения (по крайней мере в точках, являющихся собственными числами наблюдаемой α). Примечание переводчика

Этот результат верен для любого собственного ψ - символа, ψ_p наблюдаемой α , поэтому он же будет верен и для любого ψ - символа, который может быть разложен по ψ_p . Аналогично этому он должен быть верен и для любого φ - символа, который может быть разложен по собственным φ - символам, φ_q наблюдаемой α , так как он верен для любого φ_q .

Поэтому

$$\beta f(\alpha) - f(\alpha)\beta = 0,$$

что и требовалось доказать. В этом доказательстве мы не пользовались предположением, что β должна быть вещественной наблюдаемой, но относительно α мы, разумеется, сделали предположение, что она вещественна, для того, чтобы функция $f(\alpha)$ могла всегда иметь смысл.

Докажем теперь обратную теорему, а именно: если каждая наблюдаемая, переместимая с вещественной наблюдаемой α , коммутирует также и с некоторой наблюдаемой f , то f есть функция от α . Сперва покажем, что если ψ_p есть собственный ψ - символ наблюдаемой α , то он же будет собственным ψ - символом наблюдаемой f .

Ведем наблюдаемую β , удовлетворяющую следующим условиям:

Во-первых, $\beta \psi_q = 0$, где ψ_q — любой собственный ψ - символ наблюдаемой α , принадлежащий собственному числу a_q , которое не равно a_p , т. е. собственному числу собственного ψ - символа ψ_p ; во-вторых, $\beta \psi_p = \psi_p$, и, в-третьих, $\beta \psi_p' = 0$, где ψ_p' — любой из некоторой совокупности собственных ψ - символов наблюдаемой α , принадлежащих собственному числу a_p и образующих вместе с ψ_p полную систему линейно независимых собственных ψ - символов наблюдаемой α , принадлежащих собственному числу a_p . При этом, ψ_p , все ψ_p' и все ψ_q образуют полную систему независимых ψ - символов, откуда следует, что наблюдаемая β вполне определена этими тремя условиями. Легко убедиться в том, что

$$\alpha \beta \psi_q = 0 = \beta \alpha \psi_q,$$

$$\alpha \beta \psi_p = a_p \psi_p = \beta \alpha \psi_p,$$

$$\alpha \beta \psi_p' = 0 = \beta \alpha \psi_p'.$$

$$\alpha \beta \psi = \beta \alpha \psi,$$

где ψ обозначает любой ψ - символ, а значит, β и α коммутируют друг с другом. Поэтому, согласно сделанному предположению, β коммутирует также и с f , откуда

$$\beta f \psi_p = f \beta \psi_p = f \psi_p.$$

Для любого ψ - символа, ψ справедливо утверждение, что

$$\beta \psi = c \psi_p,$$

где c — некоторое число; в этом легко убедиться, разлагая ψ по ψ_p , ψ_p' и ψ_q и помножая β на каждый член разложения в отдельности. Поэтому

$$\beta f \psi_p = c \psi_p^1,$$

откуда

$$f \psi_p = c \psi_p,$$

Иными словами — ψ_p есть собственный ψ - символ наблюдаемой f . Для того, чтобы закончить доказательство того утверждения, что f есть функция наблюдаемой α , удовлетворяющая данному выше определению функции, остается показать, что если два, или несколько собственных ψ - символов наблюдаемой α принадлежат одному и тому же собственному значению этой наблюдаемой, то они же принадлежат одному и тому же собственному значению наблюдаемой f . Функциональная зависимость собственных значений f от собственных значений α определит функциональную зависимость f от α . Доказательство таково: если два, или несколько собственных ψ - символов принадлежат одному и тому же

¹ Число c в этом равенстве, разумеется, отлично от числа c в предыдущем равенстве $\beta \psi = c \psi_p$.

собственному значению, то любая их линейная комбинация будет также собственным ψ -символом наблюдаемой α .

Но из того, что уже было доказано, вытекает, что эта линейная комбинация должна быть также собственным ψ -символом наблюдаемой f ;

Но это может быть только в том случае, если все собственные ψ -символы, входящие в эту комбинацию, принадлежат одному и тому же собственному числу наблюдаемой f .

§16. Примеры функций наблюдаемых.

Рассмотрим несколько примеров элементарных функций вещественной наблюдаемой α .

Если нуль не есть собственное число наблюдаемой α , то должна существовать «обратная наблюдаемая» α^{-1} .

Согласно определению она удовлетворяет равенству

$$\alpha^{-1} \psi_p = \alpha_p^{-1} \psi_p,$$

где ψ_p есть собственный ψ -символ наблюдаемой α , принадлежащей собственному значению α_p . Отсюда следует:

$$\alpha \alpha^{-1} \psi_p = \alpha \alpha_p^{-1} \psi_p = \psi_p,$$

а так как это верно для всех ψ_p , то должно быть $\alpha \alpha^{-1} = I$. Таким же образом доказывается, что $\alpha^{-1} \alpha = I$. Любое из двух последних равенств определяет α^{-1} однозначно, если только α^{-1} действительно существует в смысле приведенного определения. Для того. Чтобы доказать это, предположим, что имеются два решения уравнения $\alpha \alpha^{-1} = I$, а именно $(\alpha^{-1})_1$ и $(\alpha^{-1})_2 = I$ имеем:

$$\alpha (\alpha^{-1})_1 = I, \quad \alpha (\alpha^{-1})_2 = I,$$

откуда следует

$$\alpha \xi = 0, \quad (13)$$

где

$$\xi = (\alpha^{-1})_1 - (\alpha^{-1})_2.$$

Если α такова, что существует отличное от тождественного нуля ξ , удовлетворяющее условию (13), то наблюдаемая α не может иметь обратной, удовлетворяющей нашему определению; ведь если бы такая обратная наблюдаемая существовала, то, обозначив ее α^{-1} мы получили бы, помножая уравнение (13) слева на α^{-1}

$$0 = \alpha^{-1} \alpha \xi = \xi.$$

Итак, $\xi = 0$, и оба решения уравнения $\alpha \alpha^{-1} = I$ тождественно равны. В качестве другого примера рассмотрим квадратный корень из α .

Он определяется формулой.

$$\sqrt{\alpha} \psi_p = \pm \sqrt{\alpha_p} \psi_p. \quad (14)$$

Квадратный корень из α существует всегда, но он является вещественной наблюдаемой только в том случае, когда α не имеет отрицательных собственных чисел. Из (14) вытекает

$$\sqrt{\alpha} \sqrt{\alpha} \psi_p = \sqrt{\alpha_p} \sqrt{\alpha_p} \psi_p = \alpha \psi_p,$$

откуда

$$\sqrt{\alpha} \sqrt{\alpha} = \alpha. \quad (15)$$

Благодаря двойному знаку в формуле(14) квадратный корень из наблюдаемой остается в значительной степени неопределенным. Для того чтобы определить, квадратный корень однозначно, нужно выбрать определенный знак квадратного корня из каждого α_p , а это все равно, что фиксировать знак квадратного корня из вещественной переменной, область изменения которой состоит из собственных чисел α_p . Этот знак можно выбрать как угодно,

изменяя его самым причудливым образом при переходе от одного собственного числа к другому, и уравнение (14) при этом будет определять наблюдаемую \sqrt{a} , удовлетворяющую уравнению (15) и потому имеющую право называться квадратным корнем из a . Если наблюдаемая a имеет два различных собственных ψ - символа, принадлежащих одному и тому же собственному числу a_q , то можно определить наблюдаемую, \sqrt{a} равенством (14), таким образом, чтобы одному из этих двух собственных ψ - символов соответствовал знак +, другому знак -, а ψ - символам, принадлежащим другим собственным числам, какие угодно знаки. Эта наблюдаемая будет по-прежнему удовлетворять равенству (15), но она уже не будет функцией от наблюдаемой a в смысле нашего определения: ведь это определение требует, чтобы каждому собственному числу a_q соответствовал один и только один коэффициент в правой части формулы (14), представляющей однозначную функцию вещественной переменной a_p .

Квадратный корень из a , определенный таким неоднозначным образом, не удовлетворяет, например тому условию, что он должен коммутировать со всякой наблюдаемой, которая коммутирует с a . Поэтому в данном случае, в отличие от того, что было в случае a^{-1} , уравнение (15) недостаточно для определения квадратных корней, и его следует дополнить тем условием, что определяемая наблюдаемая действительно является функцией от a . Число различных квадратных корней из a равно 2^n , где n есть число различных собственных чисел наблюдаемой a . Наиболее важным из этих квадратных корней обычно считается (в том случае, когда все собственные числа наблюдаемой a положительны) тот, при определении которого всегда берется знак +.

В качестве примера неаналитической функции рассмотрим модуль $|\alpha| \psi_p = |a_p| \psi_p$; она является обыкновенной наблюдаемой величиной и может, при желании, свободно употребляться в символической алгебре наблюдаемых, хотя, хотя соответствующая функция вещественной переменной и не обладает повсюду непрерывной производной.

§. 17. Совместные собственные состояния.

Может случиться, что состояние ψ является в одно и то же время собственным состоянием двух наблюдаемых α и β , т.е. что оно удовлетворяет сразу двум уравнениям $\alpha\psi = a\psi$ и $\beta\psi = b\psi$, где a и b суть числа. В этом случае мы имеем:

$$\alpha\beta\psi = \alpha b\psi = \beta a\psi \text{ или } (\alpha\beta - \beta\alpha)\psi = 0.$$

Это наводит на мысль, что наиболее благоприятным случаем для возможности отыскания совместного собственного состояния обеих наблюдаемых α и β является тот, когда $\alpha\beta - \beta\alpha = 0$, т.е. когда α и β коммутируют друг с другом. Когда α и β непереместимы друг с другом, возможность существования у них собственного состояния не исключена совершенно, но, во всяком случае, является чем-то исключительным. С другой стороны, когда α и β коммутируют друг с другом, то совместных собственных состояний имеется так много, что любое состояние системы, как мы сейчас докажем, может быть разложено по этим совместным собственным состояниям. Эта теорема является обобщением теоремы о разложении, данной в §14.

Пусть α и β будут две коммутирующие наблюдаемые величины, и пусть ψ_a будет собственным ψ - символом наблюдаемой α , принадлежащим собственному числу a . Согласно теореме о разложении (см §14) мы можем представить ψ_a в виде суммы собственных ψ -символом наблюдаемой β , т.е.

$$\psi_a = \sum_b \psi_b, \quad (16)$$

где ψ_b есть собственный ψ - символ наблюдаемой β , принадлежащий собственному значению b . Покажем теперь, что каждый ψ_b в разложении (16) является в то же время собственным ψ - символом наблюдаемой α , т.е. что он есть совместный собственный ψ - символ наблюдаемых α и β . Если $f(\beta)$ есть некоторая функция наблюдаемой β , то обязательно должно быть

$$\alpha f(\beta) \psi_a = \alpha \sum_b f(\beta) \psi_b = \alpha \sum_b f(\beta) \psi_b,$$

что вытекает из определения функции, данного в §1 (стерто) из доказанной в §15 теоремы следует, что если α коммутирует с β , то она должна коммутировать также с $f(\beta)$ а потому:

$$\alpha f(\beta) \psi_a = f(\beta) \alpha \psi_a = f(\beta) \alpha \psi_a = \alpha f(\beta) \sum_b \psi_b = \alpha \sum_b f(b) \psi_b.$$

Итак

$$\alpha \sum_b f(b) \psi_b = \alpha \sum_b f(b) \psi_b. \quad (17)$$

Но $f(b)$ есть совершенно произвольная функция вещественной переменной b , а это значит, что в каждой точке b области изменения вещественной переменной b значение функции $f(b)$ является совершенно произвольным числом. Поэтому можно приравнять друг другу коэффициенты при $f(b)$ в обеих частях формулы (17), что дает нам

$$\alpha \psi_b = \alpha \psi_b.$$

Итак, каждый ψ_b в разложении (17) является собственным ψ - символом наблюдаемой α , принадлежащим тому же собственному значению α , что и ψ_a ; каждый ψ_b в разложении (17) является, следовательно, совместным собственным ψ - символом наблюдаемых α и β .

Каждый собственный ψ - символ ψ_a наблюдаемой α может быть разложен по таким совместным собственным ψ . Но ведь любой ψ - символ может быть разложен по ψ_a , а, следовательно, любой ψ - символ может быть разложен по совместным собственным ψ - символам обеих коммутирующих наблюдаемых.

Легко доказать и обратную теорему, а именно, что если две наблюдаемые α и β обладают тем свойством, что любой ψ - символ может быть разложен на по их собственным совместным собственным ψ , то они (*т.е.* α и β) коммутируют друг с другом. В самом деле, если ψ_{ab} есть совместный собственный ψ - символ наблюдаемых α и β , принадлежащий соответственно двум собственным значениям a и b , то

$$(\alpha \beta - \beta \alpha) \psi_{ab} = (a b - b a) \psi_{ab} = 0.$$

Поэтому

$$(\alpha \beta - \beta \alpha) \psi = 0,$$

где ψ есть какой-то ψ - символ, который может быть разложен по ψ_{ab} .

Если по ψ_{ab} может быть разложен любой ψ , то

$$\alpha \beta - \beta \alpha = 0,$$

что и требовалось доказать.

Понятие совместного собственного ψ - символа очевидно может быть обобщено на случай более, чем двух наблюдаемых, причем доказанная только что теорема по-прежнему остается верной, т.е. возможно разложить любой ψ -символ по совместным собственным ψ - символам любой системы коммутирующих наблюдаемых и наоборот. Те же самые рассуждения, которые позволили доказать эту теорему для частного случая двух коммутирующих наблюдаемых, остаются годными и в более общем случае. Так, например и в случае трех наблюдаемых α , β и γ , каждая из которых коммутирует с остальными двумя, можно разложить каждый совместный собственный ψ - символ наблюдаемых α и β по собственным ψ - символам наблюдаемой γ и затем доказать, что каждый из этих собственных ψ - символов наблюдаемой γ есть в то же время собственный ψ - символ наблюдаемых α и β .

Тот факт, что существует теорема о разложении по совместным собственным ψ - символам двух или большего числа коммутирующих наблюдаемых, аналогичная теореме о разложении по собственным ψ - символам одной наблюдаемой, показывает, что система двух, или нескольких коммутирующих наблюдаемых во многом похожа на одну наблюдаемую величину; в целом ряде случаев можно трактовать такую систему двух или несколько коммутирующих наблюдаемых как одну наблюдаемую, результат измерения которой выражается двумя или несколькими значениями. Таким образом, невозможно, например, применить без всяких изменений изложенную в §15 теорию функций одной наблюдаемой величины к функциям двух или большего числа коммутирующих наблюдаемых. Если $\alpha, \beta, \gamma, \dots$

этих наблюдаемых: то функция $f(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$ этих наблюдаемых может быть определена из того условия, что $f(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$ этих наблюдаемых может быть определена из того условия, что $f(\alpha, \beta, \gamma, \dots) \psi_{abc} = f(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$, где ψ_{abc} есть совместный собственный ψ - символ наблюдаемых $\alpha, \beta, \gamma, \dots$, принадлежащий соответственно собственным значениям a, b, c, \dots , а $f(a, b, c, \dots)$ есть функция вещественных переменных a, b, c, \dots , область изменения которых состоит соответственно из собственных значений наблюдаемых $\alpha, \beta, \gamma, \dots$. Доказанные в §15 теоремы о функциях одной наблюдаемой применимы также и к функциям нескольких коммутирующих наблюдаемых: доказательства для обоих случаев формально эквивалентны. Так например можно доказать теорему о том, что всякая наблюдаемая, коммутирующая с каждой из нескольких коммутирующих друг с другом наблюдаемых $\alpha, \beta, \gamma, \dots$, должна коммутировать также и с любой функцией $f(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$ этих наблюдаемых.

Если дано наибольшее возможное количество независимых коммутирующих друг с другом наблюдаемых, (их независимость обозначает, что ни одна из них не является функцией остальных), то у них не может существовать более одного совместного собственного состояния, принадлежащего данной системе собственных значений. Докажем, это.

Пусть α_r будет одной из коммутирующих наблюдаемых, предположим, что имеется два независимых совместных собственных ψ -символа всех наблюдаемых α_r , например ψ_1 и ψ_2 , причем они принадлежат одной и той же системе собственных значений. Введем новую наблюдаемую β , определенную равенствами $\beta\psi_1 = \psi_1; \beta\psi_2 = 0; \beta\psi_3 = 0$, где ψ_3 есть любой совместный собственный ψ - символ наших коммутирующих наблюдаемых, принадлежащий другой системе собственных значений. Наблюдаемая β будет коммутировать со всеми α и вместе с тем не будет их функцией, что видно из того обстоятельства, что любая линейная комбинация ψ_1 и ψ_2 будет совместным собственным ψ -символом всех α_r , но не будет собственным ψ -символом наблюдаемой β ; следует, что система коммутирующих наблюдаемых α_r удовлетворяет поставленным условиям, каждое собственное состояние этой системы однозначно определяется собственными значениями, которым оно принадлежит. Такую систему коммутирующих наблюдаемых мы будем называть *полной*.

§ 18. Некоторые теоремы о вероятностях.

Определим теперь, вероятность того, что измерение даст заданный результат, если оно производится над системой, находящейся в данном состоянии. Единственной физической гипотезой, которой мы будем при этом пользоваться, будет сделанное в § 11 допущение о среднем значении наблюдаемой. Для того чтобы определить вероятность того, что измерение, произведенное над системой в состоянии ψ , даст значение a наблюдаемой α , воспользуемся тем обстоятельством, что при измерении наблюдаемой $f(\alpha)$, где $f(\alpha)$ есть любая функция наблюдаемой $f(\alpha)$, средний результат должен быть равен

$$\psi f(\alpha) \psi,$$

где φ есть мнимо-сопряженный по отношению к ψ φ - символ, при условии, что φ и ψ нормированы. Допустим, что φ и ψ разложены по собственным φ - символам и ψ \square символам наблюдаемой α , т.е.

$$\varphi = \sum_a \varphi_a, \quad \psi = \sum_{a'} \psi_{a'} \quad (18)$$

где φ_a принадлежит собственному числу a . Средний результат измерения $f(\alpha)$ будет равен

$$\sum_a \varphi_a f(\alpha) \sum_{a'} \psi_{a'} = \sum_{aa'} f(a) \varphi_a \psi_{a'} = \sum_a f(a) \varphi_a \psi_a. \quad (19)$$

Последнее равенство вытекает из доказанной в § 13 теоремы о том, что собственные состояния, принадлежащие различным собственным числам, ортогональны друг к другу. Но если $P(a)$ есть вероятность того, что измерение наблюдаемой $f(\alpha)$ должно быть равно $\sum_a f(a) P(a)$, так как обычные правила теории вероятностей должны быть верны и в этом случае. Приравнявая это выражение выражению (19), мы находим

$$\sum_a f(a) P(a) = \sum_a f(a) \varphi_a \psi_a.$$

Это верно для любой функции $f(a)$ вещественной переменной a ; поэтому можно приравнять друг другу коэффициенты при $f(a)$ в обеих частях равенства, откуда следует

$$P(a) = \varphi_a \psi_a, \quad (20)$$

Это выражение вероятности $P(a)$ приводит, как легко проверить к значению, равному единице. Для вероятности того, что наблюдаемая α примет одно из своих возможных значений: ведь из того, что φ и ψ нормированы, вытекает:

$$\sum_a \varphi_a \sum_{a'} \psi_a = 1,$$

а это значит, что

$$\sum_a \varphi_a \psi_a = 1.$$

Выражению (20) можно придать иной вид, введя в разложения (18) численные коэффициенты, т.е. положив

$$\varphi = \sum_a c_a \varphi_a, \quad \psi = \sum_{a'} c_{a'} \psi_{a'}$$

и допустив, что φ_a и ψ_a нормированы. Тогда $P(a)$ получается в виде

$$P(a) = c_a \varphi_a c_a \psi_a = |c_a|^2,$$

так что вероятность того, что α примет заданное значение, равна квадрату абсолютной величины соответствующего коэффициента разложения.

Отсюда сразу вытекает, что если состояние ψ является собственным состоянием наблюдаемой α , принадлежащим собственному значению a , то вероятность того, что α примет значение a , равна единице. Таким образом, из общего допущения о среднем значении наблюдаемой удалось вывести следствие, что наблюдаемая α удовлетворяющая уравнению $\alpha\psi = a\psi$, наверное, имеет значение a в состоянии ψ . Другим непосредственным следствием из этого допущения является то, что если a может быть результатом измерения наблюдаемой α в состоянии $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, то существует конечная вероятность получить этот же результат, по крайней мере, одного из состояний ψ_1 или ψ_2 : ведь если в разложении, по крайней мере, одного из символов ψ_1 и ψ_2 по тем же собственным ψ - символам отсюда явствует, что данное в § 6 определение суперпозиции эквивалентно тому, которое содержится в символической алгебре, если принять сделанное в этой алгебре отождествление со средним значением наблюдаемой α .

Все только что полученные следствия остаются справедливыми и в том случае, когда мы заменим наблюдаемую α системой двух или большего числа коммутирующих наблюдаемых; формальная сторона доказательства останется при этом неизменной. Так например, если ψ разложено по совместным собственным ψ - символам двух коммутирующих наблюдаемых α и β , т.е.

$$\psi = \sum_{ab} \psi_{ab}$$

где ψ_{ab} – совместный собственный ψ - символ наблюдаемых α и β , принадлежащий соответственно двум собственным значениям a и b , измеряя наблюдаемые α и β в состоянии ψ , равна $\varphi_{ab} \psi_{ab}$, при условии, что ψ нормировано.

Существование определенной вероятности получения этих результатов независимо от порядка, в котором производятся наблюдения, возможно только при этом условии, что оба наблюдения не мешают друг другу. Это заставляет высказать предположение, согласно которому условие, что две наблюдаемые коммутируют друг с другом, равносильно условию, что оба наблюдения совместимы друг с другом. Справедливость этого предположения будет формально доказана.

Но прежде чем перейти к доказательству, мы должны дать математическую формулировку того условия, что наблюдения производят в системе наименьшую возможную пертурбацию; до сих пор мы трактовали это условие только с качественной стороны.

Рассмотрим случай, когда над системой в состоянии ψ производится наблюдение, состоящее в измерении наблюдаемой α . Состояние системы после наблюдения должно быть

собственным состоянием наблюдаемой α , так как в этом состоянии существует некоторый результат измерения этой наблюдаемой, вероятность которого равна единице.

Предположим, что наблюдение производится только так, что состояние системы после этого наблюдения совпадает с одним из членов разложения первоначального ψ по собственным ψ -символам наблюдаемой α , т.е. совпадает с одним из ψ_a в формуле $\psi = \sum_a \psi_a$.

Такое предположение вполне законно, так как каждому собственному значению a , обладающему конечной вероятностью стать результатом измерения, соответствует один собственный ψ -символ ψ_a в этом разложении. Такое наблюдение α имеет право считаться производящим в системе наименьшую возможную пертурбацию. Итак, наблюдениями, производящими в системе наименьшую возможную пертурбацию, могут считаться те, которые обладают свойством, что состояние системы до наблюдения может быть получено в результате суперпозиции всех возможных состояний после наблюдения, или же наблюдения, обладающие тем свойством, что всякий возможный результат любого наблюдения системы в начальном состоянии является возможным результатом и тогда, когда то же самое наблюдение производится над системой в одном из ее конечных состояний. Именно о таких наблюдениях шла речь в §4, когда обсуждалось понятие совместимости наблюдений. Благодаря существованию наблюдений, обладающих этим свойством, теорема о разложении, данная в §14, становится физической необходимостью.

Пусть α и β будут двумя коммутирующими переменными и пусть некоторое произвольное состояние ψ разложено по совместным собственным состояниям этих наблюдаемых

$$\psi = \sum_{ab} \psi_{ab}$$

Тогда разложение ψ по собственным ψ -символам наблюдаемой α должно иметь вид:

$$\psi = \sum_a \psi_a \quad (21)$$

$$\psi_a = \sum_b \psi_{ab} \quad (22)$$

и аналогичным образом разложение ψ по собственным ψ -символам наблюдаемой β должно быть

$$\psi = \sum_b \psi_b \quad (23)$$

где

$$\psi_b = \sum_a \psi_{ab} \quad (24)$$

Значками a и b в том и в другом случае обозначаются соответственные собственные значения. Если ψ нормировано, то вероятность получить в этом состоянии результат b при измерении наблюдаемой β равна $\varphi_b \psi_b$. Если при измерении действительно получается этот результат, то состояние системы после измерения будет ψ_b , если только измерение, согласно предыдущему определению, производится с наименьшей возможной пертурбацией системы. Если в конечном состоянии ψ_b произвести измерение α , то вероятность получить результат будет (см. формулу 24)

$$\frac{\varphi_{ab} \psi_{ab}}{\varphi_b \psi_b}$$

(знаменатель необходимо написать потому, что символ ψ_b)

Следовательно, на основании теоремы об умножении вероятностей, вероятность получить сперва результат b , измеряя β а затем результат a при измерении α равна $\varphi_{ab} \psi_{ab}$. Полная вероятность получения результата a при втором наблюдении независимо от результата α первого наблюдения будет равна

$$\sum_b \varphi_{ab} \psi_{ab}$$

Если произвести над нашей системой наблюдение α в ее начальном состоянии ψ , не производя наблюдения β , то вероятность получения результата a будет равна, на основании формулы (21), $\varphi_a \psi_a$. Но из формулы (22) вытекает, что $\varphi_a \psi_a$ равно

$$\sum_b \varphi_{ab} \sum_{b'} \psi_{ab'} = \sum_b \varphi_{ab} \psi_{ab};$$

это явствует из теоремы об ортогональности (§12). Таким образом, эта вероятность равна вероятности получить результат a в наблюдении α , производимом после наблюдения β . Это и есть условие совместимости α и β (см. § 4).

Докажем теперь обратное утверждение, а именно, что если двух наблюдаемых α и β являются совместимыми наблюдениями, то α и β коммутируют друг с другом. В § 4 было показано, что если над системой в любом состоянии производятся оба совместимые наблюдения α и β , то окончательным состоянием системы будет такое, в котором и то и другое наблюдения должны привести к определенному результату с вероятностью, равной единице; иными словами, окончательное состояние системы будет совместным собственным состоянием наблюдаемых α и β . Если измерения производятся с наименьшей возможной пертурбацией в смысле приведенного определения, то начальное состояние ψ может быть разложено по всем возможным конечным состояниям. Это значит, что любой ψ - символ может быть разложен по совместным собственным ψ - символам наблюдаемых α и β , которые, следовательно, коммутируют друг с другом.

То обстоятельство, что коммутативность наблюдаемых величин обозначает в то же время совместимость соответствующих наблюдений, делает физически необходимой доказанную в § 15 теорему о том, что всякая наблюдаемая, коммутирующая с наблюдаемой α , коммутирует также и с любой ее функцией $f(\alpha)$; этой теореме теперь может быть придана такая формулировка: всякое наблюдение, совместимое с наблюдением α , совместимо также и с наблюдением $f(\alpha)$;

В такой формулировке теорема становится физически очевидной, так как всякое наблюдение величины α есть в то же время наблюдение величины $f(\alpha)$.

Покажем теперь, что из общей гипотезы, о среднем значении наблюдаемой возможно вывести тот факт, что вероятность согласования двух состояний $\psi_1 \varphi_2$ равна, $|\varphi_2 \psi_1|^2$, если ψ_1 и φ_2 нормированы. Мы уже видели, что из общей гипотезы можно вывести тот факт, что вероятность значения a наблюдаемой α в состоянии ψ_1 равна $|c_a|^2$, где c_a есть коэффициент при ψ_a в разложении ψ_1 по собственным ψ - символам наблюдаемой α :

$$\psi_1 = \sum_a c_a \psi_a \quad (25)$$

где ψ_a есть собственный ψ - символ наблюдаемой α , принадлежащий ее собственному значению a (при этом предполагается, что ψ_1 и ψ_a нормированы). Этот результат остается верным и в том случае, когда α обозначает не одну наблюдаемую, а целую систему коммутирующих наблюдаемых α_r и ψ_a есть совместный собственный ψ - символ этих наблюдаемых, принадлежащий системе собственных чисел a .

Существует максимальное наблюдение, которое должно в состоянии ψ_2 с несомненностью привести к некоторому определенному результату. Это максимальное наблюдение заключается в измерении некоторой системы коммутирующих наблюдаемых α_r , причем эта система должна быть полной (в смысле определения, данного в конце предыдущего параграфа), если только рассматриваемое наблюдение действительно является максимальным. Состояние ψ_2 должно быть совместным собственным состоянием всех этих наблюдаемых α_r ; не существует другого состояния, которое было бы совместным собственным состоянием этих наблюдаемых, принадлежащим той же системе собственных значений, что и ψ_2 . Поэтому член в разложении (25), относящийся к этой системе собственных значений, должен быть равен ψ_2 или, по крайней мере, отличаться от ψ_2 несущественным численным множителем.¹

Вероятность согласования ψ_1 и ψ_2 , т.е. вероятность того, что наблюдение α в состоянии ψ_1 приведет к тому же самому результату, к какому оно приводит в состоянии ψ_2 , должна быть

¹ Так как ψ_2 нормировано, то модуль такого численного множителя должен равняться единице.

равна поэтому $|c_{a2}|^2$, где c_{a2} есть коэффициент при том символе ψ_a в разложении (25), который равен ψ_2 . Но из теоремы об ортогональности следует, что $\varphi_2 \psi_1$ как раз равно этому же коэффициенту c_{a2} ; поэтому вероятность согласования равна $|\varphi_2 \psi_1|^2$.

§ 19. Касательные преобразования.

Докажем следующую важную теорему теории собственных значений:

Если S есть наблюдаемая, имеющая обратную S^{-1} , и если a есть какая угодно наблюдаемая, то собственные значения наблюдаемой SaS^{-1} равны собственным значениям наблюдаемой a . Пусть a будет собственным значением наблюдаемой a и пусть ψ_a будет принадлежащим этому собственному значению собственным ψ - символом той же наблюдаемой, т.е. $a\psi_a = a\psi_a$. Отсюда следует:

$$S\alpha S^{-1} S\psi_a = S\alpha\psi_a = S\alpha\psi_a = a S\psi_a.$$

Поэтому $S\psi_a$ есть собственный ψ - символ наблюдаемой SaS^{-1} , принадлежащий собственному значению a . Легко сказать тем же самым способом и обратное утверждение, а именно, что если a является собственным значением наблюдаемой SaS^{-1} и если ψ есть принадлежащий этому собственному значению собственный ψ - символ, то a в то же время является собственным значением наблюдаемой a : принадлежащий ему собственный ψ - символ есть $S^{-1}\psi$.

Для того чтобы эта теорема была справедливой, совсем не обязательно, чтобы S была вещественной наблюдаемой. Если S не вещественна, то для определения обратной наблюдаемой S^{-1} нельзя пользоваться общим определением функций наблюдаемых величин, но для доказательства теоремы в этом случае достаточно воспользоваться условиями $SS^{-1} = S^{-1}S = I$. При этом S может быть любой наблюдаемой, удовлетворяющей тому условию, что существует наблюдаемая S^{-1} , удовлетворяющая равенствам $SS^{-1} = S^{-1}S = I$. Для справедливости теоремы нет надобности также, чтобы a обязательно была вещественной наблюдаемой; но так как только вещественные наблюдаемые интересуют нас в квантовой механике, то рассматриваемая теорема нам будет нужна только в тех случаях, когда и a и SaS^{-1} вещественны. Это налагает условие на S . Если наблюдаемая SaS^{-1} должна быть вещественной при каждом вещественном a , то из правила (22) в §10 вытекает, что

$$S\alpha S^{-1} = \overline{S\alpha S^{-1}} = \overline{S^{-1}\alpha S} = \overline{S^{-1}\alpha S},$$

откуда мы заключаем (не обращая внимания на несущественные численные множители):¹

$$S^{-1} = \bar{S}, \quad S = \overline{S^{-1}}.$$

Из этих двух условий каждое является следствием другого.

Если S удовлетворяет этим условиям, то преобразование системы наблюдаемых a_r в систему наблюдаемых $\beta_r Sa_r S^{-1}$ называется касательным преобразованием; мы увидим в дальнейшем, что оно во многом аналогично касательному преобразованию в классической механике.

Каждая новая наблюдаемая β_r обладает теми же собственными значениями, как и соответствующая a_r . Рассматриваемое преобразование обладает также и другими замечательными свойствами, а именно: если между некоторыми a существует алгебраическая зависимость, то между соответствующими β существует та же самая функциональная зависимость.

¹ Из $S\alpha S^{-1} = \overline{S^{-1}\alpha S}$ следует (при умножении справа на S или слева на \bar{S}), что $\bar{S}S\alpha = \bar{S}S\alpha = \overline{S^{-1}\alpha S}SS$. Но из $S^{-1}S = 1$ следует $\bar{S}S^{-1} = 1$, поэтому $\bar{S}S\alpha = \alpha SS$, т. е. $\bar{S}S$ коммутирует с любой вещественной наблюдаемой α . Отсюда вытекает, что любой ψ - символ является собственным ψ - символом наблюдаемой $\bar{S}S$, а, следовательно, что все собственные значения этой наблюдаемой равны друг другу. Это равносильно утверждению, что наблюдаемая $\bar{S}S = c$ следствие $\bar{S} = cS^{-1}$, откуда вытекает $\bar{S}S = ScS^{-1} = cSS^{-1} = c = \bar{S}S$; следовательно, c есть вещественное число. Поэтому окончательно должно быть $S = cS^{-1}$, $\bar{S} = c\overline{S^{-1}}$, где c – вещественное число.

Для доказательства первого из этих двух свойств заметим, что всякое алгебраическое соотношение между наблюдаемыми α может быть записано в целом рациональном виде

$$\sum c \alpha_p \alpha_q \dots \alpha_z = 0,$$

где число членов суммы и число множителей, составляющих каждый из них, могут быть какими угодно и где c – произвольные численные множители. Помножив это равенство слева на S , а справа на S^{-1} , мы получаем:

$$\sum c S \alpha_p \alpha_q \dots \alpha_z S^{-1} = 0,$$

откуда

$$\sum c S \alpha_p S^{-1} S \alpha_q S^{-1} \dots S \alpha_z S^{-1} = 0 \quad \text{или} \quad \sum c \beta_p \beta_q \dots \beta_z = 0,$$

что и требовалось доказать.

Для доказательства второго свойства положим $a_2 = f(a_1)$, где $f(a)$ есть функция вещественной переменной a , область изменения которой состоит из собственных значений наблюдаемой a_1 .

Так как они являются в то же время собственными значениями наблюдаемой β_1 , то функция $f(\beta_1)$, также имеет смысл. Пусть ψ_a будет собственный ψ - символ наблюдаемой a_1 , принадлежащий собственному значению a .

Тогда

$$f(a_1) \psi_a = f(a) \psi_a. \quad (26)$$

Но $S\psi_a$ должен быть собственным ψ - символом наблюдаемой $\beta_1 = S\alpha_1 S^{-1}$, принадлежащим тому же собственному значению; поэтому

$$f(\beta_1) S \psi_a = f(a) S \psi_a. \quad (27)$$

Помножая (26) слева на S , мы находим

$$S f(a_1) S^{-1} S \psi_a = S f(a) \psi_a = f(\beta_1) S \psi_a. \quad (28)$$

Но в виде $S\psi_a$ может быть представлен всякий собственный ψ - символ наблюдаемой β_1 ; поэтому всякий ψ может быть разложен по $S\psi_a$. Отсюда следует, что можно приравнять друг другу коэффициенты при $S\psi_a$ в обеих частях равенства (28), откуда следует

$$f(\beta_1) = S f(a_1) S^{-1} = S \alpha_2 S^{-1} = \beta_2,$$

что и требовалось доказать.

Если два касательных преобразования производятся одно за другим, то их результат будет также касательным преобразованием.

Для того чтобы убедиться в этом, рассмотрим преобразование $\beta_r = S\alpha_r S^{-1}$ от α к β и преобразование $\gamma_r = T\beta_r T^{-1}$ от β к γ . Имеем

$$\gamma_r = T S \alpha_r S^{-1} T^{-1}.$$

Но

$$(TS) (S^{-1} T^{-1}) = 1 \quad \text{и} \quad (S^{-1} T^{-1}) (TS) = 1,$$

а это значит, что мы можем положить

$$S^{-1} T^{-1} = (TS)^{-1}.$$

Связь между α и γ может быть, поэтому выражена формулой

$$\gamma_r = T S \alpha_r (TS)^{-1},$$

т. е. формулой касательного преобразования.

Если наблюдаемая S в преобразовании $\beta = S_\alpha S^{-1}$ бесконечно мало отличается от единицы, то мы имеем дело с бесконечно малым касательным преобразованием. Положим $S=1+iA$, где A настолько мала, что ее квадратом можно пренебречь (наблюдаемая мала в том случае, если все ее собственные значения малы, или, что то же самое, если ее среднее значение в любом состоянии мало). Тогда должно быть $S^{-1}=1-iA$, так как, пренебрегая наблюдаемой A^2 , мы можем при этом писать $SS^{-1}=S^{-1}S=I$. Формула преобразования получает вид:

$$\beta = (1 + iA) \alpha (1 - iA),$$

откуда следует

$$\beta - \alpha = i(A\alpha - \alpha A); \quad (29)$$

если пренебречь наблюдаемой A^2 . Таков общий вид бесконечно малого касательного преобразования. Для того чтобы $\beta - \alpha$ было вещественным при любом вещественном α , нужно, чтобы наблюдаемая A была вещественной.

В качестве примера из теории касательных преобразований рассмотрим некоторые свойства наблюдаемых p и q , удовлетворяющих уравнению (26) в §12. Положив $S=e^{icq}$, где c — вещественное число, откуда следует $S^{-1}=\bar{S}$, применим ту теорему, что P имеет те же собственные значения, что и $S_p S^{-1}$. Имеем:

$$S_p S^{-1} = e^{icq} p e^{-icq} = (p - c) e^{icq} e^{-icq} = p - c$$

[см. уравнение (28) в §12]. Итак p имеет те же собственные значения, что и $p-c$, но с другой стороны собственные значения $p-c$ на c меньше, чем собственные значения p ; поэтому, если a есть собственное значение наблюдаемой p то $a-c$ тоже должно быть ее собственным значением. Это верно при любом c ; поэтому все значения от $-\infty$ до $+\infty$ являются собственными значениями наблюдаемой q . Все это является необходимым следствием алгебраического соотношения $qp - pq = i$.

IV. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СОСТОЯНИЙ И НАБЛЮДАЕМЫХ.

§ 20. ОБЩИЕ СВОЙСТВА

В двух предыдущих главах мы имели дело с абстрактными символами, обозначающими состояние и наблюдаемые; не делая никаких допущений о специальном характере этих состояний и наблюдаемых, мы подчинили их определенным общим законам. В этой главе мы рассмотрим представления этих абстрактных символов, т.е. системы чисел, обладающие свойствами, в точности соответствующими свойствами тех символов, представителями которых они являются. Найдя такую систему значений и уразумев смысл соотношения между нею и абстрактных символов, имея дело исключительно с их представителями; к этим представителям, которые являются системами значений, можно применять обыкновенные методы математики. Разумеется, этим путем нельзя получить ни одного соотношения между абстрактными символами, которого нельзя было бы вывести и непосредственно из символической алгебры без всякой помощи представителей. Но представления абстрактных символов позволяют иногда получать нужные результаты более легким и удобным способом; кроме того значения, с которыми приходится иметь дело в представлениях, часто имеют простой физический смысл; вот почему метод представлений оказывается полезным в применениях квантовой механики.

Предположим, что мы имеем некоторую полную систему независимых ψ -символов. Обозначим члены этой системы через ψ_p . Тот факт, что система является полной, обозначает, что любой ψ -символ может быть выражен в виде линейной комбинации членов этой системы, а именно:

$$\psi = \sum_p a_p \psi_p, \quad (1)$$

где коэффициенты a_p суть числа. Так как члены системы независимы, то разложение вида (1) является единственным; в самом деле, если бы наряду с (1) мы имели разложение $\psi = \sum_p a'_p \psi_p$, то вычитание дало бы

$$0 = \sum_p (a_p - a'_p) \psi_p,$$

что при независимых ψ_p может случиться лишь при условии, что $a_p = a'_p$ для всех значений p . Поэтому каждый ψ -символ однозначно определяет систему чисел a_p , представляющих коэффициенты разложения (1), и наоборот любая система чисел a_p определяет ψ . Между ψ -символами и системами значений a_p существует одно-однозначное соответствие.

Если ψ_a соответствует системе значений a_p , а ψ_b системе b_p , то

$$\psi_a = \sum_p a_p \psi_p, \quad \psi_b = \sum_p b_p \psi_p,$$

откуда

$$\psi_a + \psi_b = \sum_p (a_p + b_p) \psi_p,$$

а это обозначает, что $\psi_a + \psi_b$ соответствует системе значений $a_p + b_p$. Таким же образом, если c есть некоторое значение, то $c\psi_a$ соответствует системе значений ca_p . Отсюда следует, что все свойства ψ -символов по отношению к сложению и к умножению на числа имеются также и у соответствующих систем значений a_p . Системы значений являются поэтому представителями ψ -символов; каждому ψ соответствует в виде представителя система значений a_p , определенная равенством (1). При этом ψ_p называются фундаментальными или основными ψ -символами представителя. Если взять другую систему основных ψ -символов, то каждому ψ будет соответствовать уже другая система значений; представление будет иным. Каждой полной системе независимых ψ соответствует свое представление, в котором эти независимые ψ являются основными ψ -символами. Если наглядно изобразить ψ -символы в виде векторов, то значения, соответствующие данному ψ в некотором определенном представлении, являются слагающими этого вектора в некоторой системе осей, причем осями

служат основные ψ -символы представления (система осей может быть и косоугольной). Различными представителями одного и того же ψ -символа оказываются тогда его составляющие в различных системах осей. Состояние определяется отношением значений a_p друг к другу, так как ψ -символ может быть помножен на любое число после чего он попрежнему обозначает то же самое состояние.

Рассмотрим теперь, что является представителем наблюдаемой α . Если ψ_q есть один из основных ψ -символов некоторого представления, то можно составить произведение $\alpha\psi_q$ и развернуть его в ряд по основным ψ -символам, согласно формуле (1); мы получим:

$$\alpha\psi_q = \sum_p \psi_p \alpha_{pq}, \quad (2)$$

где коэффициенты α_{pq} суть значения, зависящие от значка q того ψ -символа, который стоит в левой части формулы (2); поэтому они отмечены не только значком p , но и значком q . Мы написали в формуле (2) коэффициенты α_{pq} справа от соответствующих ψ_p , вместо того, чтобы, как это делается обыкновенно, писать коэффициенты слева. При этом мы имели в виду сделать порядок значков в формуле (2) более удобным для запоминания: тот значок коэффициента α_{pq} , который всегда ближе к ψ_p , совпадает со значком при ψ_p . В будущем мы будем широко пользоваться этим правилом.

Каждая наблюдаемая α однозначно определяет по формуле (2) систему значений α_{pq} . Наоборот система значений α_{pq} однозначно определяет наблюдаемую α . Между наблюдаемыми α и системой значений α_{pq} существует таким образом одно-однозначное соответствие. Поэтому такие системы чисел являются представителями наблюдаемых. Исследуем теперь соотношение между свойствами этих систем значений и свойствами самих наблюдаемых.

Система значений, являющаяся представителем наблюдаемой. Двумерна, так как значения снабжены двумя значками; всего удобнее записать такую систему в виде матрицы, а именно так, чтобы значение α_{pq} рассматриваемой системы было элементом матрицы, стоящим на пересечении p -ой строки и q -ого столбца. Таким образом представителями наблюдаемых являются матрицы. Число строк и столбцов матрицы равно числу основных ψ -символов представления; каждому основному ψ -символу, соответствуют одна строка и один столбец. Строка и столбец, соответствующие одному и тому же основному ψ -символу, соответствуют в силу этого и друг другу. Элемент матрицы, стоящий на пересечении соответствующих друг другу строки и столбца, т.е. элемент вида α_{pq} , называется диагональным элементом, так как если расположить строки и столбцы матрицы в одинаковом порядке, то все такие элементы оказываются на диагонали.

Если наблюдаемая α представлена матрицей α_{pq} , а наблюдаемая β матрицей β_{pq} , то легко проверить, что наблюдаемая $\alpha + \beta$ будет представлена матрицей $\alpha_{pq} + \beta_{pq}$, а наблюдаемая $c\alpha$, где c есть число, матрицей $c\alpha_{pq}$. Символически эти утверждения могут быть записаны в виде уравнений:

$$(\alpha + \beta)_{pq} = \alpha_{pq} + \beta_{pq}, \quad (3)$$

$$(c\alpha)_{pq} = c\alpha_{pq}, \quad (4)$$

которые представляют обычные правила сложения матриц и умножения матрицы на числа. Далее, если произведение $\alpha\beta$ представлено матрицей $(\alpha\beta)_{pq}$, то согласно определению мы имеем

$$(\alpha\beta)_{pq} = \sum_r \psi_r (\alpha\beta)_{pq}, \quad (5)$$

С другой стороны

$$\begin{aligned}
 (\alpha \beta)_{\psi_q} &= \alpha (\beta \psi_q) = \alpha \sum_p \psi_p \beta_{pq} = \\
 &= \sum_r (\alpha \psi_r) \beta_{rq} = \sum_{pq} \psi_p \alpha_{pr} \beta_{rq}.
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

Сравнивая коэффициенты в правых частях формул (5) и (6), мы получаем

$$(\alpha \beta)_{pq} = \sum_r \alpha_{pr} \beta_{rq}, \tag{7}$$

так как ведь ψ_p друг от друга независимы. Итак, матрица, являющаяся представителем наблюдаемой $\alpha\beta$, есть вычисленное по обычным правилам матричной алгебры произведение матрицы-представителя наблюдаемой α на матрицу-представитель наблюдаемой β . Расположение значков p и q , которое мы выбрали для значений α_{pq} в уравнении (2), необходимо для того, чтобы это простое правило перемножения матриц казалось в данном случае применимым. Если бы вместо уравнения (2) мы положили

$$\alpha_{\psi_q} = \sum_p \alpha_{qp} \psi_p$$

то закон перемножения имел бы вид

$$(\alpha \beta)_{pq} = \sum_r \alpha_{rq} \beta_{pr} \tag{8}$$

а это не так удобно, как (7).

Уравнения (3), (4) и (7) показывают, что свойства наблюдаемых по отношению к сложению и умножению в точности совпадают со свойствами соответствующих им матриц, которые поэтому и заслуживают названия представителей. Матрицы, как и наблюдаемые, удовлетворяют всем правилам обычной алгебры за исключением лишь коммутативного закона умножения.

Мы упоминали, что обыкновенные числа могут считаться частными случаями наблюдаемых. Матрица, которая является представителем числа c , обладает элементами c_{pq} , удовлетворяющими определению

$$c_{\psi_q} = \sum_p \psi_p c_{pq},$$

откуда

$$c_{pp} = c, \quad c_{pq} = 0 \quad (p \neq q).$$

Поэтому матрица-представитель числа c есть диагональная матрица, т.е. все ее элементы равны нулю за исключением диагональных. Кроме того все ее диагональные элементы равны c . мы можем положить

$$c_{pq} = c \delta_{pq},$$

где символ δ_{pq} определяется равенствами

$$\delta_{pp} = 1, \quad \delta_{pq} = 0 \quad (p \neq q). \tag{9}$$

Значения δ_{pq} суть элементы матрицы, которая является представителем единицы. Эта матрица отличается тем свойством, что любая матрица, помноженная на нее слева или справа, не меняется в результате этого перемножения.

Найдем теперь закон, по которому перемножаются представители наблюдаемых и ψ -символов. Пусть ψ представлено системой значений a_p по формуле (1) пусть ψ -символ $\alpha\psi$, где α есть некоторая наблюдаемая, представлен системой значений b_p . Это значит, что

$$\alpha \psi = \sum_q \psi_q b_q.$$

Из уравнения (1) вытекает

$$\alpha \psi = \alpha \sum_p \psi_p a_p = \sum_{pq} \psi_q \alpha_{qp} a_p.$$

Приравнивая коэффициенты при ψ_q , мы получим

$$b_q = \sum_p \alpha_{qp} a_p. \tag{10}$$

Это и есть искомое правило умножения. Это правило наводит на мысль, что мы могли бы писать систему значений a_p в виде матрицы, строки которой соответствуют различным основным ψ -символам, представления, но которая при этом состоит только из одного столбца. Уравнение (10) тогда будет правилом умножения такой матрицы на квадратную матрицу α_{pq} .

Соответствие, которое мы установили между свойствами наблюдаемых и ψ -символов, с одной стороны, и свойствами их представителей, с другой, и которые мы выразили формулами (3), (4), (7), (10), позволяет переписать любое уравнение между абстрактными символами в виде уравнения между их представителями. Предположим например, что нам дано уравнение

$$\alpha \beta \psi = \gamma \psi' + \psi'' \quad (11)$$

где α , β и γ три наблюдаемые, а ψ , ψ' и ψ'' три состояния. Приравнивая друг к другу представителей обеих сторон этого уравнения и пользуясь правилом (10), мы получаем

$$\sum_p (\alpha \beta)_{qp} a_p = \sum_p \gamma_{qp} a_p' + a_q''$$

где a_p , a_p' и a_p'' являются представителями состояний ψ , ψ' и ψ'' . Из (7) следует

$$\sum_{pr} \alpha_{qr} \beta_{rp} a_p = \sum_p \gamma_{qp} a_p' + a_q''$$

все символы, фигурировавшие в первоначальном уравнении (11), заменены здесь своими представителями, занявшими те самые места, которые раньше были заняты символами. Значки расположены по очень простым и легко запоминаемым правилам: каждые два следующих друг за другом множителя имеют общий значок, причем одинаковые значки непосредственно следуют друг за другом; первый значок оказывается одним и тем же в каждом члене уравнения. Суммирование производится по каждому значку, который в одном и том же члене уравнения встречается дважды.

В качестве примеров уравнений, которые могут быть переписаны таким образом, можно рассмотреть любое из уравнений между абстрактными символами в теории собственных чисел, изложенной в предыдущей главе. Например уравнение (1) этой главы идет

$$\sum_q \alpha_{pq} a_q = a a_p$$

Если матрица α_{pq} известна, то мы имеем перед собой обыкновенную систему алгебраических уравнений с неизвестными a_p и известными a . Любое значение a , при котором эта система уравнений относительно неизвестных a_p имеет решение, не равное тождественно нулю, называется, называется собственным числом матрицы α_{pq} . Если исключить неизвестные a_p , по отношению к которым уравнения линейны и однородны, то получится, как известно из теории определителей, уравнение

$$\begin{vmatrix} \alpha_{11} - a & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} - a & \alpha_{23} & \dots & \alpha_{2n} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} - a & \dots & \alpha_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} & \dots & \alpha_{nn} - a \end{vmatrix} = 0, \quad (12)$$

позволяющее определить собственные значения a . Собственные значения матрицы, являющейся представителем некоторой наблюдаемой, в то же самое время являются, конечно, и собственными значениями самой наблюдаемой.

§ 21. ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ.

Мы пока еще не рассматривали вопроса о представителях ϕ -символов. Всегда можно трактовать ϕ -символы совершенно аналогично ψ -символам; поэтому возьмем некоторую полную систему независимых ϕ , например ϕ_p и назовем их основными ϕ -символами представления. Любой ϕ -символ может быть представлен в виде линейной комбинации этих ϕ_p , а именно

$$\varphi = \sum_p \alpha_p^* \varphi_p \quad (13)$$

Система значений α_p^* и будет представителем символа φ . Далее, если α есть наблюдаемая, то можно помножить ее на любой из основных φ -символов представления, например на φ_p , и развернуть произведение $\varphi_p \alpha$ в ряд по этим же основным φ -символам. Мы будем иметь

$$\varphi_p \alpha = \sum_q \alpha_{pq} \varphi_q \quad (14)$$

Коэффициенты α_{pq} образуют матрицу, которую можно считать представителем наблюдаемой φ . Легко проверить, что матричные правила сложения и умножения, выраженные уравнениями (3), (4) и (7), имеют место и в том случае, когда представители наблюдаемых образованы не с помощью основных ψ -символов, как в уравнении (2), а с помощью основных φ -символов, как в уравнении (14). Следует заметить, что расположение знаков при коэффициентах α_{pq} заставляет в правой части уравнения (14) писать эти коэффициенты слева от соответствующих φ_q в противоположность тому, что было в уравнении (2). Порядок знаков, принятый в уравнении (14), так же как и их порядок в уравнении (2), совершенно необходим для того, чтобы получилось правило умножения (7), удовлетворяющее нашему условию о значках, а не правило умножения (8).

Итак мы можем построить представление наблюдаемых как на основе системы линейно независимых φ -символов, так и на основе системы линейно независимых ψ -символов. Естественно возникает вопрос, может ли система независимых φ -символов приписывать наблюдаемым в качестве их представителей те же самые матрицы, какие им приписывает некоторая система ψ -символов. Если бы это было так, то мы могли бы считать оба представления одним и тем же представлением, дающим представителей и φ -символам, и ψ -символам, наблюдаемым. Необходимое условие для того, чтобы основные φ -символы и основные ψ -символы давали наблюдаемым тех же самых представителей, заключается в том, чтобы эти основные φ -символы и ψ -символы были снабжены одной и той же системой значков p, q, r, \dots (этими же значками будут обозначены строки и столбцы матриц). Если это так, то каждому основному ψ -символу соответствует φ -символ, имеющий тот же самый значок. В том способе обозначений, которым мы пользовались до сих пор, наличие одного и того же значка у некоторого φ -символа и некоторого ψ -символа означало, что они являются мнимо-сопряженными символами, соответствующими одному и тому же состоянию, но теперь мы отказываемся от этого условия.

Мы же снабдили основные φ -символы в уравнении (14) теми же значками, какими снабжены основные ψ -символы в уравнении (2); поэтому нам остается исследовать, какие следствия вытекают из предположения, что для любой наблюдаемой φ коэффициенты α_{pq} в уравнении (14) равны коэффициентам α_{pq} в уравнении (2). Если в (14) мы заменим значок q , по которому производится суммирование, значком r , и помножим на ψ_q справа, то получим

$$\varphi_p \alpha \psi_q = \sum_r \alpha_{pr} \varphi_r \psi_q \quad (15)$$

Таким же образом, если в (2) мы заменим значок p , по которому производится суммирование, значком r и помножим слева на φ_p , то получим

$$\varphi_p \alpha \psi_q = \sum_r \varphi_r \psi_r \alpha_{rq} \quad (16)$$

Правые части уравнений (15) и (16) могут быть равны друг другу для любой наблюдаемой α , т.е. для любых коэффициентов α_{pq} , только в том случае, если

$$\begin{aligned} \varphi_p \psi_q &= 0 & (p \neq q) \\ \varphi_p \psi_p &= c_p \end{aligned} \quad (17)$$

и

где c – значение независимое от p .¹ Без особого ущерба для общности мы можем положить $c=1$, т.е.

$$\varphi_p \psi_p = 1. \quad (18)$$

Уравнения (17) и (18) могут быть записаны более компактно в виде

$$\varphi_p \psi_q = \delta_{pq}^* \quad (19)$$

Таково условие того, что система основных φ -символов и система основных ψ -символов осуществляют одно и то же представление.

С помощью этого условия легко получить простые формулы, определяющие коэффициенты разложений. Для того, чтобы определить коэффициенты a_p в формуле (1), дающей разложение в ряд любого символа ψ , заметим, что

$$\varphi_q \psi = \varphi_q \sum_p a_p \psi_p = \sum_p a_p \delta_{pq}^* = a_q \quad (20)$$

Таким же образом для любого коэффициента a_p^* в формуле (13) при любом φ мы находим

$$a_q^* = \varphi \psi_q \quad (21)$$

Точно так же (14) вытекает

$$\varphi_p \alpha \psi_r = \sum_s \alpha_{rs} \varphi_s \psi_r = \alpha_{pr} \quad (22)$$

что позволяет в явном виде писать элементы матрицы, являющейся представителем наблюдаемой α . Такой же точно результат мы могли бы получить и из (2).

Для того, чтобы получить единое представление для символов φ и ψ и для наблюдаемых, мы должны были отказаться от того способа обозначений, в котором φ и ψ с одинаковыми значками были мнимо-сопряженными символами, соответствующими одному и тому же состоянию. Это делает такое представление неудобным и потому бесполезным. Но в частном случае может оказаться, что каждый ψ -символ и φ -символ с тем же значком действительно являются мнимо-сопряженными символами, соответствующими одному и тому же состоянию, в каковом частном случае можно и не отказываться от старого способа обозначений. Такого рода представления особенно полезны. Они называются ортогональными представлениями. Система состояний, обозначенных основными φ -символами или ψ -символами такого ортогонального представления, называется системой основных состояний ортогональных представлений. Условие (17) показывает, что все основные состояния ортогональны друг другу, а условие (18) – что изображающие их символы φ и ψ нормированы.

Наглядное изображение φ - и ψ -символов с помощью векторов позволяет найти простое геометрическое толкование ортогональных представлений. Каждый φ -символ и мнимо-сопряженный ему ψ -символ изображаются двумя комплексно-сопряженными векторами. Мы можем без особой непоследовательности предположить, что каждый основной φ -символ и мнимо-сопряженный с ним основной ψ -символ ортогонального представления изображаются одним и тем же вещественным вектором. Условие (17) показывает, что все эти вещественные векторы взаимно перпендикулярны, а условие (18) – что их длина равна единице; одним словом, они являются единичными векторами прямоугольной декартовой системы координат. Числа, изображающие любой φ - и ψ -символ, являются его составляющими в этой координатной системе. Так как система координат вещественна, то любой φ -символ и мнимо-сопряженный с ним ψ -символ, изображаемые в виде двух комплексно-сопряженных векторов, должны обладать комплексно-сопряженными составляющими; отсюда следует, что их

¹ Доказательство таково: правая часть (15) может быть записана в виде $\sum_{sr} \delta_{ps} \alpha_{sr} \varphi_r \psi_q$, а правая часть (16) в виде $\sum_{sr} \varphi_p \psi_r \alpha_{rs} \delta_{sq}$ или, что то же самое, $\sum_{sr} \varphi_p \psi_s \alpha_{sr} \delta_{rq}$. Приравнявая коэффициенты при α_{sr} , получим равенство

$$\delta_{ps} \varphi_r \psi_q = \varphi_s \psi_r \delta_{rs}$$

которое должно быть верным для всех значений p, q, r, s . Полагая в частности $r=q, p \neq s$, получим $\varphi_p \psi_s = 0, r=q, s=p$, получим, что $\varphi_q \psi_q = \varphi_p \psi_p$ т.е. $\varphi_p \psi_p$ не зависит от значка p .

представителями являются две комплексно-сопряженные друг с другом системы чисел. Легко проверить, сравнивая уравнения (20) и (21), что это в самом деле верно. Таким образом, если отвлечься от неопределенности в знаке i , представителем состояния является одна и та же система чисел, независимо от того, изображается ли оно ϕ -символом или ψ -символом.

Если α есть вещественная наблюдаемая, то из уравнения (22) следует, что элементы ее представителя-матрицы удовлетворяют в случае ортогонального представления условию

$$\alpha_{pr} = \alpha_{rp}^*$$

Матрица, удовлетворяющая этому условию, называется эрмитовой. Если к тому же все элементы матрицы вещественны, то мы имеем $\alpha_{pr} = \alpha_{rp}$, т.е. матрица симметрична. Из (22) вытекает также, на основании § 11, что диагональный элемент α_{pp} равен среднему значению наблюдаемой в соответствующем основном состоянии ψ_p . Если α не вещественная наблюдаемая, то ее комплексно-сопряженная $\bar{\alpha}$, определение которой было дано в § 10, имеет в качестве представителя матрицу с элементами

$$\bar{\alpha}_{pr} = \alpha_{rp}^* \quad (23)$$

Матрицу $\bar{\alpha}_{pr}$ можно называть комплексно-сопряженной по отношению к α_{pr} .

§ 22. ФУНКЦИЯ δ .

Во всех предыдущих рассуждениях, относившихся к представлениям и к представителям, было сделано молчаливое допущение, что множество основных ψ -символов, если не конечно, то во всяком случае исчислимо и что каждый из этих ψ -символов, следовательно, может быть снабжен значком p , принимающим только дискретный ряд значений. В большинстве интересующих нас механических систем это условие не выполнено, и совокупность независимых состояний не только бесконечна, но даже обладает мощностью континуума. В подобных случаях мы можем отметить каждый из основных ψ -символов значком p , где значок p принимает любое значение из некоторого промежутка вещественных значений. Условие (1), гласящее, что любой ψ является линейной комбинацией основных ψ , должно быть переписано с интегралом вместо суммы, а именно

$$\psi = \int a_p \psi_p dp. \quad (24)$$

Под областью интегрирования подразумевается весь тот промежуток, в котором изменяется значок p . Коэффициенты a_p представляют функцию переменной p , принимающей непрерывный ряд значений.

Не совсем верно, что всякий ψ может быть представлен в виде (24) с конечными коэффициентами a_p (то обстоятельство, что все значения a_p конечны, подразумевается, когда мы говорим, что a_p является функцией переменной p , принимающей непрерывный ряд значений). Примером такого ψ -символа, который не может быть представлен в виде (24),

является любой из основных ψ , например ψ_q . Другим примером является $\frac{\partial \psi_q}{\partial q}$ (если ψ_q

является непрерывной функцией параметра q и такое дифференцирование возможно). Вся последующая теория оказалась бы чрезвычайно неудобной, если бы нам приходилось все время иметь в виду, что существуют такие исключительные примеры ψ -символов, которые не могут быть представлены в виде (24). Это затруднение можно преодолеть посредством допущения, что коэффициенты a_p становятся при некоторых значениях p бесконечно большими, что и позволяет формально написать в требуемом виде любой ψ -символ. Подобное же ухищрение мы встречаем и в геометрии, где параллельные прямые представляют исключение из того правила, что две прямые линии всегда пересекаются в одной точке: это исключение может быть избегнуто, если мы примем, что параллельные линии пересекаются на бесконечности.

Заметим, что те ψ -символы, которые не могут быть представлены в виде (24) при условии конечности a_p , всегда могут считаться предельным случаем таких ψ -символов, которые имеют вид (24). Так например, ψ_q можно написать в виде

$$\psi_q = \lim_{n \rightarrow \infty} \int a_{pn} \psi_p dp,$$

где коэффициенты a_{pn} удовлетворяют условию

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \int a_{pn} dp &= 1, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} a_{pn} &= 0 \quad (\text{при } p \neq q). \end{aligned} \quad 1$$

По мере того, как мы прилижемся к пределу, a_{pn} становится функцией p , которая равна нулю при всех значениях p за исключением лишь значений близких к q , но которая настолько велика вблизи q , что интеграл $\int a_{pn} dp$ близок к единице. Мы можем формально писать

$$\psi_q = \int a_p \psi_p dp, \quad (24')$$

где

$$a_p = \lim_{n \rightarrow \infty} a_{pn}$$

Это a_p является, так сказать, несобственной функцией p , принимающей значение нуль при всех p за исключением $p=q$ и значение ∞ в точке $p=q$, причем эта бесконечность такова, что интеграл $\int a_p dp$ равен единице. Поэтому a_p можно рассматривать как функцию двух переменных p и q , зависящую только от их разности; мы положим

$$a_p = \delta(p - q), \quad (25)$$

где несобственная функция $\delta(x)$ определяется условиями

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx &= 1, \\ \delta(x) &= 0 \quad (\text{при } x \neq 0). \end{aligned}$$

Введение функции δ в наши рассуждения само по себе не будет источником нестрогости, так как любое уравнение, в котором участвует функция δ , может быть переписано в совершенно эквивалентном, но большей частью более громоздком виде без всякой функции δ . Таким образом функция δ есть не более, чем удобное обозначение. Погрешности против математической строгости возникают в нашей теории только потому, что мы совершаем над абстрактными символами такие действия, которые не были предварительно строго определены (как например дифференцирование или интегрирование по встречающимся в этих символах параметрам). Если эти действия дозволены, то, имея дело с представителями абстрактных символов, можно совершенно свободно обращаться с δ -функцией так, как если бы она была непрерывной функцией, и при этом не будут получаться ошибочные результаты.

¹ Это можно сделать напр. следующим образом: разобьем числовую прямую на интервалы $(0, \frac{1}{n}), (\frac{1}{n}, \frac{2}{n}),$

$(\frac{2}{n}, \frac{3}{n}), \dots$ по одну сторону от нуля и на интервалы $(0, -\frac{1}{n}), (-\frac{1}{n}, -\frac{2}{n}), \dots$ по другую. В качестве a_{pn} возьмем такую функцию переменной p , которая равна n в том из интервалов, куда попало значение q , и равна нулю во всех остальных интервалах. Тогда будет $\int a_{pn} dp = 1$ при всяком n , а следовательно во всяком случае $\lim_{n \rightarrow \infty} \int a_{pn} dp = 1$.

Далее, если $p \neq q$, то a_{pn} станет равным нулю, как только n станет настолько большим, что числа p и q окажутся в различных интервалах (напр. если $n > \sqrt{\frac{1}{p-q}}$). Значит во всяком случае $\lim_{n \rightarrow \infty} a_{pn} = 0$ при $p \neq q$. Легко видеть, что

при этом определении функции a_{pn} предел выражения $\int a_{pn} \psi_p dp$ будет в самом деле равен ψ_q , так как это выражение на основании теоремы о среднем равно одному из значений ψ_p в том интервале, в котором лежит значение q .

Общее определение, данное в § 15, позволит нам даже определить δ -функцию наблюдаемой, если только эта наблюдаемая имеет непрерывный ряд собственных чисел.

Заметим себе некоторые элементарные свойства δ -функции, которые могут быть выведены из ее определения или по крайней мере не противоречат этому определению. Так например

$$\begin{aligned} \delta(-x) &= \delta(x), \\ x\delta(x) &= 0 \end{aligned} \quad (26)$$

и

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a), \quad (27)$$

любая

где $f(x)$ – любая непрерывная функция от x и a – любое значение;¹ при этом областью интегрирования может быть не обязательно промежуток $(-\infty, +\infty)$, но любой промежуток, содержащий число a . Действие, состоящее в умножении на $\delta(x-a)$ и в интегрировании по x , равносильно действию, состоящему в замене буквы x буквой a . Это верно и в том случае, когда действие применяется не к обычной функции $f(x)$, но к ψ -символу или к наблюдаемой, содержащей x в качестве параметра, если только выполнены обычные условия непрерывности. В самом деле мы применяем именно это правило, заменив функцию $f(x)$ ψ -символом ψ_p и значение a числом q , когда мы утверждаем, что равенство (24') имеет место при условии (25). Дальнейшим свойством δ -функции является

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(a-x)dx \delta(x-b) = \delta(a-b). \quad (28)$$

Для того, чтобы доказать это соотношение, будем считать интеграл, стоящий в левой части, функцией числа b , и назовем эту функцию $F(b)$. Мы сразу видим, что $F(b)=0$ при $b \neq a$ и кроме того

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} F(b)db &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(a-x)dx \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-b)db = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(a-x)dx = 1. \end{aligned}$$

Таким образом $F(b)$ удовлетворяет всем условиям, с помощью которых определяется $\delta(b-a)$, вследствие чего и можно положить $F(b) = \delta(b-a)$ или $F(b) = \delta(a-b)$. Уравнение (28) можно было бы получить из уравнения (27), если вместо $f(x)$ подставить несобственную функцию $\delta(x-b)$. Этот пример показывает, что с δ -функцией можно обращаться как с непрерывной функцией, не впадая при этом в ошибку.

Для того, чтобы представить $\frac{\partial \psi_q}{\partial q}$ в виде интеграла, стоящего в правой части формулы

(24), необходимо ввести в рассмотрение производную $\delta'(x)$ от функции $\delta(x)$. Эта производная является еще более разрывной и «несобственной» функцией, чем сама $\delta(x)$, но во многих случаях с ней также можно, не впадая в ошибку, обращаться как с непрерывной функцией от x . Ее основные свойства таковы:

$$\begin{aligned} \delta'(-x) &= -\delta'(x), \\ x\delta'(x) &= -\delta(x) \end{aligned} \quad (29)$$

¹ Равенство (27) получается непосредственно из (24) и (25), если мы положим $\psi_q = f(q)$ и вслед за этим заменим букву q буквой a , а букву p буквой x . [Мы имеем право это делать, так как рассуждения с помощью которых мы определили функцию δ , применимы не только к ψ -символам ψ_q , но и к обыкновенным функциям $f(q)$ от q .] Равенство (26) получится из (27), если мы рассмотрим тот частный случай, когда функция $f(x)$ тождественно равна x . В самом деле, равенство (27) дает тогда $\int_{-\infty}^{\infty} x\delta(x-a)dx = a$, откуда при $a=0$ имеем

$\int_{-\infty}^{\infty} x\delta(x)dx = 0$, а так как подынтегральная функция нигде не отрицательна, то $x\delta(x) = 0$ при любом x .

и

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x-a) dx = -f'(a), \quad (30)$$

где $f(x)$ – любая дифференцируемая функция от x (в том числе ψ -символ, содержащий параметр x , или наблюдаемая). Второе и третье из этих соотношений возможно получить, дифференцируя (26) по x и (27) по a . Третье соотношение можно проверить также посредством интегрирования по частям, а именно

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x-a) dx = \left[f(x) \delta(x-a) \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f'(x) \delta(x-a) dx = -f'(a)$$

на основании формулы (27). Другим свойством функции $\delta'(x)$ является соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(a-x) dx \delta(x-b) = \delta'(a-b), \quad (31)$$

которое можно получить, дифференцируя (28) по a . То же самое соотношение получится, если в формуле (27) заменить a на b и затем взять вместо $f(x)$ функцию $\delta'(a-x)$; это является примером того, что с функцией δ' можно поступать так, как если бы она была непрерывной функцией.

Если в формулу (30) подставить ψ_p вместо $f(x)$ (p – независимая переменная вместо x) и заменить a на q , то мы получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p \delta'(p-q) dp = -\frac{\partial \psi_q}{\partial q}.$$

Это показывает, что производная $\frac{\partial \psi_q}{\partial q}$ может быть представлена в виде интеграла, стоящего в правой части формулы (24), причем $\delta'(p-q)$ играет роль коэффициента a_p . Пользуясь производными более высокого порядка от δ , функции можно представить в таком же виде $\frac{\partial^2 \psi_q}{\partial q^2}$, $\frac{\partial^3 \psi_q}{\partial q^3}$ и т.д.¹

§ 23. СЛУЧАЙ НЕПРЕРЫВНОГО РЯДА СЛОВНЫХ СОСТОЯНИЙ.

Теперь мы можем обобщить теорию представления состояний и наблюдаемых на такие системы, у которых совокупность независимых состояний обладает мощностью континуума.² представителем символа ψ в левой части уравнения (24) будет совокупность чисел a_p , являющихся коэффициентами правой части, или, что то же самое, функция a_p переменной p , принимающей непрерывный ряд значений. Пусть α будет некоторая наблюдаемая; по аналогии с формулой (2) можно писать $\alpha \psi_q$ в виде

$$\alpha \psi_q = \int \psi_p dp \alpha_{pq},$$

¹ Формула $\frac{\partial \psi_q}{\partial q} = -\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p \delta'(p-q) dp$ может быть получена из (24) и (25) непосредственным дифференцированием по q , и это является дальнейшим примером того, что δ -функцией можно обращаться как с непрерывной функцией. Более общей формулой является

$$\frac{\partial^n \psi_q}{\partial q^n} = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p \delta^{(n)}(p-q) dp.$$

² Это выражение не вполне точно, так как вообще в случае механической системы существуют наблюдаемые с совокупностью собственных состояний, обладающей мощностью континуума, и на ряду с ними наблюдаемые с дискретной совокупностью собственных состояний. Так напр. в случае гармонического осциллятора (§ 41) энергия обладает дискретным рядом собственных состояний, а координата q (элонгация) – непрерывным. И та и другая совокупность собственных состояний может быть принята за совокупность основных состояний некоторого представления. Поэтому непрерывный или дискретный характер ряда основных состояний является свойством данного представления, а не данной механической системы.

где α_{pq} суть числа; функция α_{pq} двух переменных p и q , принимающих непрерывный ряд значений; является представителем наблюдаемой α . Иногда оказывается удобным называть эту функцию двух переменных матрицей для того, чтобы иметь возможность описывать случай (32) в таких же выражениях, как случай (2). Совокупность столбцов и совокупность строчек подобной матрицы обладают мощностью континуума. Формуле закона умножения (7) соответствует формула

$$(\alpha\beta)_{pq} = \int \alpha_{pr} dr \beta_{rq}, \quad (33)$$

которая доказывается аналогичным способом.¹ Таким же образом, по аналогии с формулой (10), мы находим, что функция b_p переменной p , являющаяся представителем символа $\alpha\psi$, связана с функцией a_p - представителем символа ψ - посредством соотношения²

$$b_q = \int \alpha_{qp} dp a_p, \quad (34)$$

Если рассматривать значение c как наблюдаемую, то его представитель c_{pq} , согласно определению, получится из формулы

$$c\psi_q = \int \psi_p dp c_{pq}, \quad (35)$$

откуда

$$c_{pq} = c\delta(p-q). \quad (36)$$

Мы видим, что общий элемент матрицы, изображающей единицу (единичной матрицы), равен $\delta(p-q)$; эта матрица попрежнему обладает тем свойством, что при помножении на нее слева или справа любая матрица остается равной самой себе. Если сравнить этот результат с соответствующим результатом в случае дискретности основных ψ -символов, то единственное различие окажется в том, что на месте символа δ_{pq} с двумя значками, определяемого формулой (9), теперь стоит δ -функция от разности обоих значков. Можно высказать общее правило, что δ -символ с двумя значками при переходе от сумм к интегралам всегда заменяется такой δ -функцией.

Связь между основными ψ -символами и основными δ -символами данного представления теперь гласит:

$$\varphi_p \psi_q = \delta(p-q). \quad (37)$$

Она получается из формулы (19) при замене символа δ с двумя знаками функцией δ в согласии с указанным правилом. Из условия (37) вытекает, что $\varphi_p \psi_p$ бесконечно. Таким образом, указанное в § 8 правило, согласно которому любой ψ -символ может быть помножен на любой ψ -символ, причем произведение является числом, должно быть истолковано в том смысле, что это число может быть и бесконечно большим.

Если в данном представлении каждый основной ψ -символ и основной ψ -символ с тем же значком представляют мнимо-сопряженные символы, обозначающие одно и то же состояние, то представление, как и прежде, является ортогональным. Рассмотрим теперь значение уравнения (37) в случае ортогонального представления. То уравнение может быть написано в виде двух уравнений:

$$\varphi_p \psi_q = 0 \text{ при } p \neq q, \quad (38)$$

$$\int \varphi_p \psi_q dp = 1. \quad (39)$$

Первое из этих условий, как и (17), показывает, что любые два основных состояния данного представления являются ортогональными. Второе условие по аналогии с (18) иногда

¹ А именно из формулы $\beta\psi_q = \int \psi_r dr \beta_{rq}$ пользуясь свойством линейности наблюдаемой α , получаем $\alpha\beta\psi_q = \int \alpha\psi_r dr \beta_{rq} = \iint \psi_r dp \alpha_{pr} dr \beta_{rq} = \int \psi_r dp \alpha\beta_{rq}$, откуда и следует (33).

² Оно доказывается так: из формулы $\psi = \int a_p \psi_p dp$ следует $\alpha\psi = \int a_p \alpha\psi_p dp = \int a_p \int \psi_q dq \alpha_{qp} dp$. С другой стороны $\alpha\psi = \int b_q \psi_q dq$. Сравнивая обе формулы, получим (34).

принимают в качестве определения нормальности ψ_q , когда значок q принимает непрерывный ряд значений, вместо прежнего определения нормальности $\varphi_q \psi_q = 1$, которое теперь оказывается математически бессодержательным, так как для того, чтобы символы φ и ψ в формуле (37) удовлетворяли этому условию, необходимо помножить их на бесконечно малые множители. Однако, если ввести это новое определение нормальности, то необходимо помнить, что данное в § 11 физическое толкование теории остается верным только в случае старого определения. Указанный в конце § 11 общий закон, согласно которому $\varphi_q \alpha \psi_q$ есть среднее значение наблюдаемой α в состоянии ψ_q , если только $\varphi_q \psi_q = 1$, остается в силе в случае непрерывного ряда основных состояний, как и случае дискретного их ряда. Правда, в случае непрерывного ряда $\varphi_q \alpha \psi_q$, вообще говоря, будет равняться нулю, если только $\varphi_q \psi_q = 1$; но, как мы увидим из применений теории, именно это и должно получаться из физических соображений. В этом случае только отношения средних значений различных наблюдаемых представляют интерес, а для вычисления этих средних оказывается полезным условие (39).

С помощью формулы (37) мы получаем из (24), применяя также и (27),

$$\varphi_q \psi_q = \varphi_q \int a_p \psi_p dp = \int a_p \delta(p - q) dp = a_q. \quad (40)$$

Этот результат, соответствующий формуле (20), дает в явном виде представителя ψ , т.е. совокупность коэффициентов правой части формулы (24). Представители мнимосопряженного φ -символа является, в соответствии с формулой (21), совокупность значений $a_q^* = \kappa \psi_q$, которые, в случае ортогонального представления, комплексно-сопряжены с значениями a_q . Таким же образом из формулы (32) мы получаем, в соответствии с формулой (22),

$$\varphi_r \alpha \psi_q = \int \varphi_r \psi_p dp \alpha_{pq} = \int \delta(r - p) dp \alpha_{pq} = \alpha_{rq}, \quad (41)$$

что дает нам в явном виде элементы матрицы, которая служит представителем наблюдаемой α . Однако тот результат, согласно которому диагональный элемент α_{pq} в случае ортогонального представления есть среднее значение α в состоянии ψ_q , уже не является справедливым, так как условие нормальности (37), которым мы здесь пользовались, не удовлетворяет физическому толкованию, данному в § 11. Если бы этот результат был справедлив, то например том случае, когда наблюдаемая α равна единице, мы получили бы диагональный элемент $\delta(q - q)$, равный бесконечности; между тем среднее значение единицы должно, разумеется, быть равно единице.

§ 24. ВЕСОВАЯ ФУНКЦИЯ.

Иногда оказывается полезным видоизменить уравнения (24), (32), которыми определяются представители состояний и наблюдаемых, введя так называемую весовую функцию. Для этого можно взять любую функцию ρ_p переменного p , определенную во всей области изменения того значка p , которым определяются независимые состояния ψ_p , и нигде не обращающуюся в нуль в этой области; место уравнений (24) и (32) можно писать

$$\psi = \int a_p \psi_p \rho_p dp, \quad (42)$$

$$\alpha \psi_q = \int \psi_p \rho_p dp \alpha_{pq}. \quad (43)$$

Новые коэффициенты a_p и α_{pq} могут считаться представителями состояния ψ и наблюдаемой α . При этом не получается очень существенного обобщения теории представлений, так как новые представители связаны со старыми посредством очень простых соотношений. Однако в некоторых применениях теории введение весовой функции оказывается удобным способом для упрощения внешнего вида уравнений и для придания представителям более непосредственного физического смысла (см. § 28). Мы могли бы,

разумеется, ввести аналогичное обобщение и в случае дискретного ряда основных состояний, но не существует повидимому примеров, в которых это оказалось бы полезным.

Если вводится весовая функция ρ , то она должна появиться не только в интегралах типа (42), (43). Но и во всех формулах, где встречается интегрирование по параметру ρ , который фигурирует в виде значка при основных ψ . Так например уравнение (33), представляющее правило умножения двух наблюдаемых, принимает теперь вид

$$(a^{\rho})_{pq} = \int \alpha_{pr} \rho_r dr \beta_{rq},$$

а уравнение (34), представляющее правило умножения наблюдаемой ψ , принимает вид

$$b_q = \int \alpha_{qp} \psi_p dp a_p.$$

Далее, представителем обыкновенного числа c , которое мы можем рассматривать как наблюдаемую, уже не является правая часть равенства (36), так как вместо формулы (35) мы теперь имеем

$$c \psi_q = \int \psi_p \rho_p dp c_{pq},$$

откуда

$$c_{pq} = c \rho_p^{-1} \delta(p-q) = c \rho_q^{-1} \delta(p-q).$$

Таким образом единичной матрицей является теперь уже не $\delta(p-q)$, а $\rho_p^{-1} \delta(p-q)$. Отсюда легко заключить, что уравнение (37) должно замениться уравнением

$$\varphi_p \psi_q = \rho_p^{-1} \delta(p-q). \quad (44)$$

Это подтверждается тем, что уравнение (39), представляющее условие нормальности, должно теперь писаться в виде

$$\int \varphi_p \psi_p \rho_p dp = 1. \quad (45)$$

Рассмотрим теперь, как изменяются представители состояний и наблюдаемых, когда вводится весовая функция. Если помножить φ_p и ψ_p уравнений (37) и (39) на $\rho_p^{-\frac{1}{2}}$, то они будут удовлетворять уравнениям (44) и (45). При этом следует помножить коэффициенты a_p из уравнения (24) на $\rho_p^{-\frac{1}{2}}$ для того, чтобы они удовлетворяли уравнению (42), а коэффициенты α_{pq} из уравнения (32) на $(\rho_p \rho_q)^{-\frac{1}{2}}$ для того, чтобы они удовлетворяли уравнению (43). Это частный случай общего правила, согласно которому при введении весовой функции каждый символ, содержащий значки p, q, \dots , помножается на $(\rho_p \rho_q \dots)^{-\frac{1}{2}}$. Из этого правила вытекает необходимость введения множителя ρ_p в любой интеграл, в котором интегрирование производится по переменной p ; для того, чтобы в этом убедиться, достаточно вспомнить, что в подынтегральной функции значок p должен содержаться дважды.

§ 25. ОБЩИЙ СЛУЧАЙ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ.

В большинстве приложений квантовой механики рассматриваемая атомная система обладает еще большим количеством независимых состояний, чем мы считали до сих пор. Может случиться, что единственным удобным обозначением основных состояний некоторого представления является совокупность n значков p_1, p_2, \dots, p_n , принимающих всевозможные значения в некоторой области n -мерного пространства с координатами p_1, p_2, \dots, p_n . Обобщения, которые могут быть сделаны в связи с этим, совершенно очевидны. Например, вместо формул (24) и (32), нужно ввести формулы

$$\psi = \int \int \dots \alpha_{p_1 p_2 \dots} \psi_{p_1 p_2 \dots} dp_1 dp_2 \dots \quad (46)$$

$$\alpha_{\psi_{q_1 q_2 \dots}} = \int \int \dots \psi_{p_1 p_2 \dots} dp_1 dp_2 \dots \alpha_{p_1 p_2 \dots q_1 q_2 \dots} \quad (47)$$

Представителем состояния ψ является теперь функция $a_{p_1 p_2 \dots}$ от переменных p_1, p_2, \dots , а представителем наблюдаем α оказывается «матрица» $\alpha_{p_1 p_2 \dots q_1 q_2 \dots}$, строки и столбцы которой обозначаются этими же переменными. При этом ψ —символ $\psi_{q_1 q_2 \dots}$, т.е. одно из основных состояний данного представления, получает представителя

$$\delta(p_1 - q_1) \delta(p_2 - q_2) \dots \delta(p_n - q_n), \quad (48)$$

что легко проверить, подставив это выражение в формулу (46) на место $a_{p_1 p_2 \dots}$ и выполнив интегрирование одно за другим с помощью формулы (27). Произведение (48) заменяет функцию $\delta(p - q)$, с которой приходится иметь дело в случае одного измерения. Таким же точно образом представителем ψ —символа

$$\frac{\partial \psi_{q_1, q_2, \dots}}{\partial q_m} \quad (m = 1, 2, \dots, n)$$

является

$$-\delta(p_1 - q_1) \delta(p_2 - q_2) \dots \delta(p_{m-1} - q_{m-1}) \delta'(p_m - q_m) \delta(p_{m+1} - q_{m+1}) \dots \delta(p_n - q_n), \quad (49)$$

что легко проверить с помощью формулы (30). Выражение (49) отличается от выражения (48) не только знаком, но и своим m -ым множителем.

Сделаем дальнейшее обобщение, которое должно включить в себя все случаи представителей, встречающиеся на практике, а именно допустим, что на ряду с интегралами попадают и знаки суммы. В случае одного измерения, например, мы имеем

$$\psi = \sum_p a_p \psi_p + \int a_p \psi_p dp. \quad (50)$$

Представителем состояния ψ является теперь дискретная совокупность чисел a_p на ряду с непрерывной совокупностью чисел a_p . Эти числа можно рассматривать как функцию, независимая переменная которой изменяется в области, состоящей из некоторого непрерывного промежутка и дискретного ряда точек. В многомерном случае интегрирование по некоторым переменным может производиться на ряду с суммированием по остальным. Общее правило, применимое к любому представлению, заключается в том, что представителем состояния является функция, которой каждая точка из ее области определения соответствует одному из основных состояний. Нельзя наложить никакого ограничения на число точек в этой области или на их расположение в пространстве (т.е. в пространстве с координатами p_1, p_2, \dots, p_n). Область может состоять, например, из дискретной совокупности точек вместе с любым количеством непрерывных областей, из которых каждая имеет любое число измерений. Представителем наблюдаемой является матрица, строки и столбы которой в однозначном соответствии с точками такой области.

Нетрудно понять, каким образом следует обобщить уравнения изложенной выше теории представлений; но фактическое написание их в наиболее общем виде потребовало бы чрезмерно громоздких обозначений. Поэтому мы рассмотрим в качестве примера лишь тот случай, когда имеет место формула (50). По аналогии с формулами (2) и (32) мы получаем определение представителя наблюдаемой α в виде следующих уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{pQ} &= \sum_p \psi_p \alpha_{pQ} + \int \psi_p dp \alpha_{pQ} \\ \alpha_{pQ} &= \sum_p \psi_p \alpha_{pQ} + \int \psi_p dp \alpha_{pQ} \end{aligned} \right\} \quad (51)$$

Представителем наблюдаемой является, таким образом, совокупность коэффициентов четырех различных видов, обозначаемых α_{pQ} , α_{pQ} , α_{pQ} , α_{pQ} и соответствующих разным случаям дискретных и непрерывных значений значков. Далее, по аналогии с (7) и (33), мы получаем закон умножения представителей двух наблюдаемых в следующем виде:

$$(\alpha \beta)_{PQ} = \sum_R \alpha_{PR} \beta_{RQ} + \int \alpha_{Pr} dr \beta_{rQ},$$

$$(\alpha \beta)_{PQ} = \sum_R \alpha_{PR} \beta_{RQ} + \int \alpha_{Pr} dr \beta_{rQ},$$

$$(\alpha \beta)_{Pq} = \sum_R \alpha_{PR} \beta_{Rq} + \int \alpha_{Pr} dr \beta_{rQ},$$

$$(\alpha \beta)_{Pq} = \sum_R \alpha_{PR} \beta_{Rq} + \int \alpha_{Pr} dr \beta_{rQ}.$$

В каждом из этих равенств происходит суммирование по R и интегрирование по r. Условия (19) и (37) получают вид

$$\varphi_p \psi_q = \delta_{pQ}, \quad \varphi_p \psi_Q = 0,$$

$$\varphi_p \psi_q = 0, \quad \varphi_p \psi_q = \delta(p - q).$$

Достаточно этих примеров для того, чтобы видеть, какой смысл получают уравнения теории представителей в различных частных случаях, которые могут встретиться.

Окончательное обобщение можно сделать, введя в общем случае весовую функцию. Эта весовая функция ρ может быть любой функцией переменных ρ_m , представляющих значки при основных ψ -символах, если только эта функция нигде не принимает значения нуль. Функция ρ будет появляться вместе с дифференциалами $d\rho_m$ в каждом интегрировании и кроме того войдет (в минус первой степени) в выражение единичной матрицы.

WWW.NIX.RU

V. ТЕОРИЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ.

§ 26. СОБСТВЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ В КАЧЕСТВЕ ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ.

В предыдущей главе мы ввели понятие о представлении абстрактных символов; это понятие рассматривалось исключительно с математической точки зрения, т. е. представители считались чем-то вроде координат соответствующих символов в некоторой координатной системе. Теперь мы должны рассмотреть специальные типы представлений, т. е. специальные координатные системы, избранные и отмеченные совершенно определенным образом. Представители абстрактных символов в таких координатных системах будут часто иметь непосредственный физический смысл. Заметим, что в этой главе и во всех дальнейших главах книги мы будем иметь дело только с ортогональными представлениями.

Ортогональное представление основано на полной системе ортогональных состояний, которые и являются основными состояниями этого представления. Легче всего получить такую систему состояний, пользуясь изложенной в главе III теорией собственных значений. Если дана система коммутирующих друг с другом вещественных наблюдаемых, то совместные собственные состояния такой системы наблюдаемых образуют полную систему состояний, причем любые два из них, принадлежащие различным системам собственных значений, ортогональны друг ко другу. Если система коммутирующих наблюдаемых есть полная система, то каждой системе собственных значений соответствует, как было сказано в § 17, только одно собственное состояние; следовательно в случае полной системы коммутирующих наблюдаемых все собственные состояния оказываются ортогональными друг ко другу и их можно сделать поэтому основными состояниями представления. Каждому из них соответствует определенная система собственных чисел; поэтому вместо того, чтобы обозначать эти основные состояния случайными индексами p_m , не имеющими физического смысла, как это было сделано в предыдущей главе, гораздо удобнее обозначить каждое такое основное состояние соответствующей ему системой собственных значений. Если коммутирующие наблюдаемые суть $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ и если обозначить собственные значения наблюдаемой ξ_m через ξ'_m, ξ''_m, \dots , то один из основных ψ -символов рассматриваемого представления может быть записан в виде $\psi(\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_n)$ или для краткости $\psi(\xi')$. Таким же образом $\varphi(\xi'')$ является одним из основных φ -символов того же представления. Основной φ -символ, мнимо-сопряженный по отношению к $\psi(\xi')$, есть $\varphi(\xi')$.

Обозначение собственных значений наблюдаемой одним, двумя и т. д. штрихами (например ξ'_m, ξ''_m, \dots) очень удобно, и мы в дальнейшем будем широко пользоваться этим обозначением. Необходимо ввести также и новое обозначение для представителей состояний и наблюдаемых величин; это новое обозначение должно сделать все наши уравнения гораздо более симметричными. Всякий ψ -символ может быть обозначен системой значений, из которых каждое соответствует одному из основных ψ -символов нашего представления, т. е. одной определенной системе собственных значений. То из них, которое соответствует системе собственных значений, $\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_n$, мы будем обозначать $(\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_n |)$ или для краткости $(\xi' |)$. Если должен быть написан представитель состояния, обозначенного символом ψ_k то значок k может быть написан по правую сторону от черты, т. е. $(\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_n | k)$ или короче $(\xi' | k)$. Оправданием для такого обозначения служит замечательная симметрия между числами ξ'_i относящимися к основному ψ -символу представления, и значком k , характеризующим представляемый ψ -символ ψ_k ; в дальнейшем мы сумеем убедиться в существовании этой симметрии и увидим, что написание значений ξ'_i слева от черты, а значка k справа от нее выражает эту симметрию совершенно точно. Таким же образом мы будем обозначать представителя любого φ -символа через $(| \xi')$ и в частности представителя φ -символа φ_k через $(k | \xi')$. Матричный элемент представителя наблюдаемой α , связанный с основными состояниями ψ_p и ψ_q (элемент α_{pq}), мы будем

обозначать в виде $(\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_n | \alpha | \xi''_1, \xi''_2, \dots, \xi''_n)$ или короче $(\xi' | \alpha | \xi'')$, где ξ' - собственные значения основного состояния ψ_p а ξ'' - собственные значения основного состояния ψ_q ; при этом сами основные состояния ψ_p и ψ_q в новой системе обозначений обозначаются через $\psi(\xi')$ и $\psi(\xi'')$

Для упражнения перепишем несколько формул предыдущей главы, применяя новые обозначения. Уравнения (3) и (4) принимают вид

$$\begin{aligned} (\xi' | \alpha + \beta | \xi'') &= (\xi' | \alpha | \xi'') + (\xi' | \beta | \xi''), \\ (\xi' | c \alpha | \xi'') &= c (\xi' | \alpha | \xi''). \end{aligned}$$

Формула (1) или (24), определяющая представителя ψ - символа, принимает вид (если мы ограничимся для определенности тем случаем, когда собственные значения всех наблюдаемых имеют непрерывный ряд значений)

$$\psi = \int \psi(\xi') d\xi'(\xi'), \quad (1)$$

где $d\xi'$ написано для краткости вместо произведения

$$d\xi'_1 d\xi'_2 \dots d\xi'_n$$

и для краткости же написан только один знак интеграла вместо n . Если соблюдать надлежащий порядок множителей, как в формуле (1), где $d\xi'$ написано между $\psi(\xi')$ и ξ' , то все ξ' оказываются написанными одно за другим: это новая формулировка «правила индексов», данного в конце § 20. Формула (2) или (32) предыдущей главы, определяющая представителя наблюдаемой α , принимает аналогично вид

$$\alpha \psi(\xi'') = \int \psi(\xi') d\xi'(\xi' | \alpha | \xi''). \quad (2)$$

Правило умножения представителей двух наблюдаемых, т. е. формула (7) или (33), становится в новых обозначениях

$$(\xi' | \alpha \beta | \xi'') = \int (\xi' | \alpha | \xi''') d\xi'''(\xi'' | \beta | \xi'''),$$

а правило умножения представителя наблюдаемой на представитель ψ - символа (формула 10 или 34) становится

$$(\xi' | l) = \int (\xi' | \alpha | \xi'') d\xi''(\xi'' | k), \quad (3)$$

где значок k относится к ψ - символу ψ_k а значок l к ψ - символу $\psi_l = \alpha \psi_k$. Наблюдаемая α , комплексно-сопряженная с α , обладает в новых обозначениях представителем

$$(\xi' | \bar{\alpha} | \xi'') = \overline{(\xi'' | \alpha | \xi')} \quad (4)$$

(см. формулу 23), а представители $(\xi' |)$ и $(| \xi')$ символа ψ и его мнимо- сопряженного φ являются сопряженными комплексными числами.

Рассматриваемое нами представление основано на коммутирующих друг с другом наблюдаемых $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$, совместные собственные состояния которых взяты в качестве основных состояний нашего представления. Посмотрим теперь, какой вид имеет представитель одной из этих коммутирующих наблюдаемых, например представитель ξ_m . Подставляя ξ_m вместо α в формулу (2), мы получим

$$\xi_m \psi(\xi'') = \int \psi(\xi') d\xi'(\xi' | \xi_m | \xi''). \quad (5)$$

Но так как $\psi(\xi'')$ является собственным состоянием наблюдаемой ξ_m , принадлежащим собственному значению ξ''_m , то с другой стороны должно быть

$$\xi_m \psi(\xi'') = \xi''_m \psi(\xi'') = \int \psi(\xi') d\xi' \xi''_m \delta(\xi' - \xi''), \quad (6)$$

где $\delta(\xi' - \xi'')$ обозначает для краткости

$$\delta(\xi'_1 - \xi''_1) \delta(\xi'_2 - \xi''_2) \dots \delta(\xi'_n - \xi''_n).$$

Приравнявая коэффициенты в правых частях уравнений (5) и (6), мы получаем

$$(\xi' | \xi_m | \xi'') = \xi''_m \delta(\xi' - \xi''). \quad (7)$$

Это выражение, разумеется, равно также и $\xi_m'' \delta(\xi' - \xi'')$ и следовательно симметрично по отношению к буквам с одним штрихом или с двумя штрихами.

Если ξ' принимают не непрерывный, а дискретный ряд значений, то вместо (7) получается формула

$$(\xi' | \xi_m | \xi'') = \xi_m \delta_{\xi' \xi''}$$

где $\delta_{\xi' \xi''}$ обозначает произведение $\delta_{\xi'_1 \xi''_1} \delta_{\xi'_2 \xi''_2} \dots \delta_{\xi'_n \xi''_n}$. Итак, наблюдаемая ξ_m представлена диагональной матрицей, диагональные элементы которой равны собственным значениям этой наблюдаемой. В случае матриц, строки и столбцы которых обозначены индексами, принимающими непрерывный ряд значений, удобно определить диагональной такую матрицу, у которой элемент (ξ', ξ'') содержит множителем функцию $\delta(\xi' - \xi'')$ (вроде правой части формулы 7); коэффициент при этой δ -функции может быть определен как диагональный элемент. Если пользоваться этой терминологией, то сделанное только что утверждение относительно представителя наблюдаемой ξ_m (напечатанное курсивом) остается верным и в дискретном и в непрерывном случае. Такое определение диагональной матрицы с непрерывными строчками и столбцами очень уместно, так как легко проверить, что две диагональные матрицы при этом всегда коммутируют, а это является одним из самых важных свойств дискретных диагональных матриц. Именно поэтому было бы неудобно в качестве определения непрерывной диагональной матрицы взять только то, что ее элемент (ξ', ξ'') равен нулю за исключением тех случаев, когда бесконечно мало отличается от ξ'' .

Если $f(\xi)$ есть некоторая функция наблюдаемых ξ то ее представитель, как можно доказать аналогично доказательству равенства (7), есть

$$(\xi' | f(\xi) | \xi'') = f(\xi') \delta(\xi' - \xi''). \quad (8)$$

Ясно, что коэффициент $f(\xi')$ должен иметь смысл, так как область определения функции f должна содержать все собственные числа наблюдаемых ξ . Итак мы видим, что представление, основными состояниями которого являются совместные собственные состояния некоторой системы наблюдаемых, отличается тем свойством, что представитель каждой из этих наблюдаемых и каждой функции этих наблюдаемых есть диагональная матрица. Обратно, всякая диагональная матрица является в этом представлении представителем некоторой функции наблюдаемых ξ ; эта функция определена зависимостью диагонального элемента (ξ', ξ') такой матрицы от переменных ξ' .

Итак, если дана система коммутирующих наблюдаемых, то существует представление, в котором все эти наблюдаемые представлены диагональными матрицами. Если такая система наблюдаемых есть полная система, то представление, удовлетворяющее этому условию, определяется ею однозначно, с тем лишь ограничением, что остаются неопределенными фазы представления: ведь каждый совместный собственный символ наших наблюдаемых может быть помножен на любое комплексное число, модуль которого равен единице, и все необходимые условия при этом остаются ненарушенными. Например, можно помножить каждый основной ψ -символ $\psi(\xi')$ на $e^{-if(\xi')}$, где $f(\xi')$ есть любая функция от ξ' , принимающая только вещественные значения. Представитель $(\xi' |)$ любого, ψ -символа помножится на $e^{if(\xi')}$ а представитель $(\xi' | \alpha | \xi'')$ любой наблюдаемой α помножится при этом на $e^{i[f(\xi') - f(\xi'')]}^1$. Диагональный элемент $(\xi' | \alpha | \xi'')$ остается при этом неизменным,

¹ Обозначая звездочкой новые основные ψ -символы представления и новые представители, мы будем иметь

$$\psi = \int \psi(\xi') d\xi' (\xi' |) = \int \psi^*(\xi') d\xi' (\xi' |)^*$$

а также

$$\alpha \psi = \int \int \psi(\xi') d\xi' (\xi' | \alpha | \xi'') d\xi'' (\xi'' |) = \int \int \psi^*(\xi') d\xi' (\xi' | \alpha | \xi'')^* d\xi'' (\xi'' |)^*$$

что и требуется, так как он ведь имеет физический смысл среднего значения наблюдаемой a в соответствующем основном состоянии. Произвольность фазы, которая получается при этом, большею частью не имеет никакого значения; поэтому мы можем считать, что представление однозначно определяется теми наблюдаемыми, которые оказываются в нем диагональными. Этот факт уже подразумевается в самом выборе нашей системы обозначений, так как специальный характер представления, к которому относится данный представитель, обозначен в нем лишь буквами, указывающими на то, какие наблюдаемые должны оказаться диагональными.

Рассмотренные в этом параграфе представления, основными состояниями которых являются совместные собственные состояния некоторой системы коммутирующих наблюдаемых, не являются каким-то очень частным случаем представлений, так как каждое ортогональное представление обладает этим же свойством. Действительно, если дано какое угодно представление, основными ψ -символами которого являются ψ_p, ψ_q, \dots , то можно составить диагональную матрицу, элемент ξ_{pq} которой равен $\alpha_p^{\delta(p-q)}$, где α_p — любая функция переменной p , принимающая вещественные значения, и затем рассматривать эту матрицу как представитель некоторой наблюдаемой ξ . Если представление ортогонально, то эта наблюдаемая вещественна. Мы имеем при этом

$$\xi \psi_q = \int \psi_p dp \xi_{pq} = \int \psi_p dp \alpha_p \delta(p-q) = \alpha_q \psi_q,$$

откуда следует, что каждое основное состояние ψ_q данного представления является собственным состоянием наблюдаемой ξ случае многих измерений, когда основной ψ -символ обозначается не одним значком p или q , а многими, нужно взять такое же количество диагональных матриц, и каждая из них представит некоторую наблюдаемую ξ , по отношению к которой все основные состояния представления будут собственными состояниями. Таким образом можно получить достаточное количество наблюдаемых ξ удовлетворяющих этому условию и образующих полную систему. При этом оказываются применимыми все методы и обозначения, выработанные в этом параграфе.

§ 27. КАНОНИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ.

Если взять два представления, из которых у одного основными ψ -символами являются совместные собственные ψ -символы $\psi(\xi')$ некоторой системы коммутирующих наблюдаемых ξ'_m , а у другого - совместные собственные ψ -символы $\psi(\eta')$ системы коммутирующих наблюдаемых η'_m , то ψ -символ ψ будет иметь представителей $(\xi' |)$ и $(\eta' |)$ которые являются функциями переменных ξ'_m и η'_m .

Если например $\psi^*(\xi') = e^{-i f(\xi')} \psi(\xi')$,

то должно быть $(\xi' |)^* = e^{i f(\xi')} (\xi' |)$

и

$$(\xi' | \alpha | \xi'')^* = e^{i [f(\xi') - f(\xi'')] } (\xi' | \alpha | \xi'').$$

как и утверждается в тексте.

(Примечание переводчика.)

Так как ψ однозначно определяется своим представителем в одном представлении, то между обоими представителями должна быть связь такого рода, что один из них вполне определяется другим. Рассмотрим, что это за связь.

Из определения представителя $(\eta' |)$ следует (если мы для определенности ограничимся случаем интегралов), что

$$\psi = \int \psi(\eta') d\eta'(\eta'). \quad (9)$$

Каждый основной ψ -символ η -представления, т. е. $\psi(\eta')$, имеет своего представителя в ξ -представлении. Этот представитель мы можем обозначить $(\xi' | \eta')$, где η' справа от черты

характеризует тот ψ -символ, представителем которого является $(\xi' | \eta')$. Определением представителя $(\xi' | \eta')$ будет равенство

$$\psi(\eta') = \int \psi(\xi') d\xi'(\xi' | \eta'). \quad (10)$$

Подставляя это выражение $\psi(\eta')$ в правую часть равенства (9), мы получим

$$\psi = \int \int \psi(\xi') d\xi'(\xi' | \eta') d\eta'(\eta' | \xi'),$$

что дает, при сравнении с уравнением (1), определяющим $(\xi' | \eta')$,

$$(\xi' | \eta') = \int (\xi' | \eta') d\eta'(\eta' | \xi'). \quad (11)$$

Это и есть уравнение преобразования, которое выражает ξ' -представитель символа ψ через его η' -представитель. Таким же способом доказывается, что соответствующим уравнением, выражающим $(\eta' | \xi')$ через $(\xi' | \eta')$, будет

$$(\eta' | \xi') = \int (\eta' | \xi') d\xi'(\xi' | \eta'), \quad (12)$$

где $(\eta' | \xi')$ есть представитель основного ψ -символа $\psi(\xi')$ в η' -представлении.

Таким образом оказывается, что оба представителя $(\xi' | \eta')$ и $(\eta' | \xi')$ являются линейными функциями друг друга. Мы будем называть выражения $(\xi' | \eta')$ и $(\eta' | \xi')$ позволяющие переходить от одного представителя к другому, функциями преобразования. Оба эти выражения являются функциями обеих систем переменных ξ' и η' . Явное выражение $(\xi' | \eta')$ можно получить, помножив уравнение (10) слева на символ $\varphi(\xi'')$ [эта процедура аналогична той, посредством которой было выведено уравнение (40) в предыдущей главе]. Мы получаем¹

$$(\xi' | \eta') = \varphi(\xi'') \psi(\eta'). \quad (13)$$

Таким же образом можно показать, что

$$(\eta' | \xi') = \varphi(\eta') \psi(\xi'). \quad (14)$$

Поэтому $(\xi' | \eta')$ и $(\eta' | \xi')$ являются комплексно-сопряженными величинами.

Для того, чтобы уравнения (11) и (12) не противоречили друг другу, функции преобразования должны удовлетворять некоторым условиям. Если подставить в уравнение (11) вместо $(\eta' | \xi')$ его значение из формулы (12), то получится

$$(\xi' | \eta') = \int \int (\xi' | \eta') d\eta'(\eta' | \xi'') d\xi''(\xi'' | \xi').$$

Кроме того должно ведь соблюдаться равенство

$$(\xi' | \eta') = \int \delta(\xi' - \xi'') d\xi''(\xi'' | \xi').$$

Так как эти равенства справедливы для любой функции $(\xi' | \eta')$ переменной ξ'' , то можно приравнять друг другу коэффициенты при $(\xi'' | \xi')$ в правых частях. Это дает

$$\int (\xi' | \eta') d\eta'(\eta' | \xi'') = \delta(\xi' - \xi''). \quad (15)$$

Другой способ получить тот же результат заключается в применении уравнения (11) к ψ -символу $\psi(\xi'')$. Так как η' -представитель этого ψ -символа есть $(\eta' | \xi'')$, то правая часть равенства (11) принимает вид $\int (\xi' | \eta') d\eta'(\eta' | \xi'')$, а так как левая часть, т. е. ξ' представитель символа $\psi(\xi'')$ очевидно равна $\delta(\xi' - \xi'')$, то мы и получаем (15). Таким же образом можно получить уравнение

¹ Нужно применить нормирующее условие $\varphi(\xi'') \psi(\xi') = \delta(\xi' - \xi'')$ и после интегрирования перейти от ξ'' вновь к ξ' . Примечание переводчика.

$$\int (\eta' | \xi') d\xi' (\xi' | \eta'') = \delta(\eta' - \eta''), \quad (16)$$

которое отличается от (15) только тем, что ξ и η поменялись местами. Уравнения (15) и (16) являются единственными условиями, которым функции преобразования должны удовлетворять тождественно. Они имеют характер условий нормировки и ортогональности.¹

Таким же образом можно трактовать и представителей φ -символов. При этом получится, например, уравнение

$$(\eta' | \xi') = \int (\xi' | \eta'') d\xi' (\xi' | \eta')$$

в качестве уравнения преобразования, определяющего представитель $(\eta' | \xi')$ какого угодно φ -символа через представитель $(\xi' | \eta')$ того же φ -символа; при этом $(\xi' | \eta')$ обозначает η' -представителя основного φ -символа $\varphi(\xi')$, т. е. определяется уравнением

$$\varphi(\xi') = \int (\xi' | \eta') d\eta' \varphi(\eta').$$

Помножая это уравнение справа на $\psi(\eta'')$, мы получим в качестве явного выражения для $(\xi' | \eta')$

$$\varphi(\xi') \psi(\eta'') = (\xi' | \eta''),$$

т. е. точь в точь уравнение (13). Отсюда следует, что величина $(\xi' | \eta')$, определенная в качестве η' -представителя φ -символа $\varphi(\xi')$, совпадает с прежней величиной $(\xi' | \eta')$, определенной в качестве ξ' -представителя ψ -символа $\psi(\eta')$; поэтому мы и имели право обозначить их обеих одинаково. На эту именно симметрию величины $(\xi' | \eta')$ по отношению к ξ' и η' мы и ссылались в предыдущем параграфе, вводя новое обозначение для представителей состояния: ведь представитель $(\xi' | k)$ данного ψ -символа ψ_k будучи надлежащим образом нормирован, может рассматриваться как функция преобразования, связывающая ξ' -представление с тем представлением, в котором ψ_k является одним из основных состояний.

Так как с каждым представлением связан известный произвол в выборе фазы, то соответствующий произвол обнаруживается и в функциях преобразования. Если помножить основные состояния $\psi(\xi')$ и $\psi(\eta')$ соответственно на $e^{-if(\xi')}$ и на $e^{-ig(\eta')}$ где f и g - какие угодно вещественные функции, то функция преобразования $(\xi' | \eta')$ помножится на $e^{-[if(\xi') + ig(\eta')]}$. Отсюда видно, что модуль функции преобразования определен однозначно и что неопределенной оказывается лишь ее фаза.

Легко получить самыми разнообразными способами соотношение между представителями наблюдаемой α в двух разных представлениях. Например можно воспользоваться формулой (41) предыдущей главы, дающей явное выражение представителя наблюдаемой α . Применяя эту формулу к ξ' -представлению, мы получаем

$$(\xi' | \alpha | \xi'') = \varphi(\xi') \alpha \psi(\xi'').$$

Если в правую часть этого равенства, состоящую из произведения трех абстрактных символов, подставить их представителей в η' -представлении, то получится

$$(\xi' | \alpha | \xi'') = \int \int (\xi' | \eta') d\eta' (\eta' | \alpha | \eta'') d\eta'' (\eta'' | \xi''), \quad (17)$$

т. е. требуемая зависимость ξ' -представителя от η' -представителя.

¹ Условия (15) и (16) не независимы друг от друга. Помножая обе части уравнения (15) $d\xi''(\xi'' | \eta'')$ и интегрируя, мы получим $\iint (\xi' | \eta') d\eta' (\eta' | \xi'') d\xi'' (\xi'' | \eta'') = (\xi' | \eta'')$, а так как в то же время $\int (\xi' | \eta') d\eta' \delta(\eta' - \eta'') = (\xi' | \eta'')$, то $\delta(\eta' - \eta'') = \int (\eta' | \xi'') d\xi'' (\xi'' | \eta'')$ [ведь зависимость $(\xi' | \eta')$ от η' может быть какой угодно]. Таким же образом можно показать, что (15) вытекает из (16).

Таким же образом получается и равенство

$$(\eta' | \alpha | \eta'') = \int \int (\eta' | \xi') d\xi' (\xi' | \alpha | \xi'') d\xi'' (\xi'' | \eta''), \quad (18)$$

выражающее зависимость η -представителя от ξ -представителя.

Это и есть нужные нам уравнения преобразования представителей наблюдаемой величины. Каждый представитель оказывается линейной функцией другого представителя, причем для перехода от одного к другому нужны те же самые функции преобразования, как и в случае представителей состояний.

Если взять третье представление, например ζ , то функции преобразования $(\zeta' | \xi')$ и $(\xi' | \zeta')$ будут связывать его с ξ -представлением, а функции преобразования $(\zeta' | \eta')$ и $(\eta' | \zeta')$ с η -представлением. Между этими функциями преобразования существуют простые зависимости. Если в уравнение (13) подставить ζ вместо η , то мы получим

$$(\xi' | \zeta') = \varphi(\xi') \psi(\zeta').$$

Подставляя в правую часть, состоящую из произведения двух абстрактных символов, представителей этих символов в η -представлении, мы находим

$$(\xi' | \zeta') = \int (\xi' | \eta') d\eta' (\eta' | \zeta'). \quad (19)$$

Комплексно-сопряженное равенство, которое можно было бы тем же способом вывести и самостоятельно, гласит:

$$(\zeta' | \xi') = \int (\zeta' | \eta') d\eta' (\eta' | \xi'). \quad (20)$$

Формулы (19) и (20) выражают функции преобразования $(\xi | \zeta)$ через функции преобразования $(\xi | \eta)$ и $(\eta | \xi)$.

Помножим равенство (17) на $d\xi''(\xi'' | \eta''')$, поместив этот множитель справа для того, чтобы сохранить обычный в наших обозначениях порядок. Интегрируя по ξ'' , мы получим с помощью формулы (16)

$$\begin{aligned} & \int (\xi' | \alpha | \xi'') d\xi'' (\xi'' | \eta''') = \\ & = \int \int \int (\xi' | \eta') d\eta' (\eta' | \alpha | \eta'') d\eta'' (\eta'' | \xi'') d\xi'' (\xi'' | \eta''') = \\ & = \int \int (\xi' | \eta') d\eta' (\eta' | \alpha | \eta'') d\eta'' \delta(\eta'' - \eta'''). \end{aligned}$$

Поэтому

$$\int (\xi' | \alpha | \xi'') d\xi'' (\xi'' | \eta''') = \int (\xi' | \eta') d\eta' (\eta' | \alpha | \eta''').$$

Мы обозначим и правую и левую часть этого равенства через $(\xi' | \alpha | \eta''')$ и будем называть это выражение представителем наблюдаемой α в смешанном представлении (ξ, η) . В самом деле, ведь матрица $(\xi' | \alpha | \eta')$ определяет наблюдаемую однозначно; от матриц, которые до сих пор служили представителями α , она отличается только тем, что ее строки и столбцы относятся к двум различным системам основных состояний и поэтому больше не находятся в одно-однозначном соответствии друг с другом. Представители двух наблюдаемых α и β в одном и том же смешанном представлении могут складываться, т. е. удовлетворяют равенству

$$(\xi' | \alpha + \beta | \eta') = (\xi' | \alpha | \eta') + (\xi' | \beta | \eta').$$

Они могут также и умножаться друг на друга, если они относятся к различным смешанным представлениям и при этом столбцы первого множителя, обозначенные буквами справа, относятся к той же системе основных состояний, что и строки второго, с которыми они следовательно находятся в одно-однозначном соответствии; иными словами, можно умножать $(\xi' | \alpha | \eta')$ на $(\eta' | \beta | \zeta')$, и произведение будет:

$$(\xi' | \alpha\beta | \zeta') = \int (\xi' | \alpha | \eta') d\eta' (\eta' | \beta | \zeta'). \quad 1$$

¹Доказательство этого равенства таково: по определению

$$(\xi' | \alpha\beta | \zeta') = \int (\xi' | \alpha\beta | \xi'') d\xi'' (\xi'' | \zeta').$$

Заметим, что представителем единицы в смешанном представлении (ξ, η) является сама функция преобразования $(\xi' | \eta')$, так как из определения (21) следует, что $(\xi' | 1 | \eta') = (\xi' | \eta')$. Понятия, «диагональная матрица» и «диагональный элемент», разумеется, теряют смысл в применении к представителям в смешанных представлениях. Далее, представители самих ξ и η в смешанном представлении (ξ, η) имеют вид

$$\left. \begin{aligned} (\xi' | \xi_m | \eta') &= \xi_m' (\xi' | \eta') \\ (\xi' | \eta_m | \eta') &= (\xi' | \eta') \eta_m \end{aligned} \right\}, \quad (22)$$

что легко проверить, пользуясь сперва левой, а потом и правой частью равенства (21). Представители наблюдаемых ξ_m и η_m таким образом непосредственно выражаются через функцию преобразования.

Все равенства этого параграфа были написаны для того случая, когда параметры ξ', η', \dots , характеризующие основные состояния, принимают непрерывный ряд значений. Необходимые видоизменения, которые нужно сделать в том случае, когда все эти параметры или некоторые из них принимают дискретный ряд значений или же и непрерывный и дискретный ряд, совершенно очевидны.

Если в ξ -представлении параметры ξ' принимают, например, непрерывный ряд значений, то нет никакой необходимости в том, чтобы в другом представлении, относящемся к той же механической системе, соответствующие параметры также принимали непрерывный ряд значений, хотя, впрочем, если в одном представлении число основных состояний конечно, оно должно быть таким же и во всех других представлениях.

Рассмотренные в этом параграфе преобразования от одного представления к другому могут быть названы каноническими преобразованиями. Следует остерегаться смешивать их с рассмотренными в § 19 касательными преобразованиями (эта ошибка часто встречается в сочинениях, относящихся к начальному периоду существования квантовой механики). Если символически написать канонические преобразования (17) и (18), заменив в них функции преобразования $(\xi' | \eta')$ и $(\eta' | \xi')$ на S и S^{-1} , то обнаруживается, что оба вида преобразований имеют одинаковую математическую форму, но зато смысл их совершенно различен. Каноническое преобразование есть переход от одного представления наблюдаемых величин к другому представлению тех же самых наблюдаемых, между тем как касательное преобразование есть переход от одних наблюдаемых к другим. В случае касательного преобразования новые наблюдаемые связаны друг с другом теми же самыми алгебраическими и функциональными соотношениями, что и старые наблюдаемые; соответствующий результат в случае канонического преобразования указывает только на то, что новые представители

Но

$$(\xi' | \alpha \beta | \xi'') = \int (\xi' | \alpha | \xi''') d\xi''' (\xi''' | \beta | \xi'').$$

Из формулы

$$(\xi' | \alpha | \eta') = \int (\xi' | \alpha | \xi^{IV}) d\xi^{IV} (\xi^{IV} | \eta')$$

посредством помножения на

$$d\eta' (\eta' | \xi''')$$

и интегрирования вытекает

$$(\xi' | \alpha | \xi''') = \int (\xi' | \alpha | \eta') d\eta' (\eta' | \xi''').$$

Таким же образом

$$(\xi''' | \beta | \xi'') = \int (\xi''' | \beta | \zeta'') d\zeta'' (\zeta'' | \xi'').$$

Поэтому

$$\begin{aligned} (\xi' | \alpha \beta | \xi'') &= \\ \int \int (\xi' | \alpha | \eta') d\eta' (\eta' | \xi''') d\xi''' (\xi''' | \beta | \zeta'') d\zeta'' (\zeta'' | \xi'') &= \\ = \int \int (\xi' | \alpha | \eta') d\eta' (\eta' | \beta | \zeta'') d\zeta'' (\zeta'' | \xi'') & \end{aligned}$$

Следовательно

$$\begin{aligned} (\xi' | \alpha \beta | \zeta') &= \int \int (\xi' | \alpha | \eta') d\eta' (\eta' | \beta | \zeta'') d\zeta'' (\zeta'' | \xi'') d\xi'' (\xi'' | \zeta') = \\ = \int \int (\xi' | \alpha | \eta') d\eta' (\eta' | \beta | \zeta'') d\zeta'' \delta(\zeta'' - \zeta') &= \int (\xi' | \alpha | \eta') d\eta' (\eta' | \beta | \zeta'), \end{aligned}$$

что и требовалось.

Примечание переводчика.

действительно имеют право называться представителями тех же самых наблюдаемых. Касательные преобразования, как уже упоминалось выше, аналогичны касательным преобразованиям классической механики, но, разумеется, в классической механике нет никакого аналога каноническим преобразованиям, которые играют в квантовой механике более важную роль, чем касательные; это понятно, так как в классической теории нам не приходится иметь никакого дела с представлениями.

§ 28. АМПЛИТУДЫ ВЕРОЯТНОСТИ.

Предположим, что производятся измерения всех коммутирующих друг с другом наблюдаемых ξ_m , когда механическая система находится в состоянии ψ . Согласно § 18 вероятность получить данную систему результатов равна квадрату модуля соответствующего коэффициента в разложении ψ по нормированным совместным собственным ψ -символам наблюдаемых ξ_m (если ψ также нормировано). Если наблюдаемые ξ_m образуют полную систему, то каждой системе собственных значений ξ_m' соответствует только одно совместное собственное состояние; при этом коэффициенты разложения ψ образуют представитель этого ψ -символа, обозначаемый через $(\xi' | \psi)$. Вероятность получить систему результатов ξ_m' становится равной $|(\xi' | \psi)|^2$. Поэтому ξ -представитель всякого нормированного ψ или, по крайней мере, модуль этого представителя имеет физический смысл, так как он может быть выражен через вероятность получить данный результат максимального наблюдения, состоящего в измерении полной системы наблюдаемых ξ_m . Таким же самым физическим смыслом обладает конечно и представитель всякого нормированного φ так как эти представители двух мнимо-сопряженных φ и ψ - комплексно сопряжены друг с другом.

Рассмотрим теперь тот случай, когда ψ есть один из основных ψ -символов другого представления, например η -представления; пусть ψ будет $\psi(\eta')$. Вероятность получить результаты ξ' становится при этом равной $|(\xi' | \eta')|^2$, т. е. квадрату абсолютной величины функции преобразования. Но состояние $\psi(\eta')$ есть такое состояние, в котором наблюдаемые η наверно имеют значения η' . Поэтому $|(\xi' | \eta')|^2$ равно вероятности того, что наблюдаемые ξ имеют значения ξ' когда известно, что η имеют значения η' . По этой причине П. Иордан назвал выражение $(\xi' | \eta')$ амплитудой вероятности. Как мы видели в предыдущем параграфе, существует произвол в выборе фазы величины $(\xi' | \eta')$, но ее модуль имеет определенное значение. Квадрат этого модуля равен обычной вероятности. Так как

$$|(\xi' | \eta')|^2 = (\xi' | \eta') (\eta' | \xi') = |(\eta' | \xi')|^2,$$

то мы получаем теорему, гласящую, что вероятность значений ξ' наблюдаемых ξ при заданных значениях η' наблюдаемых η равна вероятности значений η' наблюдаемых η при заданных значениях ξ' наблюдаемых ξ .

Если параметры ξ' принимают непрерывный ряд значений, то, как было упомянуто в § 23, основные ψ -символы этого представления должны быть помножены на бесконечно малые числовые множители для того, чтобы их можно было нормировать для удобства физического истолкования результатов. Кроме того данная в § 18 теорема о связи между вероятностями и коэффициентами разложения, которой мы только что воспользовались, перестает быть верной, когда разложение оказывается не рядом, а интегралом. Поэтому полученное нами выражение вероятности того, что в данном состоянии наблюдаемые ξ примут те или иные значения, в непрерывном случае перестает иметь место. Но в непрерывном случае нам на практике нужно знать лишь вероятность того, что наблюдаемые ξ получают значения, лежащие между теми или иными пределами. Вероятность того, что они получают совершенно определенные значения, равна нулю, что можно формально доказать на основании теории. Теперь мы хотим получить зависимость, позволяющую по представителю ψ вычислить

вероятность того, что наблюдаемые ξ в состоянии ψ получают значения, лежащие в данных тесных пределах, если основные, ψ -символы рассматриваемого представления нормированы в согласии с уравнениями (37) и (39) § 23. Мы применим способ, состоящий в том, что случай непрерывных параметров ξ' рассматривается как предельный случай дискретных ξ' , лежащих очень близко друг ко другу.

Рассмотрим для определенности тот случай, когда имеется всего лишь одна наблюдаемая ξ , и предположим, что у нее есть очень много дискретных собственных значений ξ' , лежащих очень близко друг ко другу. Пусть между ξ' и $\xi'+d\xi'$ имеется $s d \xi'$ таких собственных значений, где s как угодно меняется с изменением ξ' . Предположим теперь, что любой нормированный ψ разложен по ψ_{ξ} , т. е. по собственным ψ -символам наблюдаемой ξ , правильно нормированным для удобства физического истолкования, т. е. удовлетворяющим условию

$$\varphi_{\xi} \psi_{\xi'} = 1. \quad (23)$$

Имеем

$$\psi = \sum_{\xi'} c_{\xi'} \psi_{\xi'}. \quad (24)$$

Вероятность того, что в состоянии ψ наблюдаемая ξ примет значение ξ' , равна $|c_{\xi'}|^2$. Допустим, что $c_{\xi'}$ достаточно медленно меняется с изменением ξ' ; поэтому вероятность того, что ξ примет значение, лежащее в промежутке от ξ' до $\xi'+d\xi'$, который мал, но все же достаточно велик по сравнению с расстоянием между двумя соседними собственными значениями ξ' , приблизительно равна

$$P = |c_{\xi'}|^2 s' d\xi',$$

где s' есть значение, принимаемое функцией s в точке ξ' . В порядке того же приближения мы можем заменить сумму в формуле (24) интегралом, что даст нам формулу

$$\psi = \int c_{\xi'} \psi_{\xi'} s' d\xi'. \quad (25)$$

Теперь нужно ввести собственные ψ -символы $\psi(\xi')$ нормированные в согласии с правилом, действительным для непрерывного случая, т. е.

$$\int \varphi(\xi') \psi(\xi'') d\xi'' = 1. \quad (26)$$

Изменение представителей, вызванное этой переменной нормировки основных ψ -символов, должно иметь такой же характер, как рассмотренное в § 24 изменение, вызванное переменной весовой функции, но только в данном случае это изменение должно в пределе быть бесконечно большим.

Для сравнения формул (26) и (23) выведем из (23) равенство

$$\sum_{\xi''} \varphi_{\xi'} \psi_{\xi''} = 1,$$

которое, будучи переписано с заменой суммы интегралом, дает

$$\int \varphi_{\xi'} \psi_{\xi''} s'' d\xi'' = 1.$$

Так как под интегральная функция отлична от нуля только при $\xi'' = \xi'$ то вместо s'' можно писать $(s's'')^{\frac{1}{2}}$. Поэтому мы можем положить

$$\varphi(\xi') = s'^{\frac{1}{2}} \varphi_{\xi'}, \quad \psi(\xi'') = s''^{\frac{1}{2}} \psi_{\xi''},$$

и уравнение (26) будет удовлетворено. Из формулы (25) следует

$$\psi = \int c_{\xi'} \psi(\xi') s'^{\frac{1}{2}} d\xi' = \int \psi(\xi') d\xi'(\xi'),$$

где $(\xi' |)$, т. е. представитель ψ , построенный по обычному для непрерывного случая правилу, имеет значение

$$(\xi' |) = c_{\xi'} s'^{\frac{1}{2}}.$$

Вероятность P при этом становится равной $|\langle \xi' | \rangle|^2 d\xi'$. Итак квадрат модуля представителя равен вероятности того, что значение ξ лежит в данном малом промежутке, деленной на длину этого промежутка. Таким же образом можно показать, что в случае нескольких наблюдаемых ξ вероятность того, что значение ξ_1 лежит между ξ_1' и $\xi_1' + d\xi_1'$, значение ξ_2 между $\xi_2' + \xi_2' + d\xi_2'$, и т. д., равна

$$P = |\langle \xi' | \rangle|^2 d\xi_1' d\xi_2' \dots d\xi_n' = |\langle \xi' | \rangle|^2 d\xi'. \quad (27)$$

Предположим теперь (в случае непрерывных ξ'), что ψ принадлежит к числу основных ψ - символов $\psi(\eta')$ некоторого η -представления, причем значения η' дискретны. Нормирующие условия (15) и (16) принимают вид

$$\sum_{\eta''} \langle \xi' | \eta' \rangle \langle \eta' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi''), \quad (28)$$

$$\int \langle \eta' | \xi \rangle d\xi \langle \xi | \eta'' \rangle = \delta_{\eta' \eta''}. \quad (29)$$

Это и есть правильные нормирующие условия, позволяющие нам применить результат (27). Ведь первое из них дает

$$\varphi(\xi') \psi(\xi'') = \delta(\xi' - \xi'') \quad (30)$$

[уравнение (28) совпадает с уравнением (30), с той лишь разницей, что оно написано не в абстрактных символах, как (30), а в η -представителях]; это показывает, что основные ψ -символы ξ -представления нормированы в согласии с (26). Второе из нормирующих условий, т. е. (29), дает

$$\varphi(\eta') \psi(\eta'') = \delta_{\eta' \eta''} \quad (31)$$

[уравнение (29) совпадает с уравнением (31), с той лишь разницей, что оно написано не в абстрактных символах, а в ξ -представителях], и это показывает, что $\varphi(\eta')\psi(\eta'')=1$ т. е. что $\psi(\eta')$ правильно нормировано для целей физического истолкования. Поэтому окончательно получается, что

$$|\langle \xi' | \eta' \rangle|^2 d\xi' \quad (32)$$

есть вероятность того, что ξ принимают значения в промежутке от ξ' до $\xi' + d\xi''$ при заданных значениях η' наблюдаемых η . Функция преобразования попрежнему является чем-то вроде амплитуды вероятности.¹ Из (29) вытекает

$$\int |\langle \xi' | \eta' \rangle|^2 d\xi' = 1.$$

Это показывает, что полная вероятность какого-либо значения V равна единице, что и следовало ожидать заранее.

Если и η' и ξ' принимают непрерывный ряд значений, то с помощью функции преобразования нельзя получить удобного выражения вероятности. Но функция преобразования в этом случае может быть применена к вычислению относительных вероятностей. Даже если $(\xi' | \eta')$ не нормировано по отношению к η' надлежащим для физического истолкования образом, выражение (32) попрежнему даст вероятность того, что значения наблюдаемых ξ лежат между ξ' и $\xi' + d\xi'$, помноженную на множитель, не зависящий от ξ' . Мы увидим, что в приложениях квантовой механики только такие относительные вероятности и нужны.

В квантовой механике встречаются главным образом два типа задач: определение возможных результатов опыта и определение вероятности того, что при заданных начальных условиях получится какой-то один определенный из этих результатов. Первый тип задач сводится к вычислению собственных значений наблюдаемых величин, а второй—к

¹ Она является, собственно говоря, «амплитудой плотности вероятности», так как $|\langle \xi' | \eta' \rangle|^2$ есть не вероятность а «плотность вероятности».

вычислению функции преобразования или амплитуды вероятности, модуль которой должен быть затем возведен в квадрат. Общий способ вычисления функции преобразования, связывающей наблюдаемые ξ с наблюдаемыми η , при заданных алгебраических соотношениях между ξ и η таков: сперва получаем матрицы $(\xi' | \eta_m | \xi'')$, которые служат представителями наблюдаемых η в ξ -представлении, причем единственными условиями, которым должны удовлетворять эти матрицы, являются упомянутые алгебраические соотношения. После этого можно воспользоваться равенствами

$$\int (\xi' | \eta_m | \xi'') d\xi'' (\xi'' | \eta') = (\xi' | \eta') \eta'_m,$$

вытекающими сразу из (21) и (22). Эти равенства являются линейными интегральными уравнениями, содержащими неизвестные функции $(\xi' | \eta')$ переменных ξ' . Это и есть типичные уравнения теории собственных значений; их решения, будучи нормированы, оказываются функциями преобразования. Эти решения называются собственными функциями определяющей их матрицы $(\xi' | \eta_m | \xi'')$. В § 35 будет дано применение этого метода к тому случаю, когда интегральные уравнения приводятся к дифференциальным благодаря тому, что $(\xi' | \eta_m | \xi'')$ содержит δ -функцию и ее производные.

§ 29. ПРИМЕР I.

В § 26 мы видели, что для любой системы коммутирующих друг с другом наблюдаемых ξ_m существует представление, так называемое ξ -представление, в котором каждая из этих наблюдаемых представлена диагональной матрицей; диагональные элементы такой матрицы равны собственным значениям соответствующей наблюдаемой. Это обстоятельство имеет чрезвычайно большое значение применений квантовой механики; обыкновенно оно служит исходным пунктом вычисления представителей. Для того чтобы показать, как оно применяется, приведем два простых примера, которые потом окажутся важными и с физической точки зрения.

Первый пример будет относиться к введенным в § 12 наблюдаемым p и q , которые удовлетворяют соотношению

$$qp - pq = i.$$

Задача заключается в нахождении собственных значений наблюдаемой $p^2 + q^2$. Допустим, что p и q являются вещественными наблюдаемыми. Легко заключить из самых элементарных соображений, что $p^2 + q^2$ не имеет отрицательных собственных значений. Ведь собственные значения наблюдаемой p^2 не могут быть отрицательными, так как они равны квадратам собственных значений наблюдаемой p , которые все вещественны. Отсюда следует, что среднее значение наблюдаемой p^2 в любом состоянии ψ не может быть отрицательным. Таким же образом и среднее значение q^2 в этом состоянии ψ не может быть отрицательным. Поэтому среднее значение $p^2 + q^2$ в состоянии ψ также не может быть отрицательным. Следовательно наблюдаемая $p^2 + q^2$ не имеет отрицательных собственных значений, так как если бы она имела хотя бы одно отрицательное собственное значение, то в соответствующем собственном состоянии ее среднее значение было бы равно этому собственному значению, т. е. отрицательно.

Положим

$$A = (p + iq)(p - iq) = p^2 + q^2 + i(qp - pq) = p^2 + q^2 - 1.$$

При этом будет

$$(p - iq)(p + iq) = p^2 + q^2 + 1 = A + 2,$$

откуда

$$A(p + iq) = (p + iq)(p - iq)(p + iq) = (p + iq)(A + 2).$$

Перепишем это уравнение в представителях тех абстрактных символов, которые в него входят, для чего возьмем представление, в котором A диагонально. Это дает

$$\sum_{A''} (A' | A | A'') (A'' | p + iq | A'') = \sum_{A''} (A' | p + iq | A'') (A'' | A + 2 | A'');$$

но так как

$$(A' | A | A'') = A' \delta_{A', A''},$$

то мы получаем

$$A' (A' | p + iq | A'') = (A' | p + iq | A'') (A'' + 2).$$

Поэтому должно быть или $(A' | p + iq | A'') = 0$, или $A' = A'' + 2$.

Непосредственно применяя закон умножения матриц, мы найдем

$$(A' | (p + iq) (p - iq) | A') = \sum_{A''} (A' | p + iq | A'') (A'' | p - iq | A'), \quad (33)$$

где A' - какое угодно собственное значение наблюдаемой A и где суммирование производится по всем собственным значениям A'' . Но мы видели, что $(A' | p + iq | A'')$ равно нулю, за исключением, быть может, лишь тех случаев, когда $A'' = A' - 2$. Поэтому все члены суммы (33) исчезают за исключением одного, у которого $A'' = A' - 2$. Если $A' - 2$ не есть собственное значение наблюдаемой A , то в сумме (33) должны исчезнуть все члены без исключения, причем получится

$$0 = (A' | (p + iq) (p - iq) | A') = (A' | A | A') = A'.$$

Поэтому, если A' есть собственное значение наблюдаемой A , то должно быть одно из двух: или $A' - 2$ тоже должно быть собственным значением, или $A' = 0$. Итак, если A' есть собственное значение, то мы должны иметь целый ряд собственных значений A' , $A' - 2$, $A' - 4$, $A' - 6$..., который однако не может простираться до бесконечности, так как наблюдаемая $p^2 + q^2$, или, что то же самое, $A + 1$, не имеет, как мы видели, отрицательных собственных значений. Ряд собственных значений поэтому должен оканчиваться; окончиться же он может только значением нуль. Итак, собственные значения наблюдаемой A суть 0, 2, 4, 6..., а наблюдаемой $p^2 + q^2$, следовательно, 1, 3, 5, 7...

Легко построить теперь представителей p и q . Уравнение (33) приводится к виду

$$A' = (A' | p + iq | A' - 2) (A' - 2 | p - iq | A').$$

Оба множителя в правой части этого равенства комплексно сопряжены друг с другом, что вытекает из (4). Поэтому

$$(A' | p + iq | A' - 2) = A'^{\frac{1}{2}} e^{i\gamma},$$

где γ есть вещественная функция переменной A' . Все элементы другого типа в матрице $p + iq$ равны нулю. Таким же образом для комплексно-сопряженной наблюдаемой $p - iq$ получаем

$$(A' - 2 | p - iq | A') = A'^{\frac{1}{2}} e^{-i\gamma},$$

и все элементы другого типа попрежнему равны нулю. Поэтому

$$\left. \begin{aligned} (A' | p | A' - 2) &= \frac{1}{2} A'^{\frac{1}{2}} e^{i\gamma}, & (A' | q | A' - 2) &= -\frac{1}{2} i A'^{\frac{1}{2}} e^{i\gamma}, \\ (A' - 2 | p | A') &= \frac{1}{2} A'^{\frac{1}{2}} e^{-i\gamma}, & (A' - 2 | q | A') &= \frac{1}{2} i A'^{\frac{1}{2}} e^{-i\gamma}. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

Все прочие элементы матриц, которые служат представителями p и q , равны нулю. Наличие произвольной фазы γ в этих представителях находится в согласии с замечанием § 26, по которому представление не определяется однозначно тем, какие наблюдаемые представлены в нем диагональными матрицами.

Собственные значения наблюдаемой A , как мы видели, дискретны; поэтому в том представлении, в котором A диагонально, основные состояния образуют исчислимое множество. Этот факт довольно любопытен, особенно если мы вспомним, что существуют и представления, в которых множество основных состояний равно множеству точек прямой; таково например представление, в котором p диагонально, так как собственными значениями p являются, как мы видели в § 19, все числа от $-\infty$ до $+\infty$. Поэтому, различным образом считая число независимых состояний системы, мы можем получить в ответ различные кардинальные числа.¹

§ 30. ПРИМЕР II.

¹ Т.е. мощность множества независимых состояний может оказываться различной.

В качестве второго примера рассмотрим три наблюдаемые α , β , γ , удовлетворяющие условиям

$$\left. \begin{aligned} \alpha\beta - \beta\alpha &= i\gamma \\ \beta\gamma - \gamma\beta &= i\alpha \\ \gamma\alpha - \alpha\gamma &= i\beta \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

Положим

$$\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = \theta.$$

Задача заключается в определении собственных значений наблюдаемых α , β , γ , θ . Допустим, что α , β , γ , вещественны. Тогда посредством рассуждения, не отличающегося от того, которое применялось в начале предыдущего примера, мы заключаем, что θ не имеет отрицательных собственных значений. Имеем

$$\gamma\alpha^2 - \alpha^2\gamma = (\gamma\alpha - \alpha\gamma)\alpha + \alpha(\gamma\alpha - \alpha\gamma) = i\beta\alpha + i\alpha\beta$$

[см. третье уравнение (35)]. Таким же образом

$$\gamma\beta^2 - \beta^2\gamma = (\gamma\beta - \beta\gamma)\beta + \beta(\gamma\beta - \beta\gamma) = -i\alpha\beta - i\beta\alpha.$$

Поэтому

$$\gamma(\alpha^2 + \beta^2) - (\alpha^2 + \beta^2)\gamma = 0,$$

откуда

$$\gamma\theta - \theta\gamma = 0:$$

Итак θ коммутирует с γ ; из соображений симметрии явствует, что θ коммутирует также и с α и β . Поэтому θ коммутирует также и с любой функцией от α , β , и γ .

Таким образом наблюдаемая θ коммутирует со всеми наблюдаемыми, которые могут встретиться в нашей задаче. Всякий раз, когда мы встречаем наблюдаемую, обладающую таким свойством, мы можем рассчитывать, что с нею в дальнейшем возможно поступать так, как если бы она была обыкновенным числом: ведь при этом не будет нарушено ни одно алгебраическое уравнение, которому она удовлетворяет. Формальное доказательство законности этого способа действий таково: рассмотрим представление, в котором θ диагонально (и вместе с ним некоторые другие наблюдаемые, назовем их k). Наблюдаемая P в таком представлении имеет представителя $(\theta'k' | P | \theta''k'')$ Из условия

$$\theta P - P\theta = 0$$

получается

$$\theta'(\theta'k' | P | \theta''k'') - (\theta'k' | P | \theta''k'')\theta'' = 0.$$

Поэтому

$$(\theta'k' | P | \theta''k'') = 0$$

за исключением тех случаев, когда $\theta' = \theta''$. Итак все элементы матриц, являющихся представителями наблюдаемых нашей задачи, равны нулю за исключением элементов типа $(\theta'k' | P | \theta''k'')$. Отсюда следует, что если написать в представителях какое угодно соотношение между этими наблюдаемыми, то все матричные элементы в уравнении будут относиться к одному и тому же значению θ' . Нет необходимости явно упоминать это θ' в обозначении матричных элементов: вместо $(\theta'k' | P | \theta''k'')$ можно писать просто $(k' | P | k'')$. Поэтому уравнения примут такой же вид, как если бы θ было числом равным θ' и представление определялось наблюдаемыми k без всякого участия θ .

Мы применим этот прием к рассматриваемому примеру. Вычислим собственные значения наблюдаемой γ считая θ определенным числом. Собственные значения α и β будут такими же самыми (по соображениям симметрии). Всякое численное значение, которое мы можем приписать θ будет его собственным значением, если только оно не противоречит уравнениям (35). Так как α и β вещественны, то среднее значение γ^2 в каком угодно состоянии не может быть больше, чем θ , а значит собственные значения γ^2 не превосходят

θ . Поэтому собственные значения γ не могут быть больше, чем $\theta^{\frac{1}{2}}$, и меньше, чем $-\theta^{\frac{1}{2}}$. В этом условии нет ничего абсурдного, так как всякое численное значение, которое мы можем приписать θ , должно быть положительным числом или нулем (ведь все собственные

значения θ , как мы видели, должны быть положительными или равными нулю). Из (35) следует

$$(\alpha + i\beta)\gamma - \gamma(\alpha + i\beta) = -i\beta - \alpha = -(\alpha + i\beta)$$

или

$$(\alpha + i\beta)\gamma = (\gamma - 1)(\alpha + i\beta).$$

Если этот результат выразить в γ -представлении, мы получим

$$(\gamma' | \alpha + i\beta | \gamma'') \gamma'' = (\gamma' - 1) (\gamma' | \alpha + i\beta | \gamma').$$

Поэтому должно быть одно из двух: или $(\gamma' | \alpha + i\beta | \gamma'') = 0$ или $\gamma'' = \gamma' - 1$. Но если γ' есть собственное значение наблюдаемой γ , то должно быть

$$(\gamma' | (\alpha + i\beta) (\alpha - i\beta) | \gamma') = \sum_{\gamma''} (\gamma' | \alpha + i\beta | \gamma'') (\gamma'' | \alpha - i\beta | \gamma'), \quad (36)$$

где суммирование производится по всем собственным значениям γ'' . Все члены суммы (36) исчезают, за исключением одного, у которого $\gamma'' = \gamma' - 1$. Если $\gamma' - 1$ не есть собственное значение наблюдаемой γ , то исчезают все члены суммы без исключения, и мы имеем

$$(\gamma' | (\alpha + i\beta) (\alpha - i\beta) | \gamma') = 0.$$

Но

$$\begin{aligned} (\alpha + i\beta) (\alpha - i\beta) &= \alpha^2 + \beta^2 - i(\alpha\beta - \beta\alpha) = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma = \theta - \gamma^2 + \gamma = \\ &= \theta + \frac{1}{4} - \left(\gamma - \frac{1}{2}\right)^2. \end{aligned}$$

Поэтому если $\gamma' - 1$ не есть собственное значение наблюдаемой γ то

$$0 = \left(\gamma' | \theta + \frac{1}{4} - \left(\gamma - \frac{1}{2}\right)^2 | \gamma'\right) = \theta + \frac{1}{4} - \left(\gamma' - \frac{1}{2}\right)^2,$$

откуда

$$\gamma' = \frac{1}{2} \pm k,$$

где k по определению, есть положительный квадратный корень из $\theta + \frac{1}{4}$

Итак, если γ' есть собственное значение, то мы должны иметь целый ряд собственных значений $\gamma', \gamma' - 1, \gamma' - 2, \dots$, который должен обрываться потому, что все собственные значения должны быть не меньше, чем $-\theta^{\frac{1}{2}}$. Последним членом ряда должен быть поэтому

или $\frac{1}{2} + k$ или $\frac{1}{2} - k$, а так как нет собственных значений, превосходящих $\theta^{\frac{1}{2}}$, а следовательно

нет и собственных значений, превосходящих k , то он должен быть равен $\frac{1}{2} - k$. Итак

собственными значениями γ являются $\frac{1}{2} - k, \frac{3}{2} - k, \frac{5}{2} - k, \dots$

Если переменить порядок множителей в произведении, представителем которого является левая часть равенства (36), то посредством такого же рассуждения можно показать, что если γ' есть собственное значение наблюдаемой γ , то должно быть одно из двух: или

$\gamma + 1$ тоже есть собственное значение, или $\gamma = -\frac{1}{2} + k$, откуда можно заключить, что

собственными значениями γ являются $k - \frac{1}{2}, k - \frac{3}{2}, k - \frac{5}{2}, \dots$ Соединяя этот результат с

предыдущим, мы видим, что $\frac{1}{2} - k$ и $k - \frac{1}{2}$ должны отличаться друг от друга на целое число,

откуда следует, что k должно быть целым числом или целым числом с половиной. Собственными значениями γ поэтому являются числа

$$k - \frac{1}{2}, k - \frac{3}{2}, k - \frac{5}{2}, \dots, -k + \frac{3}{2}, -k + \frac{1}{2}, \quad (38)$$

откуда между прочим следует, что k не должно быть нулем, что ясно также и из определения (37). Соответствующим значением θ является $k^2 - \frac{1}{4}$, так что все собственные значения наблюдаемой θ должны иметь вид $k^2 - \frac{1}{4}$

Рассмотренный пример отличается той новой для нас особенностью, что если мы возьмем две коммутирующие наблюдаемые и выберем по одному собственному значению каждой из них, то не обязательно существует состояние, в котором наши наблюдаемые принимают как раз эти значения, т. е. состояние, которое является совместным собственным состоянием обеих наблюдаемых, принадлежащим двум этим собственным значениям. Так например собственными значениями γ являются все целые числа и целые числа с половиной, а собственными значениями θ являются все числа вида $k^2 - \frac{1}{4}$, где k есть целое отличное от нуля число или целое число с половиной; но состояние, в котором γ и θ соответственно принимают значения γ' и $k^2 - \frac{1}{4}$, существует лишь в том случае, если γ' есть одно из чисел (38). Подобные ограничения, накладываемые на возможные совместные собственные состояния двух или большего количества коммутирующих наблюдаемых, ни в какой степени не отменяют нашей общей теории.

WWW.NIX.RU

VI. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ И КВАНТОВЫЕ УСЛОВИЯ»

§ 31. ОБЩИЕ СООБРАЖЕНИЯ.

Теория, которая была развита в предыдущих главах этой книги, охватывает все новые идеи квантовой механики, ее математический аппарат и общие физические законы. При этом однако были рассмотрены только универсальные свойства состояний и наблюдаемых без всякого отношения к тем специальным условиям, которым они должны удовлетворять в каждом конкретном случае определенной механической системы. Необходимо теперь изучить вид этих специальных условий и таким образом сделать теорию применимой к конкретным физическим задачам. Следует дать себе ясный отчет в том, что предположения, которые мы сейчас сделаем, существенно отличаются по своему характеру от допущений, сделанных в предыдущих главах. Мы будем теперь иметь дело не с универсальными физическими законами, применимыми ко всей природе в целом, но частными допущениями, относящимися к данной конкретной физической задаче, например к взаимодействию данного количества электронов и атомных ядер. Из этих допущений станет ясно, каким образом следует пользоваться тем фактом, что мы в данном случае имеем дело с определенным количеством частиц заданной массы, взаимодействующих друг с другом согласно заданным законам; эти же допущения позволят нам написать уравнения, представляющие математическое описание той механической системы, о которой в данном случае идет речь. Дальнейшее развитие теории может показать, что эти допущения являются лишь приближенными и что их следует изменить; в самом деле, в том виде, в каком мы их теперь сформулируем, они противоречат принципу относительности и следовательно обязательно должны подвергнуться соответствующему изменению в том случае, если мы захотим применять их к очень быстро движущимся частицам. С другой стороны, все допущения, сделанные в предыдущих четырех главах, так тесно связаны между собою, что вряд ли возможно изменить хотя бы одно из них, не будучи в то же время вынужденным радикально переделать и всю квантовую механику; успехи же теории настолько велики, что такое изменение несомненно и не понадобится, по крайней мере для объяснения обыкновенных физических и химических свойств вещества. Изложенная в этих четырех главах теория находится в согласии с принципом относительности: в самом деле она отличается настолько большой общностью, что совершенно не зависит от каких бы то ни было специальных соотношений между временем и пространством. Правда, для того, чтобы это утверждение было справедливым, необходимо дать более широкое определение наблюдаемой, нежели определение, данное нами раньше, согласно которому наблюдаемая есть значение динамической переменной в определенный момент времени; это более широкое определение можно сформулировать так: наблюдаемая есть величина, измеряемая в каком угодно наблюдении и определяемая всем ходом этого наблюдения, в том числе расположением различных составных частей измерительного прибора, а также, в случае необходимости, и временем, когда они вступают в действие. При этом наблюдаемая не будет обязательно относиться к определенному моменту времени в определенной системе отсчета, и поэтому не возникнет никакого противоречия с теорией относительности. Но для нерелятивистской теории, которая будет излагаться в этой главе, прежнее определение наблюдаемой является совершенно достаточным.

Имея дело с данной механической системой, мы должны будем оперировать определенными динамическими переменными, значения которых в различные моменты времени и представляют то, что мы называем наблюдаемыми; нам понадобятся условия, определяющие значения этих переменных во все моменты времени по заданным их значениям в некоторый определенный момент. Эти условия называются уравнениями движения нашей системы. В классической механике уравнений движения совершенно достаточно для полного математического описания рассматриваемой механической системы. В квантовой механике дело обстоит совсем не так: в ней для этого требуются также и некоторые добавочные соотношения, которые имеют вид уравнений, связывающих значения переменных в определенный момент времени и заменяющих действующий в классической теории коммутативный закон умножения. Эти добавочные соотношения называются квантовыми условиями. Только в том случае мы можем считать рассматриваемую механическую систему математически вполне заданной и только в том случае мы знаем о динамических переменных

все, что можно было о них знать и в классической теории, если заданы и квантовые условия и уравнения движения. Уравнения движения и квантовые условия тесно связаны друг с другом, и в решении задачи нельзя продвинуться ни на шаг, пока нам не известны и те и другие.

Нам предстоит теперь определить квантовые условия и уравнения движения любой данной механической системы, состоящей из данного количества взаимодействующих электронов и атомных ядер. Известно, что в некоторых предельных случаях, например когда массы очень велики, классическая механика удачно описывает поведение механических систем. Если же мы не имеем дела с этими предельными случаями, то можно надеяться построить теорию таких же механических систем, сделав в классических уравнениях движения некоторые естественные обобщения и выбрав квантовые условия таким образом, чтобы они были естественным обобщением классического закона, по которому все переменные коммутируют друг с другом. Мы увидим, что таким путем возможно построить квантовую теорию отдельных механических систем, аналогичную классической механике. Эта теория впрочем не будет применима ко всем решительно механическим системам, с которыми приходится иметь дело, а только лишь к одному обширному и важному классу этих систем; дело в том, что в квантовой теории встречаются системы, не имеющие аналогов в классической механике (например система, состоящая из фотона, взаимодействующего с атомом, см. главу XII); для того, чтобы применить квантовую теорию к таким системам, необходимо в каждом отдельном случае специально избрать квантовые условия и уравнения движения, исходя из особых теоретических соображений или из опытных фактов.

§ 32. СКОБКИ ПУАССОНА.

Классические уравнения движения, обобщения которых мы ищем, могут быть записаны в виде

$$\frac{dq_r}{dt} = \dot{q}_r = \frac{\partial H}{\partial p_r}, \quad \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial q_r}, \quad (1)$$

где q_r и p_r представляют обобщенные координаты и канонически-сопряженные с ними обобщенные импульсы и где H представляет функцию Гамильтона, т. е. заданную для данной механической системы функцию координат и импульсов; если эта функция не содержит времени явно, то она равна энергии этой механической системы. В уравнения движения (1) входят частные производные, вообще говоря - не имеющие никакого смысла в случае динамических переменных квантовой теории. Это затруднение можно преодолеть благодаря тому факту, что уравнения движения (1) и все другие важные уравнения классической механики могут быть написаны в таком виде, в котором частные производные входят в уравнения лишь через посредство так называемых скобок Пуассона; что касается этих последних, то им, как мы сейчас увидим, соответствуют некоторые аналоги и в квантовой теории. Если даны две переменные ξ и η , то для них можно составить скобку Пуассона, обозначаемую символом $[\xi; \eta]$ имеющую в классической теории следующий смысл:

$$[\xi, \eta] = \sum_r \left(\frac{\partial \xi}{\partial q_r} \frac{\partial \eta}{\partial p_r} - \frac{\partial \xi}{\partial p_r} \frac{\partial \eta}{\partial q_r} \right). \quad (2)$$

Важность скобок Пуассона связана тем обстоятельством, что они инвариантны по отношению к касательным преобразованиям, т. е. таким преобразованиям канонических переменных, которые оставляют уравнения движения неизменными;¹ именно поэтому уравнения движения и могут быть выражены через посредство скобок Пуассона. В самом деле,

$$\dot{q}_r = [q_r, H], \quad \dot{p}_r = [p_r, H], \quad (3)$$

и вообще

$$\dot{\xi} = \sum_r \left\{ \frac{\partial \xi}{\partial q_r} \dot{q}_r + \frac{\partial \xi}{\partial p_r} \dot{p}_r \right\} = \sum_r \left\{ \frac{\partial \xi}{\partial q_r} \frac{\partial H}{\partial p_r} - \frac{\partial \xi}{\partial p_r} \frac{\partial H}{\partial q_r} \right\} = [\xi, H] \quad (4)$$

для любой переменной ξ .

Для того чтобы отыскать квантовый аналог скобок Пуассона, отметим некоторые свойства этих скобок и затем постараемся определить квантовые скобки Пуассона так, чтобы и они обладали теми же свойствами. Из определения (2) непосредственно следуют соотношения

$$[\xi, \eta] = -[\eta, \xi], \quad (5)$$

$$[\xi, c] = 0, \quad (6)$$

где c есть число. Кроме того

$$\begin{aligned} [\xi_1 + \xi_2, \eta] &= [\xi_1, \eta] + [\xi_2, \eta] \\ [\xi, \eta_1 + \eta_2] &= [\xi, \eta_1] + [\xi, \eta_2] \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} [\xi_1, \xi_2, \eta] &= \sum_r \left\{ \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial q_r} \xi_2 + \xi_1 \frac{\partial \xi_2}{\partial q_r} \right) \frac{\partial \eta}{\partial p_r} - \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial p_r} \xi_2 + \xi_1 \frac{\partial \xi_2}{\partial p_r} \right) \frac{\partial \eta}{\partial q_r} \right\} = \\ &= [\xi_1, \eta] \xi_2 + \xi_1 [\xi_2, \eta] \\ [\xi, \eta_1, \eta_2] &= [\xi, \eta_1] \eta_2 + \eta_1 [\xi, \eta_2] \end{aligned} \quad (8)$$

Легко проверить также и тождество

$$[\xi, [\eta, \zeta]] + [\eta, [\zeta, \xi]] + [\zeta, [\xi, \eta]] = 0. \quad (9)$$

Равенства (7) обозначают, что скобки Пуассона $[\xi; \eta]$ содержат ξ и η линейно, а равенства (8) соответствуют обычному правилу дифференцирования произведения.

¹ Инвариантность скобок Пуассона по отношению к касательному преобразованию $(p_r, q_r) \rightarrow (p_r^*, q_r^*)$ доказывается следующим образом: из формулы

$$[\xi, \eta] = \sum_r \left(\frac{\partial \xi}{\partial q_r} \frac{\partial \eta}{\partial p_r} - \frac{\partial \eta}{\partial q_r} \frac{\partial \xi}{\partial p_r} \right)$$

следует

$$\begin{aligned} [\xi, \eta] &= \sum_{rsu} \left(\frac{\partial \xi}{\partial q_s^*} \frac{\partial \eta}{\partial p_u^*} - \frac{\partial \eta}{\partial q_s^*} \frac{\partial \xi}{\partial p_u^*} \right) \frac{\partial q_s^*}{\partial q_r} \frac{\partial p_u^*}{\partial p_r} + \\ &+ \sum_{rsu} \left(\frac{\partial \xi}{\partial q_s^*} \frac{\partial \eta}{\partial p_u^*} - \frac{\partial \eta}{\partial q_s^*} \frac{\partial \xi}{\partial p_u^*} \right) \frac{\partial q_s^*}{\partial q_r} \frac{\partial p_u^*}{\partial p_r} + \\ &+ \sum_{rsu} \left(\frac{\partial \xi}{\partial p_s^*} \frac{\partial \eta}{\partial q_u^*} - \frac{\partial \eta}{\partial p_s^*} \frac{\partial \xi}{\partial q_u^*} \right) \frac{\partial p_s^*}{\partial p_r} \frac{\partial q_u^*}{\partial q_r} + \\ &+ \sum_{rsu} \left(\frac{\partial \xi}{\partial p_s^*} \frac{\partial \eta}{\partial q_u^*} - \frac{\partial \eta}{\partial p_s^*} \frac{\partial \xi}{\partial q_u^*} \right) \frac{\partial p_s^*}{\partial p_r} \frac{\partial p_u^*}{\partial p_r} \end{aligned}$$

Пользуясь тем, что значки, по которым происходит суммирование, можно переставлять, легко показать, что это же выражение равно

$$\begin{aligned} [\xi, \eta] &= \sum_{su} \frac{\partial \xi}{\partial q_s^*} \frac{\partial \eta}{\partial p_u^*} [q_s^*, p_u^*] + \sum_{su} \left(\frac{\partial \xi}{\partial q_s^*} \frac{\partial \eta}{\partial p_u^*} - \frac{\partial \eta}{\partial q_s^*} \frac{\partial \xi}{\partial p_u^*} \right) [q_s^*, p_s^*] + \\ &+ \sum_{su} \frac{\partial \xi}{\partial p_s^*} \frac{\partial \eta}{\partial p_u^*} [p_s^*, p_u^*]. \end{aligned}$$

Но необходимым и достаточным условием того, чтобы преобразование

$$(p_r, q_r) \rightarrow (p_r^*, q_r^*)$$

было касательным, является

$$[q_s^*, q_u^*] = [p_s^*, p_u^*] = 0, \quad [q_s^*, p_u^*] = \delta_{su}$$

см. E. T. Whittaker, *Analytische Dynamik der Punkte und starren Körper*, 1924, § 131 доказываемая здесь теорема формулирована в этой книге в виде первого упражнения к этому параграфу. Отсюда следует

$$[\xi, \eta] = \sum_s \left(\frac{\partial \xi}{\partial q_s^*} \frac{\partial \eta}{\partial p_s^*} - \frac{\partial \eta}{\partial q_s^*} \frac{\partial \xi}{\partial p_s^*} \right) = [\xi, \eta]^*$$

что и требовалось доказать.

Можно определить квантовые скобки Пуассона таким образом, чтобы они обладали всеми этими свойствами, при условии, чтобы порядок множителей ξ_1 и ξ_2 в первом равенстве (8) был одинаков во всех членах этого равенства (в таком виде это равенство у нас и написано) и чтобы это же соблюдалось и по отношению к η_1 и η_2 во втором равенстве (8). Этим условиям достаточно для однозначного определения вида квантовых скобок Пуассона, что вытекает из следующего рассуждения. Скобку Пуассона $[\xi_1 \xi_2 \eta_1 \eta_2]$ можно вычислить двумя способами, применяя сначала первое равенство (8), а затем второе, или в обратном порядке. В первом случае имеем

$$\begin{aligned} [\xi_1 \xi_2, \eta_1 \eta_2] &= [\xi_1, \eta_1 \eta_2] \xi_2 + \xi_1 [\xi_2, \eta_1 \eta_2] = \\ &= \{ [\xi_1, \eta_1] \eta_2 + \eta_1 [\xi_1, \eta_2] \} \xi_2 + \xi_1 \{ [\xi_2, \eta_1] \eta_2 + \eta_1 [\xi_2, \eta_2] \} = \\ &= [\xi_1, \eta_1] \eta_2 \xi_2 + \eta_1 [\xi_1, \eta_2] \xi_2 + \xi_1 [\xi_2, \eta_1] \eta_2 + \xi_1 \eta_1 [\xi_2, \eta_2], \end{aligned}$$

а во втором случае

$$\begin{aligned} [\xi_1 \xi_2, \eta_1 \eta_2] &= [\xi_1 \xi_2, \eta_1] \eta_2 + \eta_1 [\xi_1 \xi_2, \eta_2] = \\ &= [\xi_1, \eta_1] \xi_2 \eta_2 + \xi_1 [\xi_2, \eta_1] \eta_2 + \eta_1 [\xi_1, \eta_2] \xi_2 + \eta_1 \xi_1 [\xi_2, \eta_2]. \end{aligned}$$

Приравнявая оба результата друг другу, мы находим

$$[\xi_1, \eta_1] (\xi_2 \eta_2 - \eta_2 \xi_2) = (\xi_1 \eta_1 - \eta_1 \xi_1) [\xi_2, \eta_2].$$

Так как это условие справедливо и тогда, когда ξ_1 и η_1 то должно быть

$$\begin{aligned} \xi_1 \eta_1 - \eta_1 \xi_1 &= i\hbar [\xi_1, \eta_1], \\ \xi_2 \eta_2 - \eta_2 \xi_2 &= i\hbar [\xi_2, \eta_2], \end{aligned}$$

где \hbar не должно зависеть ни от ξ_1 и η_1 ни от ξ_2 и η_2 , должно кроме того коммутировать с $(\xi_1 \eta_1 - \xi_2 \eta_2)$ и поэтому должно быть числом. Нам нужно, чтобы скобка Пуассона для двух вещественных переменных была вещественной, как и в классической механике, а отсюда следует, что \hbar должно быть вещественным числом (для этого мы и ввели при нем множитель i). Таким образом мы приходим к следующему определению квантовой скобки Пуассона $[\xi; \eta]$ для любых двух переменных ξ и η :

$$\xi \eta - \eta \xi = i\hbar [\xi, \eta], \quad (10)$$

где \hbar есть новая универсальная постоянная, имеющая размерность действия.¹ Для того, чтобы теория согласовалась с опытом, необходимо в качестве \hbar взять $\frac{h}{2\pi}$, где h - универсальная постоянная, введенная Планком. Легко проверить, что квантовые скобки Пуассона, определением которых является формула (10), удовлетворяют условиям (5), (6), (7), (8) и (9). Эти условия часто дают возможность вычислить какую-нибудь особенно сложную скобку сведением ее к более простым скобкам Пуассона, значения которых уже известны, и это может оказаться более удобным, чем непосредственное применение равенства (10).

§ 33. ПОСТРОЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ И КВАНТОВЫХ УСЛОВИЙ ПО АНАЛОГИИ С КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКОЙ.

Гипотеза, согласно которой квантовые скобки Пуассона (10) являются аналогами классических скобок Пуассона, позволяет перенести в квантовую теорию классические уравнения движения (3) и (4), а также - любые классические уравнения, которые могут быть написаны через посредство скобок Пуассона. В классической теории скобки Пуассона переменных p и q имеют значения

$$\left. \begin{aligned} [q_r, q_s] &= 0, & [p_r, p_s] &= 0 \\ [q_r, p_s] &= \delta_{rs} \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Допущение, согласно которому они имеют те же самые значения и в квантовой теории, дает нам квантовые условия, так как с помощью соотношений (5), (6), (7) и (8) можно вычислить скобки Пуассона $[\xi; \eta]$ для любых двух переменных ξ и η , являющихся

¹ Т.е. произведения длины на количество движения. Это необходимо для того, чтобы отношение разности $\xi\eta - \eta\xi$ к скобке Пуассона $[\xi; \eta]$ имело такую же размерность, какую имеет в классической механике отношение произведения двух переменных к скобке Пуассона этих двух переменных.

аналитическими функциями от p и q , и получить таким образом с помощью формулы (10) равенство для $\xi\eta - \eta\xi$ способное заменить классическое равенство $\xi\eta - \eta\xi = 0$. Таким образом мы разрешили задачу построения уравнений движения и квантовых условий, представляющих естественное обобщение классической механики. Классическая механика, действительно, является не чем иным, как предельным случаем квантовой теории при $\hbar \rightarrow 0$.

Можно написать квантовые условия и уравнения движения и без скобок Пуассона, если исключить скобки Пуассона с помощью равенства (10), представляющего их определение в квантовой теории. Таким образом из (11) получаются квантовые условия

$$\left. \begin{aligned} q_r q_s - q_s q_r = 0, \quad p_r p_s - p_s p_r = 0 \\ q_r p_s - p_s q_r = i\hbar \delta_{rs} \end{aligned} \right\}, \quad (12)$$

а из (4) уравнения движения

$$i\hbar \dot{\xi} = \xi H - H\xi. \quad (13)$$

Условие постоянства переменной ξ ; заключается в том, что она должна коммутировать с функцией Гамильтона.

Понятие «скобка Пуассона» в квантовой теории является гораздо более основным понятием, чем в классической, что иллюстрируется тем фактом, что в квантовой теории можно определить скобки Пуассона без всякого отношения к каноническим переменным q и p , между тем как в классической теории это невозможно. По этой же причине понятие канонических переменных в квантовой теории менее важно, нежели в классической.

В классической теории понятие канонических переменных является понятием механики, в то время как в квантовой теории это - чисто алгебраическое понятие, так как условиями того, что переменные суть канонические переменные, являются алгебраические формулы (11) или (12). В классической теории уравнения (11) также могут считаться определением канонических переменных, но эти уравнения имеют смысл лишь в том случае, если q_r и p_r являются функциями других переменных q_r^* , p_r^* , о которых уже задано, что они канонические; в противном случае сами скобки Пуассона теряют смысл. Переход от одной системы канонических переменных к другой называется в классической теории касательным преобразованием; этот термин может быть с удобством сохранен и в квантовой теории. Преобразования, которые рассматривались в § 19, очевидно переводят одну систему канонических переменных в другую, так как они оставляют неизменными, как было показано в § 19, все алгебраические соотношения между переменными, а условия каноничности переменных являются в квантовой теории алгебраическими соотношениями.

Следует иметь в виду, что символы q , p и т. д. в уравнениях, с которыми мы теперь имеем дело, обозначают значения $q(t)$, $p(t)$ и т. д. этих переменных в момент времени t , хотя этот момент времени и не упоминается явно, так что наши уравнения связывают между собой наблюдаемые, зависящие от параметра t . Величина ξ с в формулах (4) и (13), имеющая смысл производной от наблюдаемой ξ по параметру t , есть также наблюдаемая. Наблюдаемые $\xi(t)$, $\eta(t)$, зависящие от параметра t , подчиняются правилам

$$\frac{d}{dt} (\xi + \eta) = \frac{d\xi}{dt} + \frac{d\eta}{dt}, \quad \frac{d}{dt} (\xi \eta) = \xi \frac{d\eta}{dt} + \frac{d\xi}{dt} \eta,$$

которые находятся в согласии с квантовым уравнением движения (4) или (13) благодаря тому, что они аналогичны формулам (7) и (8).

Мы имеем право допустить справедливость квантовых условий (11) или (12) только для одного определенного момента времени; затем мы должны вывести из уравнений движения, что те же самые квантовые условия остаются действительными и во все прочие моменты времени. Это можно доказать посредством того замечания, что если уравнения (11) или (12) удовлетворяются в некоторый момент времени t , то в этот момент должна равняться нулю быстрота изменения во времени левых частей этих уравнений,¹ а следовательно те же уравнения должны удовлетворяться и в момент $t+dt$. Другое доказательство заключается в том замечании, что на основании уравнения движения (13) значения переменных p и q в момент времени $t+dt$ связаны с их значениями в момент времени t бесконечно малым касательным

¹ Так как правые части этих уравнений в момент времени t коммутирует с функцией Гамильтона H .

преобразованием типа преобразования (29), рассмотренного в § 19. Для того, чтобы мы могли считать, что классический коммутативный закон умножения действительно заменен нашими квантовыми условиями, необходимо уметь вычислять выражения вида $\xi(t_1)\eta(t_2) - \eta(t_2)\xi(t_1)$. Это можно сделать благодаря уравнениям движения, позволяющим выразить $\xi(t_1)$ и $\eta(t_2)$ через значения p и q в некоторый момент времени t , после чего нужно применить квантовые условия (12).

Уравнения движения (4) и (13) можно обобщить на тот случай, когда переменная ξ зависит от времени не только через посредство p и q , функцией которых она является, но также и явно. Классическое обобщение уравнения (4) гласит:

$$\dot{\xi} = \frac{\partial \xi}{\partial t} + [\xi, H], \quad (14)$$

и можно без всякого изменения перенести это обобщение в квантовую теорию. Обобщение формулы (13) поэтому таково:

$$i\hbar \dot{\xi} = i\hbar \frac{\partial \xi}{\partial t} + \xi H - H\xi. \quad (15)$$

Функция Гамильтона H оказывается постоянной в том и только в том случае, когда она не содержит времени явно. Уравнения движения не изменяются, если прибавить к функции Гамильтона любую численную величину, даже если она является функцией времени.

Мы теперь в состоянии получить все, что требуется для любой механической системы, для которой известна гамильтонова функция H , выраженная через q и p и быть может зависящая также явно и от времени t . Следует иметь в виду, что порядок множителей в произведениях, входящих в состав H , может оказаться важным, так как не все наши переменные коммутируют друг с другом; поэтому в квантовой теории функции Гамильтона отличаются большим разнообразием, чем в классической теории. Одной и той же классической функции Гамильтона может соответствовать, вообще говоря, несколько функций Гамильтона в квантовой механике; поэтому, если дастся определенная механическая система в классической механике, то, вообще говоря, нет никакого смысла говорить о такой же самой системе в квантовой теории. Однако существуют и исключения из этого общего правила, и на практике во многих случаях в квантовой механике оказывается возможным однозначно описывать механические системы языком классической теории. Так например можно говорить, что механическая система состоит из точки массы m , движущейся в силовом поле, обладающей потенциальной функцией V . В классической теории функция Гамильтона такой системы, выраженная в прямоугольных координатах, имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z).$$

Без двусмысленности можно сказать, что такой же системой в квантовой механике является система, обладающая этой же функцией Гамильтона, поскольку эта функция Гамильтона нигде не содержит произведений типа xp_x , в которых порядок множителей важен. Следует заметить, что такая однозначность при переходе от классической функции Гамильтона к квантовой сохраняется лишь в том случае, если всегда пользоваться прямоугольными координатами: если в квантовую механику переносится из механики классической выражение функции Гамильтона в каких-либо криволинейных координатах, то получаются, вообще говоря, различные функции Гамильтона, отличающиеся друг от друга членами, содержащими множитель \hbar .

§ 34. КВАНТОВЫЕ УСЛОВИЯ В ШРЕДИНГЕРОВОЙ ФОРМЕ.

В этом и в следующем параграфах мы выведем наиболее важные следствия из квантовых условий (12). Нам будет интересовать вопрос о значениях переменных q и p в определенный момент времени (в дальнейшем, впрочем, этот момент времени не будет упоминаться явно).

Уравнение (26) главы II совпадает, если отвлечься от численного множителя \hbar , с квантовым условием, которое связывает каждую координату q_r с ее сопряженным импульсом p_r . Поэтому мы можем непосредственно применить к нашим переменным q_r и p_r , выведенные в главе II следствия из этого уравнения, делая там, где это нужно, соответствующую поправку на множитель \hbar . Уравнение (27) главы II позволяет нам поэтому писать

$$\hat{p}_r - p_r f = i\hbar \frac{df}{dq_r}, \quad (16)$$

где f - любая функция переменной q_r , которую можно представить в виде степенного ряда. Очевидно, это равенство имеет место и в том случае, если f содержит кроме переменной q_r также и другие q , но только при этом следует вместо полной производной по q_r писать частную производную. Далее из рассуждений в конце § 19 следует, что все числа от $-\infty$ до $+\infty$ являются собственными значениями наблюдаемых q_r и p_r . Это например и должно быть в том случае, когда q_r и p_r являются прямоугольными координатами и составляющими количества движения материальной частицы.

Покажем теперь, что если отвлечься от некоторой неопределенности, то можно придать определенный смысл оператору $\frac{\partial}{\partial q_r}$ в применении к ψ -символу, или иными словами,

что можно дифференцировать ψ -символ по наблюдаемой q_r . Простейший способ решения этой задачи заключается в том, что мы пользуемся таким представлением, в котором наблюдаемая q_r оказывается, в числе прочих, диагональной. Представитель (q'_r) ψ -символа ψ будет тогда функцией переменной q'_r , область изменения которой простирается от $-\infty$ до $+\infty$; поэтому можно вычислить частную производную этой функции по q'_r , причем эта производная оказывается функцией

$$\frac{\partial}{\partial q'_r} \psi(q'_r)$$

той же самой переменной q'_r , определенной в области $(-\infty, +\infty)$. Эта функция будет представителем некоторого нового ψ -символа, который мы будем называть частной производной от ψ -символа ψ по q . Конечно только в том случае можно будет говорить, что применение оператора $\frac{\partial}{\partial q_r}$ к символу ψ имеет строго определенный смысл, если у каждого

символа ψ есть лишь одна производная $\frac{\partial \psi}{\partial q_r}$, т. е. если описанная выше процедура получения

$\frac{\partial \psi}{\partial q_r}$ дает один и тот же результат независимо от того, какое именно представление мы

изберем из всех тех, в которых наблюдаемая q_r диагональна. В действительности это не так, и применение оператора $\frac{\partial}{\partial q_r}$ к символу ψ имеет не вполне определенный смысл; попробуем разобраться в размерах этой неопределенности.

Рассмотрим сперва случай системы с одной степенью свободы; в этом случае мы имеем только одну координату q и только одну переменную q' в выражении представителя (q'_r) символа ψ . Дифференцируя этот представитель, мы получаем $\frac{\partial}{\partial q'} \psi(q')$ т.е. представитель

некоторого ψ -символа $\frac{\partial \psi}{\partial q}$; обозначим этот ψ -символ через $\left(\frac{\partial \psi}{\partial q}\right)_a$. Наиболее общее

каноническое преобразование, которое мы можем сделать в случае одной степени свободы, при условии, что координата q остается диагональной, приводит к тому, что представитель ψ -символа помножается на произвольный фазовый множитель. Итак, новый представитель символа ψ должен иметь вид

$$(q'_r)^* = e^{iF'} \psi(q'), \quad (17)$$

где F' обозначает вещественную функцию $F(q')$ от переменной q' . Если определить теперь $\frac{\partial \psi}{\partial q}$ в этом новом представлении, то получится другой ψ -символ $\frac{\partial \psi}{\partial q}$, который мы обозначим через $\left(\frac{\partial \psi}{\partial q}\right)_b$. Его представитель будет представителем будет

$$\frac{\partial}{\partial q'} (q'|)^* = e^{iF'} \frac{\partial}{\partial q'} (q'|) + ie^{iF'} \frac{dF'}{dq'} (q'|).$$

Представителем ψ -символа $\left(\frac{\partial \psi}{\partial q}\right)_b$ в первоначальном представлении поэтому будет

$$e^{-iF'} \frac{\partial}{\partial q'} (q'|)^* = \frac{\partial}{\partial q'} (q'|) + i \frac{dF'}{dq'} (q'|),$$

откуда

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial q}\right)_b = \left(\frac{\partial \psi}{\partial q}\right)_a + i \frac{dF}{dq} \psi.$$

Это уравнение дает наиболее общую зависимость между обеими производными $\frac{\partial \psi}{\partial q}$. Оно показывает, что неопределенность в операторе $\frac{\partial}{\partial q}$ заключается в возможности прибавления произвольной чисто-мнимой функции переменной q .

В случае n степеней свободы наиболее общее каноническое преобразование, в котором одна из координат q , например q_r , остается диагональной, имеет более общий вид, нежели простое изменение фазы; поэтому неопределенность оператора $\frac{\partial}{\partial q_r}$ гораздо более велика, чем в случае одной степени свободы. Но в тех случаях, когда мы будем иметь дело с оператором $\frac{\partial}{\partial q_r}$, нам придется иметь дело не с ним одним, но также и со всеми операторами $\frac{\partial}{\partial q_1}, \frac{\partial}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_n}$, а поэтому нам будет полезно придать этим операторам лишь тот смысл, который связан с представлением, делающим все координаты q_1, q_2, \dots, q_n диагональными. Произвол в выборе представления поэтому вновь сводится к произвольной фазе, как в формуле (17), и снова приводит к соотношению типа (18) между обеими производными $\frac{\partial \psi}{\partial q_r}$, а именно:

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial q_r}\right)_b = \left(\frac{\partial \psi}{\partial q_r}\right)_a + i \frac{\partial F}{\partial q_r} \psi, \quad (19)$$

где F есть любая вещественная функция всех координат q . Таким образом неопределенность операторов $\frac{\partial}{\partial q_r}$ - заключается в возможности одновременно прибавить к каждому r -тому оператору функции вида $i \frac{\partial F}{\partial q_r}$. Небольшие размеры этого произвола были достигнуты однако

только благодаря тому, что каждый оператор $\frac{\partial}{\partial q_r}$ был определен не только наблюдаемой q_r , но всей системой коммутирующих наблюдаемых q_1, q_2, \dots, q_n .

Операторы, применяемые к ψ -символам, являются линейными операторами, применимыми к любому ψ ; поэтому они являются обыкновенными наблюдаемыми. Обозначим оператор $\frac{\partial}{\partial q_r}$, рассматриваемый как наблюдаемая величина, буквой π_r .

Представителем наблюдаемой π_r в том представлении, в котором мы определили $\frac{\partial \psi}{\partial q_r}$, будет матрица

$$(q' | \pi_r | q'') = -\delta(q'_1 - q''_1) \delta(q'_2 - q''_2) \dots \delta(q'_{r-1} - q''_{r-1}) \delta(q'_r - q''_r) \delta(q'_{r+1} - q''_{r+1}) \dots \delta(q'_n - q''_n), \quad (20)$$

напоминающая выражение (49) в главе IV. Отсюда видно, что π_r представлено антисимметрической матрицей, а это значит [см. формулу (23) в § 21], что π_r есть чисто-мнимая наблюдаемая. Формула (20) показывает также, что при умножении π_r на ψ -символ результат равен

$$\psi \pi_r = -i \frac{\partial \psi}{\partial q_r}, \quad (20)$$

где $\frac{\partial \psi}{\partial q_r}$, определяется своим q -представителем таким же образом, как $\frac{\partial \psi}{\partial q_r}$.

Построим теперь перестановочные соотношения, связывающие π друг с другом и с q . Для этого воспользуемся тем обстоятельством, что применение операторов $\frac{\partial}{\partial q_r}$ к символам ψ

подчиняется тем же самым законам, как и применение этих операторов к обыкновенным функциям. Легко проверить, что это действительно так. Так например

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial q_r \partial q_s} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_s \partial q_r}$$

или

$$\pi_r \pi_s \psi = \pi_s \pi_r \psi,$$

откуда

$$\pi_r \pi_s - \pi_s \pi_r = 0. \quad (22)$$

Далее

$$\frac{\partial}{\partial q_s} (q_r \psi) = q_r \frac{\partial \psi}{\partial q_s} + \delta_{rs} \psi$$

или

$$\pi_s q_r \psi = q_r \pi_s \psi + \delta_{rs} \psi,$$

откуда

$$q_r \pi_s - \pi_s q_r = -i \delta_{rs}. \quad (23)$$

Вообще, если f есть функция координат q , имеющая производные, то

$$\frac{\partial}{\partial q_s} (f \psi) = f \frac{\partial \psi}{\partial q_s} + \frac{\partial f}{\partial q_s} \psi$$

или

$$\pi_s f \psi = f \pi_s \psi + \frac{\partial f}{\partial q_s} \psi,$$

откуда

$$f \pi_s - \pi_s f = -i \frac{\partial f}{\partial q_s}. \quad (24)$$

Можно было бы получить соотношения (22), (23), (24) и иным способом, а именно непосредственно из матрицы (20), пользуясь доказанными в § 22 свойствами функции δ .

Если отвлечься от числового множителя $-i\hbar$, то окажется, что соотношения (22) и (23), которым удовлетворяют наблюдаемые π , в точности совпадают с квантовыми условиями (12), которым удовлетворяют импульсы p . Итак наблюдаемые $-i\hbar \pi_r$ удовлетворяют тем же самым перестановочным соотношениям (между собою и с координатами q), как и p_r . Уравнение (24) соответствует при этом уравнению (16) с той лишь разницей, что уравнение (24) было доказано для любых дифференцируемых функций f , а не только для тех, которые могут быть выражены степенными рядами. Вследствие рассмотренной выше неопределенности в операторе $\frac{\partial}{\partial q_r}$ существуют различные системы наблюдаемых π_r , но каждая из них должна удовлетворять соотношениям (22) и (23), а значит соответствующие наблюдаемые $-i\hbar \pi_r$

должны удовлетворять тем же самым перестановочным соотношениям, что и p_r . Любая такая система наблюдаемых π_r связана с другой системой, которую мы обозначим π_{ra} , на основании равенства (19), соотношением

$$\pi_r' = \pi_{ra} + i \frac{\partial F}{\partial q_r}. \quad (25)$$

Докажем теперь, что существует одна система π_r такая, что $-i\hbar\pi_r$, в точности равно p_r .

Если мы выберем определенную систему π_r , например π_{ra} , то из (23) и (12) будет следовать, что $p_s + i\hbar\pi_{sa}$ коммутируют со всеми q_r ; поэтому $p_s + i\hbar\pi_{sa}$ может быть функцией только от координат q , т.е.

$$p_s + i\hbar\pi_{sa} = f_s(q). \quad (26)$$

Каждая функция f_s должна быть вещественной, потому что p_s и $-i\hbar\pi_r$ являются вещественными наблюдаемыми. Далее из (12) и (22) следует

$$\begin{aligned} 0 &= p_r p_s - p_s p_r = \\ &= (-i\hbar\pi_{ra} + f_r) (-i\hbar\pi_{sa} + f_s) - (-i\hbar\pi_{sa} + f_s) (-i\hbar\pi_{ra} + f_r) \\ &= -i\hbar [\pi_{ra} f_s + f_r \pi_{sa} - \pi_{sa} f_r - f_s \pi_{ra}] \end{aligned}$$

или

$$\pi_{sa} f_r - f_r \pi_{sa} = \pi_{ra} f_s - f_s \pi_{ra}.$$

С помощью (24) мы находим

$$\frac{\partial f_r}{\partial q_s} = \frac{\partial f_s}{\partial q_r},$$

откуда следует, что все функции f_r имеют вид

$$f_r = \frac{\partial G}{\partial q_r},$$

где G есть функция координат q , не содержащая значка r . Поэтому (26) принимает вид

$$p_r = -i\hbar\pi_{ra} + \frac{\partial G}{\partial q_r} = -i\hbar \left(\pi_{ra} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial G}{\partial q_r} \right).$$

На основании уравнения (25) мы можем ввести новую систему наблюдаемых π_r , взяв $F = \frac{G}{\hbar}$, так как G вещественна, а F может быть любой вещественной функцией координат q . Эти новые π_r будут удовлетворять уравнению

$$p_r = -i\hbar\pi_r. \quad (27)$$

Уравнение (27), открытое Шредингером, играет важную роль в применениях квантовой механики. Оно является следствием одних только квантовых условий (12) и может считаться выражением этих же квантовых условий в иной форме. Оно показывает, что можно выбрать представление, в котором все q диагональны и в котором каждая наблюдаемая π_r , будучи помножена на ψ -символ, представляется оператором $-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r}$, действующим на представитель (q') этого ψ -символа. Если же наблюдаемая p_r помножается справа на ϕ -символ, то она представляется оператором $i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r}$, действующим на представитель (q') этого ϕ -символа.

Если $f(q_s, p_r)$ есть некоторая функция координат q и импульсов p , которую можно выразить степенным рядом относительно p , то она эквивалентна оператору

$$f(q_s, -i\hbar\pi_r), \quad (28)$$

который получается из $f(q_s, p_r)$ заменой каждого p_r соответствующим оператором $i\hbar\pi_r$. Это следует понимать в том смысле, что помножение f на ϕ -символ представляется в виде действия оператора $f\left(q'_s, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_r}\right)$ на представитель (q') этого ψ -символа, а помножение f на

ϕ -символ будет представлено в виде действия оператора $\tilde{f}\left(q'_s, i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_r}\right)$ на представитель (q')

этого ϕ -символа, где \tilde{f} есть функция, получаемая из f заменой порядка множителей в каждом произведении на обратный. Уравнение, определяющее собственные значения f' наблюдаемой f , принимает вид

$$f\left(q'_s, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_r}\right)(q') = f' \cdot (q'), \quad (29)$$

т. е. становится обычным дифференциальным уравнением в частных производных, содержащим неизвестную функцию (q') и неизвестное число f' . В частном случае, когда f есть гамильтонова функция координат и импульсов или (что то же самое, если только она не содержит времени явно) энергия рассматриваемой механической системы, то уравнение (29) становится уравнением Шредингера для определения возможных численных значений энергии.

Уравнение (27) раскрывает смысл неопределенности в выборе представления, относительно которого известно только, какие именно наблюдаемые должны в нем быть диагональными. В каждом представлении, в котором координаты q оказываются диагональными, существует определенная система наблюдаемых, сопряженных с q (т. е. удовлетворяющих тем же условиям, что импульсы p в формуле 12) и притом таких, что представители этих наблюдаемых имеют особенно простой вид $-i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_r}$, [при помножении на представитель (q') символа ψ . Если же мы с самого начала задаемся определенной системой наблюдаемых, сопряженных с q , и требуем, чтобы именно их представители имели особенно простой вид $-i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_r}$, то представление определяется этим требованием вполне, не считая

тривиального фазового множителя $e^{i\gamma}$, где γ не зависит от q , так как функция F в уравнении (25) однозначно определена (не считая произвольной постоянной) тем, что $i\hbar \pi_r$ должно равняться p_r . Такого же рода бывает неопределенность в определении представления, относительно которого известно, какие наблюдаемые в нем должны быть диагональными, хотя в том случае, когда некоторые из этих диагональных наблюдаемых не имеют себе канонически-сопряженных (например те наблюдаемые, у которых совокупность собственных значений не простирается от $-\infty$ до $+\infty$) предыдущие рассуждения не все оказываются применимыми.

Из уравнений (27) и (24) видно, что формула (16) остается справедливой и для таких функций f от q , которые не могут быть выражены степенными рядами.

§ 35. ФУНКЦИЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ $(q'|p')$.

Результат (27), который мы вывели пользуясь q -представителями символов ψ или ϕ , должен быть применимым также и к функциям преобразования, связывающим два представления, из которых одно есть q -представление: ведь эти функции преобразования являются не чем иным, как представителями основных ψ - или ϕ -символов одного представления в другом представлении. Например функция преобразования $(q'|\alpha')$ есть q -представитель символа $\psi(\alpha')$. Поэтому на основании формулы (27) представитель ψ -символа $p_r \psi(\alpha')$ есть $-i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_r}(q'|\alpha')$. Этот представитель, который равен

$$\int (q'|p_r q'') dq''(q''|\alpha'),$$

может быть написан в виде $(q'|p_r|\alpha')$ (употребляя обозначения смешанных представлений § 27); поэтому

$$(q'|p_r|\alpha') = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_r}(q'|\alpha'). \quad (30)$$

Аналогичным образом, если $f(q_s, p_r)$ есть какая угодно функция от q и от p , которую можно выразить степенным рядом относительно переменных p , то из результата (28) видно, что

$$(q' | f | \alpha') = f\left(q', -i\hbar \frac{\partial}{\partial q'}\right)(q' | \alpha'). \quad (31)$$

Далее функция преобразования $(\alpha' | q')$ есть q - представитель символа $\varphi(\alpha')$, вследствие чего, пользуясь равенством (21), мы получаем из (27)

$$(\alpha' | p_r | q') = i\hbar \frac{\partial}{\partial q'} (\alpha' | q'), \quad (32)$$

а из (28)

$$(\alpha' | f | q') = \tilde{f}\left(q', i\hbar \frac{\partial}{\partial q'}\right)(\alpha' | q'). \quad (33)$$

Применим теперь (30) к вычислению функции преобразования $(q' | p')$, связывающей координату q с ее канонически-сопряженным импульсом p . Имеем

$$(\alpha' | p | p') = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q'} (\alpha' | p').$$

Но из уравнений (22) главы V следует, что

$$(q' | p | p') = (q' | p') p'.$$

Поэтому

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial q'} (q' | p') = p' (q' | p').$$

Это есть дифференциальное уравнение, определяющее неизвестную функцию $(q' | p')$ от переменных q' . Общее решение этого уравнения имеет вид

$$(q' | p') = a' e^{\frac{i q' p'}{\hbar}},$$

где a' есть произвольная функция переменных p' .

Модуль этой функции можно определить из нормирующего условия

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (p' | q') dq' (q' | p'') = \delta(p' - p'').$$

Если мы положим

$$(p' | q') = \overline{(q' | p')} = \bar{a}' e^{-\frac{i q' p'}{\hbar}},$$

это даст нам уравнение

$$\bar{a}' a'' \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i q' \frac{p' - p''}{\hbar}} dq' = \delta(p' - p''),$$

где a'' имеет то значение, которое получит a' , если подставить p на место p' . Выполняя интегрирование по q' , мы получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{a' a''} \delta(p' - p'') &= \frac{i\hbar}{p' - p''} \left[e^{-i q' \frac{p' - p''}{\hbar}} \right]_{q=-\infty}^{q=\infty} = \\ &= \frac{2\hbar}{p' - p''} \left[\sin q \frac{p' - p''}{\hbar} \right]_{q=-\infty}^{q=\infty}. \end{aligned}$$

Интегрируя же обе части по p'' , мы получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{a' a'} &= 2\hbar \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin q \frac{p' - p''}{\hbar}}{p' - p''} dp'' \right]_{q=-\infty}^{q=\infty} = \\ &= 2\hbar [\pi]_{q=-\infty}^{q=\infty} = 2\pi\hbar = h. \end{aligned}$$

Итак

$$a' = h^{-\frac{1}{2}} e^{i\gamma'},$$

где γ' есть некоторая вещественная функция переменных p' , поэтому

$$(q' | p') = h^{-\frac{1}{2}} e^{i\gamma'} e^{\frac{i q' p'}{\hbar}}.$$

Выбирая надлежащим образом произвольную фазу в p -представлении, мы можем устранить фазовый множитель $e^{i\gamma'}$, после чего остается

$$(q'|p') = h^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{i q' p'}{h}} \quad (34)$$

В q -представлении нет произвольной фазы, так как она фиксирована уравнениями (27) или (30).

Результат (34) показывает, что p -представитель и q -представитель одного и того же ψ -символа связаны друг с другом соотношениями

$$\left. \begin{aligned} (p'|) &= h^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i q' p'}{h}} dq' (q'|) \\ (q'|) &= h^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i q' p'}{h}} dp' (p'|) \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

Каждый из этих представителей играет роль составляющих разложения Фурье другого представителя. Функция преобразования, связывающая n координат q_1, q_2, \dots, q_n с их канонически-сопряженными импульсами p_1, p_2, \dots, p_n , получается простым умножением в виде

$$\begin{aligned} (q_1', q_2', \dots, q_n' | p_1', p_2', \dots, p_n') &= (q_1' | p_1') (q_2' | p_2') \dots (q_n' | p_n') = \\ &= h^{-\frac{n}{2}} e^{i \frac{p_1' q_1' + p_2' q_2' + \dots + p_n' q_n'}{h}} \end{aligned} \quad (36)$$

§ 36. ОПЕРАТОР ПРОСТРАНСТВЕННОГО СМЕЩЕНИЯ.

В § 34 было показано, какой смысл следует придавать действию оператора $\frac{\partial}{\partial q_r}$ на ψ -символ.

Для этого нужно было пользоваться такими представлениями, в которых представитель q_r есть диагональная матрица. Существуют однако случаи, когда оператору $\frac{\partial}{\partial q_r}$ можно придать

смысл независимо от какого бы то ни было представления, благодаря чему этот оператор приобретает более основное значение. С таким случаем мы имеем дело, когда q_r есть относящееся к определенному моменту времени значение x одной из прямоугольных координат материальной частицы, если рассматриваемая система состоит всего лишь из одной частицы или же одной из прямоугольных координат центра тяжести механической системы, состоящей из любого количества частиц. Применение оператора $\frac{\partial}{\partial x}$ к состоянию системы связано в этом случае с операцией перемещения состояния в направлении оси x -ов, как мы сейчас покажем.

Пусть ψ_1 , обозначает состояние системы, возникающее при определенном физическом воздействии на нее. Введем теперь состояние ψ_2 , которое ничем не отличается от состояния ψ_1 , за исключением лишь того, что в момент времени t система в состоянии ψ_2 смещена по сравнению с системой в состоянии ψ_1 на расстояние δx , в направлении оси x -ов. Для строгого определения нужно предположить, что все приборы, которые воздействовали на систему, приводя ее в состояние ψ_1 , и все внешние силы, действовавшие на систему до момента времени t , смещены на расстояние δx , а внешние силы, действующие после момента времени t , остались неизменными. Состояние системы после момента времени t , однозначно определенное указанным способом, будет ψ_2 . Мы можем составить разность $\psi_2 - \psi_1$ разделить на δx и переходить к пределу при $\delta x \rightarrow 0$. Результатом этой процедуры будет некоторый ψ -символ, линейно зависящий от первоначального ψ -символа ψ_1 . Обозначим

$$\lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{\psi_2 - \psi_1}{\delta x} = d_x \psi_1,$$

где d_x есть линейный оператор, т. е.

$$d_x (\psi_1 + \psi_2) = d_x \psi_1 + d_x \psi_2$$

($\psi_1 - \psi_2$ — любые состояния). Наша операция смещения позволяет нам таким образом определить оператор смещения d_x , который, будучи линейным оператором, применимым к любому ψ -символу, может считаться наблюдаемой величиной.

Оператор смещения d_x определен не вполне однозначно, так как ψ -символ ψ_2 может быть помножен на произвольный числовой множитель. Если мы сделаем допущение, что ψ_2 имеет ту же «длину», что и ψ_1 , т. е.

$$\varphi_2 \psi_2 = \varphi_1 \psi_1,$$

то такой произвольный множитель получит вид $e^{i\gamma}$ где γ -вещественное число. Таким образом, если ψ_2^* есть другой ψ -символ, который может заменить ψ_2 , то должно существовать соотношение $\psi_2^* = e^{i\gamma} \psi_2$. Новый оператор смещения d_x^* будет определяться формулой

$$d_x \psi_1 = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{e^{i\gamma} \psi_2 - \psi_1}{\delta x} = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \left\{ \frac{\psi_2 - \psi_1}{\delta x} + \frac{e^{i\gamma} - 1}{\delta x} \psi_2 \right\} = d_x \psi_1 + ia \psi_1,$$

где a есть вещественное число, которое равно пределу отношения $\frac{\gamma}{\delta x}$ (предполагается, что этот предел существует). Итак

$$d_x^* = d_x + ia,$$

т. е. неопределенность оператора смещения заключается только в возможности прибавления произвольного чисто-мнимого числа.

Действия, посредством которых мы из любого данного ψ -символа ψ строим соответствующий ψ -символ $d_x \psi$, могут быть применимы к любому φ -символу φ ; в результате этих действий получается φ -символ $d_x \varphi$. Но ведь d_x есть наблюдаемая; поэтому можно помножить d_x на φ , результатом чего будет φ -символ φd_x . Найдем связь, существующую между $d_x \varphi$ и φd_x . Любое произведение вида $\varphi \psi$ является числом, которое должно оставаться неизменным при смещении φ и ψ на расстояние δx . Поэтому

$$d_x (\varphi \psi) = 0.$$

кооператор d_x есть по существу дифференцирование, и это позволяет нам воспользоваться обычным правилом дифференцирования произведения; мы получаем

$$(d_x \varphi) \psi + \varphi (d_x \psi) = 0.$$

Если рассматривать d_x как наблюдаемую, то мы имеем

$$\varphi (d_x \psi) = (\varphi d_x) \psi,$$

откуда

$$(d_x \varphi) \psi = -(\varphi d_x) \psi.$$

Так как это должно быть верным для любого ψ , то мы получаем требуемое соотношение

$$\varphi d_x = -d_x \varphi.$$

Этот результат аналогичен формуле (21). Это показывает, что ψ -символ, мнимо-сопряженный по отношению к $d_x \psi$, и равный, разумеется, $d_x \varphi$, в то же время равен $-\varphi d_x$; поэтому мы имеем право заключить, что d_x есть чисто-мнимая наблюдаемая, наподобие наблюдаемой π , формуле (21).

Найдем теперь соотношение между нашим новым оператором и оператором $\frac{\partial}{\partial x}$ определенным в § 34. Возьмем для этого представление, в котором координата x диагональна. Предположим, кроме того, что фаза этого представления не зависит от x , так что, когда ψ -символ смещен в направлении оси x -ов, его представитель $(x'|)$ попросту смещается на то же самое расстояние в области изменения независимой переменной x' . (Если бы фаза была произвольной, то при смещении ψ -символа его представитель мог бы измениться более сложным образом.) Представители $(x'|1)$ и $(x'|2)$ ψ -символов ψ_1 ψ_2 при этом связаны соотношением

$$(x'|2) = (x' - \delta x|1).$$

Поэтому представителем ψ -символа $d_x \varphi_1$ будет

$$\lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{(x' - \delta x|1) - (x'|1)}{\delta x} = -\frac{\partial}{\partial x'} (x'|1),$$

откуда

$$d_x = -\frac{\partial}{\partial x'} \quad (37)$$

Уравнение (37) справедливо, разумеется, только для одного из возможных операторов $\frac{\partial}{\partial x}$.

Другие возможные операторы $\frac{\partial}{\partial x}$ отличаются от d_x согласно уравнению (18). Покажем

теперь, что тот оператор $\frac{\partial}{\partial x}$, для которого справедливо уравнение (37), совпадает с тем

оператором $\frac{\partial}{\partial x}$, который в качестве наблюдаемой π_r удовлетворяет соотношению (27) или

$$p_x = -i\hbar \pi_{x_1}$$

где p_x есть импульс, канонически-сопряженный с x . Отсюда должно вытекать, что наблюдаемая d_x удовлетворяет соотношению

$$p_x = i\hbar d_x. \quad (38);$$

Доказательство основывается на том замечании, что p_x и $i\hbar d_x$, удовлетворяют одним и тем же перестановочным соотношениям. Результат смещения ψ -символа $x\psi$ на расстояние δx есть $(x - \delta x)\psi_2$, так как не только ψ_1 переходит в ψ_2 но и x в $x - \delta x$ (благодаря смещению измерительных приборов, описанному при определении смещения ψ -символа, прибор, измеривший раньше наблюдаемую x , стал прибором, измеряющим наблюдаемую $x - \delta x$). Поэтому из определения d_x следует

$$d_x x \psi_1 = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{(x - \delta x) \psi_2 - x \psi_1}{-\delta x} = x d_x \psi_1 - \psi_1.$$

Поэтому

$$d_x x - d_x x = -1.$$

Тем же самым способом можно показать, что d_x коммутирует с y, z, p_x, p_y, p_z , а также и вообще со всякой динамической переменной (в момент времени t), независимой от x . Поэтому $p_x - i\hbar d_x$ коммутирует со всеми наблюдаемыми и следовательно является числом. Мы можем взять это число равным нулю, так как в определении d_x появляется произвольная аддитивная постоянная; таким образом получается соотношение (38).

Это соотношение, связывающее наш оператор смещения d_x с импульсом p_x , представляет собою новый способ выражения квантовых условий (12) или (27) в применении к центру тяжести механической системы; эта новая формулировка квантовых условий является, быть может, наиболее глубокой из всех, так как она позволяет особенно отчетливо увидеть лежащую в ее основании физическую гипотезу. По общности и простоте формулы (38) она могла бы сама по себе служить правдоподобным исходным пунктом при построении квантовых условий, совершенно независимо от того, что она же выводится и из уравнений (12), написанных по аналогии с классической теорией; кроме того формула (38) правдоподобна и потому, что она непосредственно приводит к закону сохранения количества движения. Когда на систему не действуют внешние силы, то из определения d_x видно, что d_x не зависит от времени t . Уравнение (38) показывает тогда, что импульс не зависит от t и следовательно является постоянным.

§ 37. ОПЕРАТОР СМЕЩЕНИЯ ВО ВРЕМЕНИ.

По аналогии с оператором пространственного смещения d_x , о котором шла речь в предыдущем параграфе, можно ввести и оператор смещения во времени d_t . Определение этого оператора таково: пусть ψ_1 будет некоторый ψ -символ; предполагая, что все приборы, помощью которых наша механическая система приводилась в состояние ψ_1 , вступали в действие на δx позже и кроме того все действовавшие на систему внешние силы запаздывали на δt , мы получаем смещенный во времени ψ -символ ψ_2 . Этот символ обозначает состояние системы, наступающее после момента времени t . Предел отношения $\frac{\psi_2 - \psi_1}{\delta t}$ обозначается

через $d_t \psi_1$. При этом можно считать d_t наблюдаемой; так же как и в случае d_x , можно показать, что d_t есть чисто-мнимая наблюдаемая и что она определена совершенно

однозначно, не считая возможности прибавления произвольной чисто-мнимой числовой постоянной.

С помощью наблюдаемой d_t мы выведем уравнения движения системы. При этом мы сможем установить вид этих уравнений, не прибегая нигде к классическим аналогиям. Введем вещественную наблюдаемую H с помощью определения

$$-i\hbar d_t = H. \quad (40)$$

Для любого ψ мы имеем

$$H\psi = -i\hbar d_t \psi. \quad (41)$$

Если взять какую угодно наблюдаемую ξ , представляющую значение некоторой динамической переменной в момент времени t , и применить формулу (41) к ψ -символу $\xi\psi$, то получится

$$H\xi\psi = -i\hbar d_t \xi\psi.$$

Правую часть этого равенства можно вычислить тем же самым способом, каким было выведено соотношение (39), или же более непосредственным способом, основанным на том, что к оператору d_t применимо обычное правило дифференцирования произведения. Это дает

$$H\xi\psi = -i\hbar (d_t \xi)\psi = -i\hbar \xi (d_t \psi).$$

Легко видеть, что $d_t \xi$ есть нечто иное, как обыкновенная производная по времени от т. е. ξ , т.е. ξ . Этот результат противоположен тому, который получается в случае оператора d_x , а именно $d_x \xi = -\frac{\partial \xi}{\partial x}$. Таким образом получается

$$H\xi\psi = -i\hbar \dot{\xi}\psi + \xi H\psi,$$

откуда

$$i\hbar \dot{\xi} = \xi H - H\xi.$$

Это уравнение совпадает с (13), но только H обозначает здесь не обычную функцию Гамильтона, а оператор, определением которого является формула (40).

Приведенные рассуждения имеют весьма общий смысл и показывают, что уравнения движения любой механической системы могут быть написаны с помощью функции Гамильтона в форме (13), независимо от того, имеется ли аналог этой системы в классической механике и можно ли описать ее канонически-сопряженными координатами и импульсами. Поэтому в квантовой механике динамические переменные, описывающие общую механическую систему, могут удовлетворять каким угодно перестановочным соотношениям, причем существует оператор Гамильтона, являющийся вещественной функцией этих переменных. Обобщая еще дальше, мы можем иметь дело с системой, у которой оператор Гамильтона не может быть выражен в виде аналитической функции динамических переменных и может быть задан только через посредство своего представителя в каком-либо специальном представлении, причем этот представитель может быть какой угодно эрмитовской матрицей. Пример системы этого рода встретится в задаче о взаимодействии фотона с атомом (глава XII).

По аналогии с уравнением (37) докажем равенство

$$d_t = -\frac{\partial}{\partial t}$$

Сперва необходимо дать определенный смысл применению оператора $\frac{\partial}{\partial x}$ к ψ -символу. Это

можно сделать посредством представления, в котором оказываются диагональными наблюдаемые $q_{1t}, q_{2t}, \dots, q_{nt}$, образующие полную систему коммутирующих друг с другом наблюдаемых; при этом под $q_{1t}, q_{2t}, \dots, q_{nt}$ подразумеваются значения в момент времени t некоторых динамических переменных q_1, q_2, \dots, q_n (необязательно требовать, чтобы существовали канонически-сопряженные с ними импульсы p_1, p_2, \dots, p_n). Представитель ψ -символа ψ будет функцией n переменных $q'_{1t}, q'_{2t}, \dots, q'_{nt}$, причем вид этой функции зависит, вообще говоря, от момента времени t . Поэтому можно считать этот представитель функцией $n+1$ переменной $q'_{1t}, q'_{2t}, \dots, q'_{nt}, t$ и взять частную производную от этой функции по t ; то, что получится в результате этого дифференцирования, можно считать представителем ψ -символа

$\frac{\partial \psi}{\partial t}$. Таким образом мы получаем общее определение оператора $\frac{\partial}{\partial t}$. С этим определением связана, разумеется, значительная доля неопределенности не только вследствие произвольных фаз представления, но и вследствие того, что диагональными можно сделать различные системы динамических переменных q , и это, вообще говоря, будет приводить каждый раз к другому результату. Но нас интересует только один из этих возможных операторов $\frac{\partial}{\partial t}$, а именно тот, который получится, когда фазы представления не зависят явно от t , так что при смещении состояния во времени на δt представитель в представлении $q_{t+\delta t}$ в смещенном состоянии таким же образом зависит от переменных $q'_{t+\delta t}$, как представитель в представлении q_t в несмещенном состоянии от переменных q'_t . Поэтому для получения q_t -представителя в смещенном состоянии нужно заменить t на $t - \delta t$ в q_t -представителе в несмещенном состоянии, рассматриваемом как функция $n+1$ переменных $q'_1, q'_2, \dots, q'_n, t$. Это совершенно аналогично тому, с чем мы имеем дело в случае пространственного смещения вдоль оси x -ов; поэтому и получается Формула (42) по аналогии с (37). Формула (42) показывает, что оператор $\frac{\partial}{\partial t}$ определенный с помощью представления, фазы которого не зависят явно от t , независим от того, какие именно наблюдаемые q диагональны в данном представлении. Если некоторое представление дает оператор $\frac{\partial}{\partial t}$ удовлетворяющий соотношению (42), то мы можем получить другое такое же представление с помощью любого канонического преобразования при условии, что функция преобразования не содержит времени t .

Из (41) и (42) следует

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi. \quad (43)$$

Можно считать уравнение (43) новой формой выражения уравнения движения системы. Если написать это уравнение с помощью представителей, то получится:¹

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (q'_i) = \int (q'_i | H | q'_r | dq'_r (q'_r), \quad (44)$$

т. е. уравнение, из которого можно вывести, каким образом зависит от времени t представитель состояния (q'_i) , рассматриваемый как функция $n+1$ переменных $q'_1, q'_2, \dots, q'_n, t$. Если существуют импульсы p_r канонически-сопряженные с координатами q_r , то уравнение (44) превращается попросту в дифференциальное уравнение

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (q'_i) = H\left(q'_i, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q'_i}\right) (q'_i). \quad (45)$$

Это уравнение найдено Шредингером и известно под названием волнового уравнения Шредингера. Оно оказывается очень полезным в применениях квантовой механики, так как его решения имеют непосредственный физический смысл: квадрат абсолютной величины решения дает для любого момента времени вероятность того, что координаты q в заданном состоянии системы имеют определенные значения. Уравнение Шредингера названо волновым потому, что во многих элементарных примерах, которые будут приведены в следующей главе, его решения имеют вид волн, распространяющихся в q - пространстве. По той же причине решения уравнения (45) называются волновыми функциями, даже и в тех случаях, когда у них нет ни малейшего сходства с волнами.

Если функция Гамильтона не содержит времени явно, волновое уравнение в виде (45) или в более общем виде (44) будет иметь решения, периодически изменяющиеся во времени согласно закону

$$(q') = (q')_0 e^{-i \frac{Wt}{\hbar}}, \quad (46)$$

¹ Для определенности мы выбрали случай непрерывных q' . В случае дискретных q' необходимо внести в обозначения обычные изменения.

где W' есть число и где $(q')_0$ не зависит от t . Уравнение, которому должна удовлетворять функция $(q')_0$, имеет вид

$$W'(q')_0 = \int (q' | H | q'') dq'' (q'')_0 = H\left(q', -i\hbar \frac{\partial}{\partial q'}\right) (q')_0.$$

Но это уравнение есть не что иное, как уравнение для определения собственных значений наблюдаемой H : от уравнения (29) оно отличается лишь тем, что вместо H написано f . Итак W' есть собственное значение наблюдаемой H или уровень энергии механической системы; $(q')_0$ есть собственная функция оператора H .

§ 38. МАТРИЦЫ ГЕЙЗЕНБЕРГА.

В предыдущем параграфе мы имели дело с q_t -представлением, которое определяется наблюдениями q_t т. е. значениями динамических переменных q в момент времени t . Мы видели, что надлежащий выбор фаз представления приводит к уравнению Шредингера (44) или (45); такое представление мы будем называть представлением Шредингера. Условие, которому должны удовлетворять фазы, таково, что при смещении состояния системы на расстояние δ_t во времени зависимость $q_{t-\delta}$ -представителя смещенного состояния от его переменных $q_{t-\delta}$ оказывается такой же самой, как зависимость q_t -представителя несмещенного состояния от его переменных q'_t . Аналогичному условию должны подчиняться также и наблюдаемые. Если ξ_t есть наблюдаемая, которая является значением динамической переменной ξ в момент времени t , то существующей смещенной наблюдаемой будет $\xi_{t-\delta}$. Тогда $q_{t-\delta}$ -представитель смещенной наблюдаемой, т. е. $(q'_{t+\delta} | \xi_{t+\delta} | q''_{t+\delta})$, будет таким же образом зависеть от своих переменных $q'_{t-\delta}$, $q''_{t-\delta}$, как q_t -представитель несмещенной наблюдаемой, т. е. $(q'_t | \xi_t | q''_t)$, зависит от своих переменных q'_t , q''_t . Это попросту обозначает, что вид функции $(q'_t | \xi_t | q''_t)$ переменных q'_t , q''_t не зависит от t . Можно выразиться и еще короче, а именно что шредингеровский представитель наблюдаемой ξ_t не зависит от t .

Если нужно выбрать представление для наблюдаемых величин, то шредингеровское представление, вообще говоря, оказывается неудобным, так как оно относится к определенному моменту времени t и дает простых представителей только тем наблюдаемым ξ_t , которые относятся к этому моменту времени. Удобным представлением было бы такое, которое не имеет отношения к какому бы то ни было определенному моменту времени, так что наблюдаемые ξ_{t_1} , η_{t_2} , ..., относящиеся к различным моментам времени t_1 , t_2 , ..., могут быть представлены одновременно и трактоваться совершенно одинаково. В таком представлении должно быть

$$\left(\alpha' \left| \frac{d}{dt} \right| \alpha'' \right) = \frac{d}{dt} \left(\alpha' \left| \xi_t \right| \alpha'' \right). \quad (47)$$

Легко получить такое представление в том случае, когда функция Гамильтона не содержит времени явно. В более общем случае это не так легко сделать, и потому такое представление тогда не очень полезно.

Если H не содержит времени явно, то в качестве наблюдаемых α , которые в нашем представлении диагональны, мы можем взять полную систему коммутирующих друг с другом наблюдаемых, являющихся константами движения. Тогда H будет коммутировать со всеми α и будет их функцией; ее представителем будет диагональная матрица,

$$(\alpha' | H | \alpha'') = H'_{\alpha' \alpha''},$$

где H' написано вместо $H(\alpha')$ для краткости. При этом представление не будет зависеть от t (если только фазы не зависят от t), так что уравнение (47) должно соблюдаться. Зависимость матричных элементов ξ_t от t очень проста. Из уравнения движения (13) мы находим

$$i\hbar (\alpha' | \dot{\xi} | \alpha'') = (\alpha' | \xi | \alpha'') H' - H' (\alpha' | \xi | \alpha''),$$

откуда на основании уравнения (47) вытекает

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\alpha' | \xi | \alpha'') = - (H' - H'') (\alpha' | \xi | \alpha'').$$

Поэтому зависимость $(q' | \xi | q'')$ от t имеет вид

$$(\alpha' | \xi | \alpha'') = (\alpha' | \xi | \alpha'')_0 e^{i \frac{(H' - H'')t}{\hbar}}, \quad (48)$$

где $(q' | \xi | q'')_0$ не зависит от t . Искомая зависимость оказалась периодической зависимостью с частотой

$$\frac{|H' - H''|}{2\pi\hbar} = \frac{|H' - H''|}{h}. \quad (49)$$

Матричная схема, в которой функция Гамильтона диагональна, а матричные элементы меняются со временем согласно формуле (48), была найдена Гейзенбергом в 1925 г. и явилась исторически первой формой квантовой механики.

Диагональный элемент $(q' | \xi | q'')$ от времени не зависит. Этот диагональный элемент является средним значением наблюдаемой ξ в состоянии $\psi(\alpha')$ т. е. в одном из основных состояний рассматриваемого представления. Итак в каждом основном состоянии $\psi(\alpha')$ среднее значение любой динамической переменной ξ есть постоянная величина. Вероятность того, что ξ имеет то или иное значение, также постоянна, так как эта вероятность определяется средними значениями некоторых функций этой динамической переменной. Поэтому каждое основное состояние $\psi(\alpha')$ является стационарным состоянием в смысле того определения, которое было дано в § 3. Основные состояния гейзенберговского представления суть стационарные состояния. Любое собственное состояние функции Гамильтона H может быть принято в качестве основного состояния гейзенберговского представления, а следовательно является стационарным состоянием.

Матрицы гейзенберговского представления хорошо гармонируют с теми „наглядными“ (anschaulich) формами теории квант, которые существовали до появления квантовой механики, в частности с атомной теорией Бора. Основными состояниями гейзенберговского представления являются боровские стационарные состояния (в действительности, разумеется, они стационарны лишь постольку, поскольку можно пренебречь взаимодействием атома с излучением); собственные значения функции Гамильтона H — это по существу то же самое, что энергетические уровни Бора. Отсюда следует, что частота (49) матричного элемента, относящегося к двум состояниям α' и α'' , есть не что иное, как частота кванта лучистой энергии, который, согласно теории Бора, поглощается или испускается, когда атом перепрыгивает из одного состояния в другое; это и предположил Гейзенберг в своей первой работе по квантовой механике. Возникает разительное соответствие между элементами матрицы, представляющей любую динамическую переменную, и членами разложения этой переменной в ряд Фурье в классической теории кратно-периодических систем. Это соотношение привело Гейзенберга к гипотезе, что спонтанное испускание лучистой энергии атомной системой в квантовой теории может быть вычислено из классической формулы, если подставить в эту формулу матричные элементы вместо соответствующих членов разложения результирующего электрического момента системы в ряд Фурье. Согласно этой гипотезе, система, обладающая электрическим моментом \mathbf{D} (жирными буквами мы обозначаем векторы), будет в состоянии α' испускать в единицу времени лучистую энергию частоты $\nu = \frac{H' - H''}{h}$ в количестве, равном

$$\frac{4}{3} \frac{(2\pi\nu)^4}{c^3} |(\alpha' | \mathbf{D} | \alpha'')|^2. \quad (50)$$

¹ Основанный на классической теории расчет испускания лучистой энергии системой зарядов, обладающей полным зарядом, равным нулю, и переменным электрическим моментом \mathbf{D} , производится проще всего следующим образом: считая, что вся эта система обладает ничтожными размерами, поместим ее в начале координат и напишем для скалярного и векторного потенциалов на расстоянии r от излучающей системы обычные выражения

$$V = 0, \mathbf{A} = \frac{1}{rc} \left(\frac{d\mathbf{D}}{dt} \right)_{t - \frac{r}{c}}$$

Для электрического и магнитного поля получается

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\frac{1}{rc^2} \left(\frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right)_{t - \frac{r}{c}}$$

$$\mathbf{H} = \text{curl } \mathbf{A} = \frac{1}{r^2 c^2} \left(\frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right)_{t - \frac{r}{c}} \times \mathbf{r} + \frac{1}{cr^3} \left(\frac{d\mathbf{D}}{dt} \right)_{t - \frac{r}{c}} \times \mathbf{r}$$

где \mathbf{r} есть радиус-вектор, соединяющий начало координат с точкой, в которой вычисляется электромагнитное поле. На больших расстояниях от начала координат можно пренебречь вторым членом в выражении магнитного поля по сравнению с первым, и это дает

$$\mathbf{E} \times \mathbf{H} = -\frac{1}{r^3 c^4} \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \times \left(\frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \times \mathbf{r} \right),$$

где для краткости мы опускаем указание, что $\frac{d^2 D}{dt^2}$ относится к моменту времени $t - \frac{r}{c}$. Вычисляя, получаем

$$\mathbf{E} \times \mathbf{H} = \frac{\mathbf{r}}{r^3 c^4} \left| \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right|^2 - \frac{1}{r^3 c^4} \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \left(\frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \cdot \mathbf{r} \right).$$

Проекция вектора $\mathbf{E} \times \mathbf{H}$ на направление радиуса вектора равна поэтому

$$(\mathbf{E} \times \mathbf{H})_r = \frac{1}{r^3 c^4} \left| \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right|^2 - \frac{1}{r^3 c^4} \left(\frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \cdot \mathbf{r} \right)^2.$$

Теперь уже легко вычислить поток энергии, который должен быть равен интегралу этой величины, распространенному на поверхности шаре радиуса r . Поток энергии равен

$$\frac{c}{4\pi} \int (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_r r^2 d\omega = \frac{c}{4\pi} \left[\frac{4\pi}{c^4} \left| \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right|^2 - \frac{1}{r^2 c^4} \int \left(\frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \cdot \mathbf{r} \right)^2 d\omega \right],$$

где $d\omega$ обозначает дифференциал телесного угла. Если провести полярную ось, совпадающую по направлению с вектором $\frac{d^2 D}{dt^2}$, и отсчитывать от нее углы θ , то будет $d\omega = 2\pi \sin \theta d\theta$, откуда следует, что поток энергии равен

$$\frac{1}{c^3} \left| \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right|^2 - \frac{1}{2c^3} \left| \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right|^2 \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta$$

или окончательно

$$\frac{2}{3c^3} \left| \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right|^2_{t - \frac{r}{c}}$$

Таково количество лучистой энергии, испускаемой в единицу времени. Так как на практике мы всегда имеем дело со средними величинами за промежуток времени большой по сравнению с периодом изменения электрического момента системы, то вместо этого следует писать

$$\frac{2}{3c^3} \overline{\left| \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right|^2}$$

(чертой наверху обозначена средняя во времени). Если вектор \mathbf{D} является периодической функцией времени с частотой ν , то он может быть представлен в виде ряда Фурье

$$\mathbf{D} = \sum_k \mathbf{D}_k e^{2\pi i k \nu t}, \quad (k = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots),$$

где \mathbf{D}_k и \mathbf{D}_{-k} являются комплексно-сопряженными векторами. Отсюда следует

$$\left| \frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right|^2 = \sum_k (2\pi \nu)^4 (k\nu)^2 (\mathbf{D}_k \cdot \mathbf{D}_k) e^{2\pi i k(k+d)\nu t}$$

При переходе к среднему мы найдем, что

$$\overline{\left(\frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right)^2} = \sum_k (2\pi \nu)^4 k^4 (\mathbf{D}_k \cdot \mathbf{D}_{-k}) \quad (k = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots)$$

или

$$\overline{\left(\frac{d^2 \mathbf{D}}{dt^2} \right)^2} = 2 \sum_k (2\pi \nu)^4 k^4 |\mathbf{D}_k|^2 \quad (k = 1, 2, 3, \dots).$$

Поэтому испускаемая в единицу времени лучистой Энергия равна

$$\frac{64\pi^4}{3c^3} \sum_k (k\nu)^4 |\mathbf{D}_k|^2 \quad (k = 1, 2, 3, \dots).$$

Классический спектр состоит из частот $\nu, 2\nu, 3\nu, \dots$, причем на частоту $k\nu$ приходится испускание энергии

$$\frac{64\pi^4}{3c^3} (k\nu)^4 |\mathbf{D}_k|^2.$$

Руководясь принципом соответствия, Гейзенберг заменил в этой формуле классическую частоту $k\nu$ квантовой частотой $\nu = \frac{H' - H''}{h}$, коэффициент Фурье \mathbf{D}_k матричным элементом $(\alpha' | D | \alpha'')$. Таково происхождение формулы

(50).

Примечание переводчика.

$[H''$ или $H(\alpha'')$ есть энергетический уровень состояния α'' , причем - предполагается, что это более глубокий уровень, чем H]. Кроме того и распределение этой испускаемой лучистой энергии по направлениям, а также состояние поляризации излучения, испущенного в каждом данном направлении, должно быть таким же самым, как в случае классического электрического диполя с моментом

$$(\alpha' | \mathbf{D} | \alpha'') + (\alpha'' | \mathbf{D} | \alpha'),$$

Для того, чтобы истолковать в духе теории Бора понятие количества лучистой энергии, испускаемой в единицу времени, разделим выражение (50) на квант энергии соответствующей частоты, т. е. на $h\nu$, и назовем частное от этого деления вероятностью того, что в течение единицы времени будет испущен квант $h\nu$ с одновременным переходом атомной системы в состояние с меньшей энергией (состояние α''). В главе XII, в которой будет изложена квантовая теория взаимодействия атомной системы с излучением, эти допущения Гейзенберга получат свое оправдание.

Изменив в гейзенберговском представлении фазы, мы можем перейти к шредингеровскому представлению с теми же самыми диагональными α . Найдем соотношение между фазами обоих этих представлений. В шредингеровском представлении представитель любого состояния будет удовлетворять волновому уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\alpha' |) = \sum_{\alpha''} (\alpha' | H | \alpha'') (\alpha'' |) = H' (\alpha' |),$$

которое в данном случае может быть непосредственно проинтегрировано; это даст

$$(\alpha' |) = (\alpha' |)_0 e^{-i \frac{H' t}{\hbar}}$$

где $(\alpha' |)_0$ не зависит от t . С другой стороны представитель состояния в гейзенберговском представлении не будет зависеть от t так как это Представление и также, разумеется, это состояние никак не зависят от t . Поэтому фазы шредингеровского представления отличаются

множителем $e^{-i \frac{H' t}{\hbar}}$ от фаз гейзенберговского представления; к тому же заключению мы могли прийти иным путем, сопоставляя формулу (48) с тем фактом, что шредингеровский представитель наблюдаемой ζ_t не зависит от t . Итак существует различие между фазами гейзенберговского представления, которые совершенно не зависят от t , и фазами шредингеровского представления, которые не содержат t явно. Такое свойство фаз шредингеровского представления обозначает попросту то, что любая матрица в этом представлении является представителем некоторой функции динамических переменных, не содержащей t явно.

VII. ПРОСТЕЙШИЕ ПРИМЕНЕНИЯ.

§ 39. СВОБОДНАЯ ЧАСТИЦА.

В этой главе мы рассмотрим с точки зрения квантовой механики несколько простых примеров механических систем. Простейшим примером является система, состоящая из одной частицы, свободно движущейся в пространстве. В качестве переменных описывающих эту систему мы возьмем три декартовы координаты x, y, z и канонически сопряженные с ними импульсы p_x, p_y, p_z . Если принять, во внимание вытекающую из принципа относительности зависимость массы частицы от ее скорости, то гамильтонова функция классическом механики будет иметь вид

$$H = c \sqrt{m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}, \quad (1)$$

где m обозначает массу частицы в состоянии покоя, c - скорость света, а знак радикала обозначает положительный квадратный корень.

Эту гамильтонову функцию можно взять и для квантовой механики, если придать положительному квадратному корню смысл, указанный в § 16 (это всегда можно сделать, так как все собственные значения наблюдаемой $m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ положительны).

Составляющие количества движения $p_x, p_y,$ и p_z коммутируют с H и поэтому являются постоянными, как и в классической механике. Далее, координаты x, y, z удовлетворяют уравнениям

$$\dot{x} = [x, H] = \frac{c^2 p_x}{H}, \quad \dot{y} = \frac{c^2 p_y}{H}, \quad \dot{z} = \frac{c^2 p_z}{H}, \quad (2)$$

т. е. совершенно таким же уравнениям, как в классической теории. В квантовой механике можно проверить эти уравнения, применяя формулу (16) из § 34,¹ каковая формула справедлива и для тех функций, которые не могут быть разложены в степенные ряды, как это и было указано в конце § 34. Но для общего доказательства этой формулы потребовалось применить теорию представлений. Любопытно заметить, что уравнения (2) можно вывести с помощью одних лишь абстрактных символов, совершенно не применяя представлений.

Это делается так: непосредственно применяя квантовые условия, получаем:

$$xH^2 - H^2x = c^2(xp_x^2 - p_x^2x) = 2i\hbar c^2 p_x \quad (3)$$

или

$$(xH - Hx)H + H(xH - Hx) = 2i\hbar c^2 p_x \quad (4)$$

Но H коммутирует с p_x , а потому из (3) следует

$$(xH^2 - H^2x)H - H(xH^2 - H^2x) = 0,$$

откуда получается

$$(xH - Hx)H^2 - H^2(xH - Hx) = 0.$$

Теперь мы должны воспользоваться тем условием, что $(m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{\frac{1}{2}}$, будучи по определению квадратным корнем из $m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ коммутирует со всеми наблюдаемыми, которые коммутируют с $m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$, иными словами H

¹ Вместо формулы (16) в § 34 удобнее взять формулу $f q_r - q_r f = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial p_r}$, которая получается из (16) заменой

p на q , q на p и \hbar на $-\hbar$ (квантовые условия при такой перемене остаются неизменными, а значит и все следствия из них тоже).

Эту последнюю формулу можно писать в виде $[q_r, f] = \frac{\partial f}{\partial p_r}$. Положив $q_r = x$,

$p_r = p_x$, $f = H = c(m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{\frac{1}{2}}$ мы получим $[x, H] = -\frac{\partial H}{\partial p_x}$. Но из

$H^2 = c^2(m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ следует $H \frac{\partial H}{\partial p_x} = c^2 p_x$, откуда $[x, H] = \frac{c^2 p_x}{H}$

Примечание переводчика.

коммутирует со всеми наблюдаемыми, коммутирующими с H^2 . Мы видели, что H^2 коммутирует с $xH-Hx$, поэтому и H должно коммутировать с $xH-Hx$. Следовательно, из формулы (4) вытекает

$$xH - Hx = \frac{i\hbar c^2 p_x}{H},$$

т. е. первое из уравнений (2). Перед нами иллюстрация того факта, что любой результат, который можно получить с помощью представления, может быть выведен также из одних лишь абстрактных символов без всякого применения представлений, но метод представлений может оказаться более удобным и более быстрым.

Уравнение Шредингера для функции Гамильтона (1) имеет вид:¹

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (x) = c \left\{ m^2 c^2 - \hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} (x),$$

где x в выражении (τ) обозначает x, y, z . В правой части уравнения стоит квадратный корень из оператора, содержащего $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$, каковой квадратный корень не может быть выражен в

виде ряда, применимого ко всем значениям собственных чисел наблюдаемых p_x, p_y, p_z , т. е. ко всему промежутку от $-\infty$ до $+\infty$. Для того, чтобы придать смысл такой функции оператора, нужно посредством канонического преобразования перейти к такому представлению, в котором соответствующая этому оператору наблюдаемая диагональна; в этом случае функция получит тот смысл, о котором шла речь в § 15.

Однако наш пример настолько прост, что все это оказывается излишним. Мы можем сразу выписать решения уравнений (5), а именно:

$$(x) = \frac{a \exp i (p_x' x + p_y' y + p_z' z - W' t)}{h}, \quad (6)$$

где p_x', p_y', p_z', W' суть числа, удовлетворяющие условию

$$W'^2 = c^2 (m^2 c^2 + p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2), \quad W' > 0,$$

и где a — любое число. Общее решение уравнения (5) может быть представлено в виде суммы или интеграла решений типа (6)

Состояние, представителем которого служит (6), является собственным состоянием для составляющих количества движения; оно принадлежит собственным значениям p_x', p_y', p_z' . Соответствующим значением энергии является W' . Представитель (6) имеет, в самом деле, такой же самый вид, как функция преобразования (36) в § 35. Таким образом состояние частицы, свободно движущейся в пространстве с заданным количеством движения, представлено плоскими волнами типа (6), причем направление движения волн определяется числами p_x', p_y', p_z' , т. е. количеством движения частицы. Вероятность найти частицу в момент времени t в любом заданном объеме $dx dy dz$ пропорциональна выражению $|(x)|^2 dx dy dz$ и следовательно не зависит от того, где этот объем расположен. Длина волны λ определяется из уравнения

$$\lambda = \frac{h}{(p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2)^{\frac{1}{2}}} = \frac{h}{P'}, \quad (7)$$

где P' есть величина количества движения частицы; частота тех же самых волн равна

$$\nu = \frac{W'}{h}.$$

Повтому их скорость распространения и равна

$$u = \lambda \nu = \frac{W'}{P'} = \frac{c^2}{v},$$

где v — скорость самой частицы.

Тот факт, что скорость распространения воли и скорость частицы имеют одно и то же направление и связаны соотношением (9), конечно, имеет место во всякой лоренцовой

¹ Независимые переменные в выражении волновой функции написаны без штрихов. Это допускается в тех случаях, когда из-за этого не возникает путаницы.

системе отсчета.¹ Именно эта релятивистская инвариантность впервые и заставила де Бройля, еще перед открытием квантовой механики, допустить существование волн типа (6), связанных с движением частицы; эти волны должны были управлять частицами таким же точно образом, как световые волны управляют фотонами. От свободных частиц можно перейти к фотонам, положив m , т. е. массу в состоянии покоя, равной нулю. Волны (6) при этом становятся световыми волнами, связанными с фотоном, если отвлечься от поляризации и от того факта, что вместо синуса или косинуса в выражение (6) входит комплексная показательная функция.

§ 40. ВОЛНОВЫЕ ПАКЕТЫ.

Налагая друг на друга множество решений типа (6) с различными значениями количества движения p' , близкими к некоторому заданному значению этого вектора, можно получить решение, которое в каждый момент времени исчезает (приближенно) во всех точках пространства за исключением некоторой конечной области. Внутри этой области длина волны приблизительно одинакова, в соответствии с заданным значением p' . Такое решение образует группу волн или волновой пакет. Скорость V такого волнового пакета не равна скорости распространения волн, но имеет то же самое направление и определяется гидродинамическим выражением групповой скорости

$$V = \frac{dv}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)}$$

С помощью формул (7) и (8) отсюда вытекает

$$V = \frac{dW'}{dP'} = c \cdot \frac{d}{dP'} (m^2 c^2 + P'^2)^{\frac{1}{2}} = \frac{c^2 P'}{W'} = v.$$

Итак групповая скорость равна скорости частицы.

Этот важный результат был впервые получен де Бройлем. Он может быть широко обобщен. Если дана механическая система с функцией Гамильтона $H(q, p)$, причем $H(q, p)$ есть какая угодно функция переменных q и p , то уравнение Шредингера будет иметь решения состоящие из волновых пакетов, движущихся вдоль траекторий классической механики, если только можно считать постоянную Планка h величиной настолько малой, что членами

¹ Лоренцовыми системами отсчета называются такие координатные системы, в которых соблюдается закон инерции и то условие, что скорость света в пустоте одинакова по всем направлениям и равна универсальной постоянной c .

Примечание переводчика.

² Формула для групповой скорости выводится следующим образом: пусть волновая функция $f(x, y, z, t)$ представлена в виде наложенных друг на друга решений типа (6), т. е. Выражена интегралом Фурье

$$f(x, y, z, t) = \iiint a_{\alpha\beta\gamma}(t) e^{2\pi i \left(\frac{\alpha x + \beta y + \gamma z}{h} - \nu t \right)} dx d\beta d\gamma,$$

где ν написана вместо $\frac{W'}{h}$. Мы предположим, что ν является функцией одной переменной

$$\frac{1}{h} = \frac{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2}}{h}, \text{ где } \lambda - \text{длина волны.}$$

Отсюда следует

$$\frac{d\nu}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)} = \frac{h^2}{\lambda\alpha} \frac{\partial\nu}{\partial\alpha} = \frac{h^2}{\lambda\beta} \frac{\partial\nu}{\partial\beta} = \frac{h^2}{\lambda\gamma} \frac{\partial\nu}{\partial\gamma}.$$

Ограничиваясь малыми первого порядка, мы можем писать

$$f(x, y, z, t+dt) = \iiint \left[a_{\alpha\beta\gamma}(t) + \frac{da_{\alpha\beta\gamma}(t)}{dt} dt \right] e^{2\pi i \left(\frac{\alpha x + \beta y + \gamma z}{h} - \nu t \right)} (1 - 2\pi i \nu dt) dx d\beta d\gamma$$

Попробуем представить то же самое выражение в виде

$$\begin{aligned} & \iiint a_{\alpha\beta\gamma}(t) e^{2\pi i \left[\frac{\alpha(x-dx) + \beta(y-dy) + \gamma(z-dz)}{h} - \nu t \right]} dx d\beta d\gamma = \\ & = \iiint a_{\alpha\beta\gamma}(t) e^{2\pi i \left(\frac{\alpha x + \beta y + \gamma z}{h} - \nu t \right)} \left[1 - \frac{2\pi i}{h} (\alpha dx + \beta dy + \gamma dz) \right] dx d\beta d\gamma, \end{aligned}$$

где снова мы пренебрегли малыми величинами второго порядка. Сравнивая оба интеграла, мы получаем

$$-\frac{2\pi i}{h} a_{\alpha\beta\gamma}(t) \left(\alpha \frac{dx}{dt} + \beta \frac{dy}{dt} + \gamma \frac{dz}{dt} \right) = \frac{da_{\alpha\beta\gamma}(t)}{dt} - 2\pi i \nu a_{\alpha\beta\gamma}(t).$$

уравнений, содержащим ее в качестве множителя, можно пренебречь. Доказательство этого утверждения таково: уравнение Шредингера имеет вид:

$$V = \frac{dW'}{dP'} = c \frac{d}{dP'} (m^2 c^2 + P'^2)^{\frac{1}{2}} = \frac{c^2 P'}{W'} = v. \quad (10)$$

Выразим функцию Шредингера (q) в виде волны

$$(q) = e^{i \frac{S}{\hbar}} A,$$

Функция

$$\Psi_{\alpha\beta\gamma}(x, y, z, t) = a_{\alpha\beta\gamma}(t) e^{2\pi i \left(\frac{\alpha x + \beta y + \gamma z}{h} - \nu t \right)}$$

должна удовлетворять дифференциальному уравнению распространения гели

$$\frac{2\pi i}{\lambda^2 \nu} \frac{\partial}{\partial t} + \Delta = 0$$

которое даст

$$\frac{da_{\alpha\beta\gamma}(t)}{dt} - 2\pi i \nu a_{\alpha\beta\gamma}(t) = -2\pi i \nu a_{\alpha\beta\gamma}(t).$$

откуда

$$\alpha \frac{dx}{dt} + \beta \frac{dy}{dt} + \gamma \frac{dz}{dt} = h\nu.$$

Дифференцируя обе части по α, β, γ и пользуясь выведенными выше формулами

$\frac{\partial \nu}{\partial x} = \frac{\lambda \alpha}{h^2} \frac{dx}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)}$, мы получим для составляющих групповой скорости V по координатным

осям выражения

$$\frac{dx}{dt} = \alpha \frac{\lambda}{h} \frac{d\nu}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)}, \quad \frac{dy}{dt} = \beta \frac{\lambda}{h} \frac{d\nu}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)}, \quad \frac{dz}{dt} = \gamma \frac{\lambda}{h} \frac{d\nu}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)}$$

откуда $V = \frac{dx}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)}$ и $\frac{dx}{dt} : \frac{dy}{dt} : \frac{dz}{dt} = \alpha : \beta : \gamma$ Так как скорость распространения волны имеет

составляющие по осям, равные $\frac{y\lambda^2}{R}\alpha$, $\frac{y\lambda^2}{h}\beta$, $\frac{y\lambda^2}{h}\gamma$, то направление групповой скорости совпадает с направлением скорости волн

Примечание переводчика.

где A и S - вещественные функции от q , причем A играет роль амплитуды, а S - роль фазы. Действие оператора $-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r}$ на (q) принимает вид

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r} (q) = e^{i \frac{S}{\hbar}} \left(\frac{\partial S}{\partial q_r} - i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r} \right) A, \quad (11)$$

а действие оператора $i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r}$ может быть записано в форме

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r} (q) = e^{i \frac{S}{\hbar}} \left(-\frac{\partial S}{\partial q_r} + i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r} \right) A.$$

Если f есть любая функция операторов $i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r}$ которую можно выразить степенным рядом, то, применяя многократно формулу (11), легко доказать, что

$$f \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r} \right) (q) = e^{i \frac{S}{\hbar}} f \left(\frac{\partial S}{\partial q_r} - i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r} \right) A.$$

По удалении множителя $e^{i \frac{S}{\hbar}}$ - формула (10) приобретает вид

$$\left(-\frac{\partial S}{\partial t} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) A = H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q} - i\hbar \frac{\partial}{\partial q}\right) A. \quad (12)$$

Правая часть, рассматриваемая как функция одних лишь

$$\frac{\partial S}{\partial q} - i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$$

может быть разложена по теореме Тэйлора в степенной ряд относительно малого числа \hbar . Члены этого ряда являются по очереди вещественными и чисто-мнимыми. Если мы пренебрежем всеми членами ряда кроме первых двух, и приравняем первый член разложения вещественной части выражения, представляющего левую часть уравнения (12), а второй член - мнимой части, то получится

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) \quad (13)$$

$$-\frac{\partial A}{\partial t} = \sum_r \frac{\partial H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right)}{\partial \left(\frac{\partial S}{\partial q_r}\right)} \frac{\partial A}{\partial q_r}. \quad (14)$$

Уравнение (13) совпадает с известным из классической механики сравнением Гамильтона-Якоби. Итак, если считать постоянную \hbar малой, то фаза шредингеровской волновой функции задается «главной функцией» S из теории Гамильтона-Якоби. Уравнению (14) должна подчиняться амплитуда волновой функции. Из этого уравнения видно, что если S удовлетворяет уравнению (13), то амплитуда A остается постоянной вдоль траекторий, заданных посредством уравнений

$$\frac{dq_r}{dt} = \frac{\partial H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right)}{\partial \left(\frac{\partial S}{\partial q_r}\right)}; \quad (15)^1$$

во всем же остальном она совершенно произвольна. Поэтому мы можем выбрать A так, чтобы она исчезала во всех точках за исключением некоторой группы близких друг к другу траекторий, на которых она должна иметь постоянное значение. Таким образом получается решение волнового уравнения, исчезающее в любой момент времени во всех точках за исключением некоторой небольшой области. Однако вследствие сделанных нами приближенных допущений эта область не может быть сделана как угодно малой. Только в том случае мы имеем право пренебрегать дальнейшими членами разложения Тэйлора в правой части равенства (12), если

$$\hbar \frac{\partial}{\partial q} A \ll \frac{\partial S}{\partial q} A.$$

Отсюда вытекает, что A может измениться на значительную часть своей первоначальной величины только при таком изменении q , при котором изменение S во много раз превышает \hbar , т. е. при перемещении в q -пространстве на большое число длин волны волновой функции. Таким образом наше решение волнового уравнения, повсюду исчезающее вне некоторой малой области, имеет характер волнового пакета. Движение этого волнового пакета определяется траекториями (15), которые как раз совпадают с траекториями классической механики (вспомним, что $\frac{\partial S}{\partial q_r}$ играет роль p_r).

В случае системы, состоящей из одной свободной движущейся частицы, волновой пакет изображает состояние, в котором и положение и количество движения частицы имеют численные значения, определенные с некоторой ограниченной точностью. Такие состояния обыкновенно встречаются на практике, особенно в тех случаях, когда масса частицы велика, так как положение и количество движения частицы, с которой приходится иметь дело, обыкновенно приблизительно известны. Если Δx имеет порядок величины размеров

¹ Смысл этого утверждения тот, что точка, движущаяся в q -пространстве в согласии с уравнениями (15), переносит с собой значение амплитуды A .

волнового пакета, то при разложении пакета по составляющим Фурье длина волны различных составляющих будет заключаться внутри промежутка, порядок которого есть

$$\Delta \lambda \approx \frac{\lambda^2}{\Delta x}$$

Из (7) следует, что для количества движения частицы это соответствует промежутку порядка

$$\Delta p = \frac{h}{\lambda^2} \Delta \lambda = \frac{h}{\Delta x}$$

Итак

$$\Delta p \Delta x = h, \quad (16)$$

что дает теоретический предел той точности, с которой можно приписать определенные численные значения и положению и количеству движения частицы. Соотношение (16) известно под названием принципа неопределенности Гейзенберга. Оно показывает, что чем с большей точностью известно положение частицы, тем больше должна быть неопределенность в ее количестве движения и наоборот. То обстоятельство, что должно существовать соотношение вроде соотношения (16), можно было предвидеть из квантового условия

$$xp - xp = i\hbar.$$

Следует иметь в виду, что соотношение (16) соблюдается лишь в самом благоприятном случае и что неопределенность может быть еще гораздо больше. В самом деле, если взять волновой пакет, в котором в некоторый момент времени соблюдается соотношение (16), то с течением времени пакет расплывется и $\Delta p \Delta x$ увеличится. Исследование такого расплывания и рассмотрение движения волновых пакетов, представляющих частицу в силовом поле, читатель найдет в работах Кеннарда и Дарвина.¹

Принцип неопределенности Гейзенберга можно применить также и к общему случаю механической системы, которая описывается канонически сопряженными q и p . Мы видели, что существуют состояния таких систем, представленные волновыми пакетами, движущимися в q -пространстве. Любое такое состояние характеризуется тем, что q и p обладают с

¹ Эта формула является следствием интегральной формулы Фурье, которая, как известно, гласит:

$$f(x) = \int a_{\lambda} e^{i \frac{2\pi x}{\lambda}} d \frac{1}{\lambda}, \quad \text{где } a_{\lambda} = \int e^{-i \frac{2\pi x}{\lambda}} f(x) dx$$

что совершенно равносильно более компактной формуле

$$\int e^{i \frac{2\pi}{\lambda} (x-y)} d \frac{1}{\lambda} = \delta(x-y)$$

Если функция $f(x)$ внутри некоторого промежутка длины Δx , о котором мы для простоты предположим, что он содержит начало координат, может быть приближенно представлена волной типа

$$f(x) = \frac{1}{\Delta x} e^{i \frac{2\pi x}{\lambda_0}}$$

а вне этого промежутка приближенно равно нулю, то мы можем писать

$$a_{\lambda} = \frac{1}{\Delta x} \int_{(\Delta x)} e^{i 2\pi y \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0} \right)} dy.$$

При $\lambda = \lambda_0$ имеет $a_{\lambda} = 1$. Поэтому под шириной спектрального промежутка, в котором амплитуды a_{λ} имеют отличные от нуля значения, мы можем понимать

$$\begin{aligned} \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right) &= \int a_{\lambda} d \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\Delta x} \int e^{-i \frac{2\pi y}{\lambda_0}} \left(\int e^{i \frac{2\pi y}{\lambda}} d \frac{1}{\lambda} \right) dy = \\ &= \frac{1}{\Delta x} \int_{(\Delta x)} e^{-i \frac{2\pi y}{\lambda_0}} \delta(y) dy = \frac{1}{\Delta x}. \end{aligned}$$

Поэтому

$$\Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right) \Delta x = 1,$$

что равносильно формуле, приведенной в тексте.

Примечание переводчика.

¹ Kennard, ZS. f. Phys. 44, 344, 1927; Darwin, Proc. Roy. Soc.(A) 117, 258, 1926.

некоторой степенью точности числовыми значениями, причем порядок величины наименьшей неопределенности Δq в значении координаты q_r связан с порядком величины наименьшей неопределенности Δp_r в значении канонически-сопряженного импульса p_r соотношением

$$\Delta p_r \Delta q_r = \hbar. \quad (17)$$

Это общее соотношение может быть выведено как и (16) из соотношения между размерами волнового пакета и неопределенностью в длине волны входящих в состав пакета колебаний; то же самое можно вывести непосредственно из квантового условия

$$q_r p_r - p_r q_r = i\hbar.$$

Изучаемые в классической механике состояния системы, состоящей из массивных частиц или тел, представлены этими волновыми пакетами; соотношение (17) указывает на предел точности в такой классической трактовке задачи.

§ 41. ЛИНЕЙНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

Рассмотрим теперь задачу о гармоническом осцилляторе в случае одного измерения. В классической механике функция Гамильтона этой системы имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} (p^2 + m^2 \omega^2 q^2),$$

где m —масса колеблющейся частицы, а ω —другая числовая постоянная, равная частоте, помноженной на 2π . Выражение (18) для функции Гамильтона может быть перенесено и в квантовую механику; ее следует при этом дополнить квантовым соотношением

$$qp - pq = i\hbar, \quad (19)$$

для того, чтобы задача была вполне определенной.

Легко проверить, что уравнения движения имеют такой же вид, как и в классической теории. Нам следует определить собственные значения гамильтоновой наблюдаемой H . Это такой же самый вопрос, как тот, который был рассмотрен в § 29; разница только в числовых

постоянных [постоянная \hbar в (19), а в (18) $2m$ и $m^2\omega^2$]. Наше теперешнее q в $\frac{\hbar}{(m\omega)^2}$ раз больше

того q , которое было в § 29, теперешнее p — в $(\hbar m \omega)^{\frac{1}{2}}$ раз больше, чем p в § 29, а поэтому теперешнее H в $\frac{1}{2} \hbar \omega$ раз больше, чем $p^2 + q^2$ в § 29. Из того, что в § 29 $p^2 + q^2$ имеет собственные значения 1, 3, 5, ..., мы можем заключить, что теперь H имеет собственные значения

$$\frac{1}{2} \hbar \omega, \frac{3}{2} \hbar \omega, \frac{5}{2} \hbar \omega, \dots$$

Таковы возможные значения энергии гармонического осциллятора в квантовой механике.

Построим теперь гейзенберговские матрицы, представляющие p и q . Эти матрицы легко могут быть построены на основании уравнений (34) в § 29. Принимая во внимание новые числовые постоянные, вспомнив, что наблюдаемая A в § 29 равна $\frac{2H}{\hbar\omega} - 1$, и включив надлежащие множители, содержащие время, находим

$$\left. \begin{aligned}
 (H' | p | H' - \hbar \omega) &= \left(\frac{1}{2} m\right)^{\frac{1}{2}} \left(H' - \frac{1}{2} \hbar \omega\right)^{\frac{1}{2}} e^{i(\omega t + \gamma)} \\
 (H' - \hbar \omega | p | H') &= \left(\frac{1}{2} m\right)^{\frac{1}{2}} \left(H' - \frac{1}{2} \hbar \omega\right)^{\frac{1}{2}} e^{-i(\omega t + \gamma)} \\
 (H' | q | H' - \hbar \omega) &= -\frac{i}{(2m)^{\frac{1}{2}} \omega} \left(H' - \frac{1}{2} \hbar \omega\right)^{\frac{1}{2}} e^{i(\omega t + \gamma)} \\
 (H' - \hbar \omega | q | H') &= \frac{i}{(2m)^{\frac{1}{2}} \omega} \left(H' - \frac{1}{2} \hbar \omega\right)^{\frac{1}{2}} e^{-i(\omega t + \gamma)}
 \end{aligned} \right\} (20)$$

В классической теории мы имели, выражая p и q в виде рядов Фурье,

$$\begin{aligned}
 p &= (2mH)^{\frac{1}{2}} \cos(\omega t + \gamma) = \left(\frac{1}{2} m H\right)^{\frac{1}{2}} \{e^{i(\omega t + \gamma)} + e^{-i(\omega t + \gamma)}\}, \\
 q &= \left(\frac{2H}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \omega^{-1} \sin(\omega t + \gamma) = \left(\frac{H}{2m}\right)^{\frac{1}{2}} \omega^{-1} \{-ie^{i(\omega t + \gamma)} + ie^{-i(\omega t + \gamma)}\}.
 \end{aligned}$$

Это показывает, что существует соответствие между классическими составляющими разложения Фурье и матричными элементами Гейзенберга. Классические составляющие ряды Фурье очевидно становятся равны соответствующим матричным элементам, если пренебречь постоянной \hbar .

Если осциллятор несет на себе электрический заряд e , то его электрический момент равен $e q$. Согласно рассмотренному в § 38 допущению Гейзенберга о спонтанном излучении осциллятор будет испускать только излучение частоты $\frac{\omega}{2\pi}$, так как все матричные элементы наблюдаемой q исчезают за исключением (20). Этот результат совпадает с результатом классической теории. Когда осциллятор находится в состоянии с энергией $H' = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ или, как говорят, когда он находится в n -ом квантовом состоянии, лучистая энергия, испускаемая им в единицу времени, согласно (50) в § 37 будет равна

$$\frac{4}{3} \frac{\omega^4}{c^3} \frac{e^2}{2m\omega^2} \left(H' - \frac{1}{2} \hbar \omega\right) = \frac{2\hbar e^2 \omega^3}{3m c^3} n, \quad (21)$$

откуда следует, что вероятность скачка осциллятора из состояния n в состояние $n-1$ в единицу времени равна $\frac{2e^3 \omega^2}{3mc^3} n$. В состоянии с наименьшей энергией, когда $n = 0$, никакого излучения энергии нет.

В классической трактовке периодических и кратно-периодических систем часто оказывается удобным пользоваться угловыми переменными и переменными действия.¹ Соответствующие переменные могут быть введены и в квантовой теории. В рассматриваемой задаче о гармоническом осцилляторе можно определить переменную действия J посредством уравнения

$$J = \frac{H}{\omega} - \frac{1}{2} \hbar. \quad (22)$$

Она является константой движения; ее собственные значения равны произведению \hbar на неотрицательное целое число. Поэтому в гейзенберговском представлении ее представителем будет матрица

¹ Угловыми переменными и переменными действия называются координаты системы и, соответственно, сопряженные с ними импульсы в том случае, если функция Гамильтона содержит одни только импульсы. При этом из канонических уравнений динамики сразу вытекает, что переменные действия (т. е. импульсы) постоянны, а угловые переменные (т. е. координаты) зависят от времени линейно.

$$\begin{array}{cccccc}
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 0 & \hbar & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 0 & 0 & 2\hbar & 0 & 0 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 3\hbar & 0 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 4\hbar & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots
 \end{array}$$

где строки и столбцы расположены в порядке возрастающих уровней энергии. Для определения угловой переменной введем две матрицы

$$\begin{array}{cccccc}
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{cccccc}
 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots
 \end{array}$$

где отличные от нуля элементы расположены только налево или только направо от главной диагонали, и назовем $e^{i\omega}$ и $e^{-i\omega}$ те переменные, которые представлены этими матрицами в момент времени $t=0$. Эти матрицы комплексно сопряжены друг с другом в смысле определения, данного в § 21, что находится в согласии также и с обозначением $e^{i\omega}$ и $e^{-i\omega}$. Это обозначение однако предполагает также и то, что каждая из обеих матриц обратна другой, что не совсем верно. Правда, матрица, которая служит представителем произведения $e^{-i\omega} e^{i\omega}$, равна единичной матрице, но матрица, которая представляет $e^{i\omega} e^{-i\omega}$ отличается от единичной тем, что ее первый диагональный элемент равен нулю. Итак

$$e^{-i\omega} e^{i\omega} = 1, \quad e^{i\omega} e^{-i\omega} \neq 1.$$

Переменные $e^{i\omega}, e^{-i\omega}$, определенные выше с помощью своих представителей-матриц, являются наилучшими квантовыми аналогами классических переменных $e^{i\omega}$ и $e^{-i\omega}$, где ω есть угловая переменная классической механики.¹ Многие их свойства аналогичны свойствам соответствующих классических переменных, а единственный серьезный их недостаток состоит в том, что $e^{i\omega}, e^{-i\omega}$ не совсем равно единице. Так например сразу из матриц получаются соотношения

$$\left. \begin{array}{l}
 e^{i\omega} J = (J - \hbar) e^{i\omega} \\
 e^{-i\omega} J = (J + \hbar) e^{-i\omega}
 \end{array} \right\} \quad (24)$$

эквивалентные классическим соотношениям

$$[e^{i\omega}, J] = i e^{i\omega}, \quad [e^{-i\omega}, J] = -i e^{-i\omega}.$$

Сравнивая уравнения (24) с уравнениями (28) главы II, мы видим, что они не противоречат той точке зрения, что J и ω суть сопряженные динамические переменные, удовлетворяющие соотношению

$$\omega J - J \omega = i\hbar,$$

хотя на самом деле это соотношение не имеет смысла, так как мы можем определить только $e^{\pm i\omega}$, но не ω . Далее, в любой момент времени t динамическая переменная $e^{i\omega}$ должна быть представлена матрицей, элементы которой изменяются с временем по гейзенберговскому закону $e^{\frac{(H' - H'')t}{\hbar}}$. Так как все матричные элементы исчезают, за исключением тех, которые относятся к двум следующим друг за другом энергетическим уровням ($H' - H'' = \pm \hbar \omega$), каждый матричный элемент будет зависеть от времени по закону $e^{i\omega t}$. Это соответствует тому факту, что в классической теории ω линейно растет вместе с t со скоростью ω .

¹ Угловая переменная и переменная действия в классической трактовке задачи об осцилляторе вводятся посредством уравнения

$$\frac{p}{m\omega} + ip = \sqrt{\frac{2J}{m\omega}} e^{i\omega t}, \quad \text{откуда} \quad \frac{p^2}{2m\omega} + \frac{m\omega}{2} q^2 = J.$$

Координата q и импульс p могут быть выражены через угловую переменную и переменную действия. Импульс p например представлен на основании равенств (20) матрицей

Так как

$$\frac{dq}{dt} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -m\omega^2 q,$$

то

$$\frac{dJ}{dt} = \frac{p}{m\omega} \frac{dp}{dt} + m\omega q \frac{dq}{dt} = -\omega pq + \omega qp = 0,$$

$$\frac{dw}{dt} = -ie^{-i\omega t} \left(\frac{1}{m\omega} \frac{dp}{dt} + i \frac{dq}{dt} \right) \sqrt{\frac{m\omega}{2J}},$$

а так как $H = J\omega$, то это обозначает не что иное, как канонические уравнения

$$\frac{dJ}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \omega}, \quad \frac{d\omega}{dt} = \frac{\partial H}{\partial J}.$$

$$\left(\frac{1}{2} m \hbar \omega \right)^{\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 2 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}$$

(если отбросить несущественные фазовые множители), откуда

$$\left. \begin{aligned} p &= \left(\frac{1}{2} m \omega \right)^{\frac{1}{2}} \left(J^{\frac{1}{2}} e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} J^{\frac{1}{2}} \right) \\ q &= (2m\omega)^{-\frac{1}{2}} \left(-i J^{\frac{1}{2}} e^{i\omega t} + i e^{-i\omega t} J^{\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \right\} (25)$$

Таким же образом

Из этих уравнений видно, что p и q , будучи выражены через угловую переменную и переменную действия, содержат их лишь в двух комбинациях, а именно $J^{\frac{1}{2}} e^{i\omega t}$ и $e^{-i\omega t} J^{\frac{1}{2}}$. Далее, все динамические переменные, с которыми нам придется иметь дело для получения физических результатов, должны быть функциями p и q , а следовательно, будучи выражены через угловую переменную и переменную действия, будут содержать их только в виде комбинаций $J^{\frac{1}{2}} e^{i\omega t}$ и $e^{-i\omega t} J^{\frac{1}{2}}$. Но с помощью матриц - представителей легко проверить, что оба эти выражения равны

$$\left. \begin{aligned} J^{\frac{1}{2}} e^{i\omega t} &= e^{i\omega t} (J + \hbar)^{\frac{1}{2}} \\ \text{и} \quad e^{-i\omega t} J^{\frac{1}{2}} &= (J + \hbar)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega t} \end{aligned} \right\} (26)$$

и что их произведения в том и в другом порядке равны

$$\begin{aligned} J^{\frac{1}{2}} e^{i\omega t} \cdot e^{-i\omega t} J^{\frac{1}{2}} &= J, \\ e^{-i\omega t} J^{\frac{1}{2}} \cdot J^{\frac{1}{2}} e^{i\omega t} &= (J + \hbar)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega t} e^{i\omega t} (J + \hbar)^{\frac{1}{2}} = J + \hbar. \end{aligned}$$

Эти равенства верны, несмотря на неравенство (23). Они показывают, что, когда мы имеем дело с динамическими переменными, обладающими физическим смыслом, которые содержат угловую переменную и переменную действия через посредство двух величин $J^{\frac{1}{2}} e^{i\omega t}$ и $e^{-i\omega t} J^{\frac{1}{2}}$, мы можем считать величины $e^{i\omega t}$ и $e^{-i\omega t}$ обратными друг по отношению к другу, не впадая при этом в ошибку. Итак мы можем свободно употреблять переменную действия и угловую переменную по аналогии с классической теорией, не приходя к неверным физическим результатам.

Волновое уравнение для гармонического осциллятора с гамильтоновой функцией (18) имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (q|) = \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} + m^2 \omega^2 q^2 \right\} (q|).$$

Волновые функции, представляющие стационарные состояния, будут периодическими решениями этого уравнения, для которых оператор $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ есть то же самое, что умножение на значение энергии H' . Таким образом они будут удовлетворять уравнению

$$H'(q|) = \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} + m^2 \omega^2 q^2 \right\} (q|) \quad (27)$$

Общее решение этого уравнения было дано Шредингером.¹ Мы найдем здесь некоторые решения, представляющие состояния с малыми значениями энергии, которые пригодятся нам в следующем параграфе.

Ур-ние (27) может быть написано в виде:

$$\left\{ \frac{d^2}{dq^2} - \frac{q^2}{a^4} + \frac{2n+1}{a^2} \right\} (q|) = 0, \quad (28)$$

где a^2 обозначает $\frac{\hbar}{m\omega}$ и где вместо H' написано $\left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$

Положим

$$(q|) = f(q) e^{-\frac{q^2}{2a^2}}$$

Ур-ние (28) принимает вид:

$$\frac{d^2 f}{dq^2} - 2 \frac{df}{dq} \frac{q}{a^2} + f \left[\frac{q^2}{a^4} - \frac{1}{a^2} \right] + \left[-\frac{q^2}{a^4} + \frac{2n+1}{a^2} \right] f = 0$$

или

$$\frac{d^2 f}{dq^2} - 2 \frac{q}{a^2} \frac{df}{dq} + \frac{2n}{a^2} f = 0.$$

Решением этого уравнения в том случае, когда n есть целое неотрицательное число, является полином относительно q . Легко проверить, что полиномы

$$f(q) = 1, q, q^2 - \frac{1}{2} a^2, q^3 - \frac{3}{2} q a^2, \dots$$

являются решением при

$$n=0, 1, 2, 3, \dots$$

Итак, собственными функциями являются

$$\left. \begin{aligned} (q|0) &= e^{-\frac{q^2}{2a^2}}, (q|1) = q e^{-\frac{q^2}{2a^2}}, \\ (q|2) &= \left(q^2 - \frac{1}{2} a^2 \right) e^{-\frac{q^2}{2a^2}}, (q|3) = \left(q^3 - \frac{3}{2} q a^2 \right) e^{-\frac{q^2}{2a^2}}, \dots \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

§42. ПЛОСКИЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

Предположим, что рассмотренный в предыдущем параграфе гармонический осциллятор может колебаться также и в другом направлении, под прямым углом к первоначальному, с той же самой частотой $\frac{\omega}{2\pi}$. Мы получим тогда плоский гармонический осциллятор с функцией

Гамильтона

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2), \quad (30)$$

где x и y суть координаты, а p_x и p_y — сопряженные с ними импульсы. Изучение такой системы представляет интерес потому, что она дает прекрасные примеры суперпозиции состояний и кроме того может быть применена к задаче о поляризации фотона.

Гамильтонову функцию (30) можно рассматривать как сумму гамильтоновых функций двух отдельных механических систем, а именно двух линейных осцилляторов с функциями Гамильтона:

$$H_x = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad H_y = \frac{1}{2m} p_y^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2. \quad (31)$$

По этой причине существует простое соотношение между собственными функциями оператора H в формуле (30), представляющими стационарное состояние всей системы, и собственными функциями операторов H_x и H_y в формуле (31), представляющими

¹ E. Schrodinger, Ann. d. Phys., 79, 514, 1926.

стационарные состояния двух отдельных систем. Рассмотрим сперва общий случай механической системы, у которой функция Гамильтона H может рассматриваться как сумма функций Гамильтона H_1 и H_2 двух отдельных механических систем:

$$H = H_1 + H_2,$$

где все наблюдаемые, от которых зависит H_1 отличны от наблюдаемых, входящих в H_2 коммутируют с ними. Выберем полную систему коммутирующих наблюдаемых, определяющую некоторое представление и состоящую из наблюдаемых q_1 , которые входят только в H_1 , и наблюдаемых q_2 , которые входят только в H_2 . В результате этого представитель наблюдаемой H будет иметь вид:

$$(q_1' q_2' | H | q_1'' q_2'') = (q_1' | H_1 | q_1'') \delta(q_2' - q_2'') + \delta(q_1' - q_1'') (q_2' | H_2 | q_2''). \quad (32)$$

если для определенности ограничиться случаем непрерывных q' . Пусть $(q_1' | H_1)$ будет собственной функцией оператора H_1 а $(q_2' | H_2)$ — собственной функцией оператора H_2 , и пусть они принадлежат собственным значениям H_1' и H_2' так что:

$$\int (q_1' | H_1 | q_1'') \delta(q_1'' - q_1') = H_1' (q_1' | H_1')$$

$$\int (q_2' | H_2 | q_2'') \delta(q_2'' - q_2') = H_2' (q_2' | H_2').$$

Из (32) будет вытекать следствие:

$$\begin{aligned} \int \int (q_1' q_2' | H | q_1'' q_2'') \delta(q_1'' - q_1') \delta(q_2'' - q_2') &= \\ &= \int (q_1' | H_1 | q_1'') \delta(q_1'' - q_1') (q_2' | H_2') + \\ &+ (q_1' | H_1') \int (q_2' | H_2 | q_2'') \delta(q_2'' - q_2') = \\ &= H_1' (q_1' | H_1') (q_2' | H_2') + H_2' (q_1' | H_1') (q_2' | H_2'). \end{aligned}$$

Это показывает, что произведение $(q_1' | H_1)$ $(q_2' | H_2)$ является собственной функцией оператора H , принадлежащей собственному значению $H_1' + H_2'$. Произведение собственных функции операторов Гамильтона обеих механических систем является собственной функцией оператора Гамильтона результирующей системы; сумма соответственных собственных значений обоих операторов является собственным значением результирующего оператора. Физический смысл этого результата заключается конечно в том, что когда обе составляющие системы находятся в стационарных состояниях, результирующая система также находится в стационарном состоянии, энергия которого равна сумме энергий составляющих систем; при этом собственная функция, представляющая состояние результирующей системы, равна произведению функций, представляющих состояния обеих складывающихся систем.

Применим этот общий результат к нашей задаче о плоском осцилляторе. В предыдущем параграфе мы уже рассмотрели собственные функции гамильтоновых операторов вида H_x и H_y . Пусть $(x|n_x)$ и $(y|n_y)$ будут собственными функциями операторов H_x и H_y с квантовыми числами n_x и n_y , и пусть соответственные уровни энергии будут

$$H_x' = \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad H_y' = \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega. \quad \text{Их произведение } (x|n_x) (y|n_y) \text{ будет собственной}$$

функцией оператора Гамильтона H в формуле (30), принадлежащей собственному значению:

$$H' = H_x' + H_y' = (n_x + n_y + 1) \hbar \omega.$$

Итак собственные значения наблюдаемой H оказываются равными произведению $\hbar \omega$ на целое положительное число. Каждому из этих собственных чисел (за исключением самого маленького, т. е. $\hbar \omega$) принадлежит несколько собственных функций, соответственно различным возможным способам выбрать n_x и n_y так, чтобы сумма была заданным целым числом. Поэтому существует несколько стационарных состояний с одной и той же энергией. Механическая система, обладающая таким свойством, называется вырожденной.

Рассмотрим собственные функции в некоторых состояниях с малой энергией, применяя выражения (29) собственных функций линейного осциллятора. Состояние с наименьшей энергией $\hbar \omega$ со имеет квантовые числа $n_x = n_y = 0$; его представителем является собственная функция

$$(x|0)(y|0) = e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}. \quad (33)$$

Только одно состояние принадлежит этому уровню энергии, который следовательно является невырожденным. Следующему по величине уровню энергии $2\hbar\omega$ принадлежат два независимые состояния, отвечающие двум системам квантовых чисел, а именно $n_x=1, n_y=0$ и $n_x=0, n_y=1$. Обе собственные функции таковы:

$$\left. \begin{aligned} (x|1)(y|0) &= xe^{-\frac{x^2+y^2}{2a^2}} \\ (x|0)(y|1) &= ye^{-\frac{x^2+y^2}{2a^2}} \end{aligned} \right\} (33)$$

Любая линейная комбинация этих собственных функций является новой собственной функцией, представляющей другое стационарное состояние с тем же самым значением энергии $2\hbar\omega$

Наш плоский гармонический осциллятор обладает круговой симметрией относительно начала координат в плоскости x, y . Поэтому, если взять новую систему прямоугольных декартовых координат $x^* = x \cos \nu + y \sin \nu$, $y^* = -x \sin \nu + y \cos \nu$ то волновые функции в переменных (x^*, y^*) будут иметь такой же самый вид, как в переменных (x, y) . Стационарное состояние с энергией $2\hbar\omega$, в котором составляющая по оси x^* находится в первом квантовом состоянии, а составляющая по оси y^* в нулевом квантовом состоянии ($n_{x^*}=1, n_{y^*}=0$), будет поэтому представлено функцией:

$$x^* e^{-\frac{x^{*2} + y^{*2}}{2a^{*2}}};$$

но она равна

$$(x \cos \nu + y \sin \nu) e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}; (35)$$

т. е. линейной комбинации обеих собственных функций (34). Таким образом одноквантовое состояние линейного колебания в любом направлении может быть получено в результате суперпозиции двух одноквантовых состояний линейного колебания в направлениях x и y .

Следует отметить существенное отличие между характером этой квантовой суперпозиции и характером классической суперпозиции в той же механической системе. В классической механике наложение линейного колебания с заданной энергией в направлении x на линейное колебание с той же энергией в направлении y дает результирующее состояние с удвоенной энергией, а не с той же самой энергией, как в квантовой механике. Далее, если результирующее состояние также является линейным колебанием, то его направление должно составлять с обоими первоначальными колебаниями угол 45° , а не какой угодно угол, как в квантовой механике.

Только-что разобранный пример квантовой суперпозиции может быть непосредственно применен к задаче о поляризации фотона. Фотон данной частоты, движущийся в данном направлении, может рассматриваться как гармоническое электромагнитное колебание в одноквантовом состоянии. Это колебание может быть разложено по двум взаимно-перпендикулярным направлениям, соответственно двум независимым состояниям линейной поляризации фотона; поэтому с формальной точки зрения оно образует такую же механическую систему, как рассмотренный выше плоский осциллятор. Волновые функции (34) и (35) могут считаться представителями состояний линейной поляризации фотона. Мы видим, что состояние фотона, линейно поляризованного в любом направлении ν , может быть получено в результате суперпозиции состояний поляризации 0 и $\frac{1}{2}\pi$. Относительные веса обоих этих состояний в суперпозиции задаются квадратами абсолютных величин коэффициентов при волновых функциях (34) в выражении (35); они относятся поэтому как $\cos^2 \nu : \sin^2 \nu$ в согласии с соображениями главы I.

Мы можем наложить друг на друга оба состояния линейного колебания, представителями которых являются собственные функции (34), таким образом, чтобы получилось состояние кругового колебания в том или ином направлении вокруг начала координат, соответствующее фотону, поляризованному по кругу. Для того чтобы это сделать, мы должны взять следующие линейные комбинации собственных функций (34):

$$(x + iy) e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}, (x - iy) e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}. (36)$$

Тот факт, что эти собственные функции представляют состояния, обладающие круговой симметрией, сразу становится ясным из того, что при переходе к координатам (x^*, y^*) они остаются неизменными, если не считать появления числового множителя. Направление вращения для каждой из этих собственных функций можно найти из рассмотрения момента количества движения, который мы определяем, как и в классической теории, выражением $x p_y - y p_x$. Его представителем является оператор $-i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$, который, будучи применен к первой из собственных функций (36), дает:

$$\begin{aligned} & -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) (x + iy) e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}} = \\ & = -i\hbar x \left\{ i - \frac{(x + iy)y}{a^2} \right\} e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}} + i\hbar y \left\{ 1 - \frac{(x + iy)x}{a^2} \right\} e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}} = \\ & = \hbar (x + iy) e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}. \end{aligned}$$

Таким образом действие этого оператора равносильно умножению на \hbar , что показывает, что первая из собственных функций (36) является представителем состояния, в котором момент количества движения имеет значение \hbar . Из симметрии ясно, что вторая собственная функция (36) есть представитель состояния, в котором момент количества движения имеет значение $-\hbar$. Следует заметить, что в состояниях линейного колебания, представителями которых являются собственные функции (34), момент количества движения не обладает значением нуль, как было бы в классической теории, но существуют равные вероятности того, что он будет иметь значения \hbar или $-\hbar$. Состояние же с наименьшей энергией, представленное функцией (33), таково, что момент количества движения имеет значение нуль.

Таким же образом мы можем трактовать и двухбайтовые состояния с энергией $3\hbar$, из которых независимыми являются три (соответственно трем комбинациям: $n_x = 2, n_y = 1; n_x = 1, n_y = 2$). Три собственные функции имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} (x|2)(y|0) &= \left(x^2 - \frac{1}{2}a^2 \right) e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}, \\ (x|1)(y|1) &= xy e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}, \\ (x|0)(y|2) &= \left(y^2 - \frac{1}{2}a^2 \right) e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}. \end{aligned} \right\} (37)$$

Двухбайтовое состояние линейного колебания в любом направлении x^* имеет в качестве представителя собственную функцию

$$\left(x^{*2} - \frac{1}{2}a^2 \right) e^{-\frac{(x^* + y^*)^2}{2a^2}} \left\{ (x \cos \vartheta + y \sin \vartheta)^2 - \frac{1}{2}a^2 \right\} e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}},$$

которая является линейной комбинацией трех собственных функций (37). Имеются три двухквантовых состояния кругового колебания, представленные функциями:

$$(x + iy)^2 e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}; \left\{ (x + iy)(x - iy) - a^2 \right\} e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}; (x - iy)^2 e^{-\frac{x^2 + y^2}{2a^2}}$$

Легко проверить, что в этих трех состояниях момент количества движения имеет значения $2\hbar$, 0 и $-2\hbar$.

§ 43. СПИН¹ ЭЛЕКТРОНА.

Трактуя в согласии с квантовой механикой задачи, относящиеся к электронам, можно убедиться в том, что не получается полного согласия с опытными данными, если считать электроны просто точечными зарядами, отталкивающимися друг от друга по закону Кулона. Необходимо допустить, что каждый электрон вращается и следовательно обладает внутренним моментом количества движения (моментом количества движения спина), а также - что он обладает и магнитным моментом. Для того, чтобы теория согласовалась с опытом, необходимо допустить, что собственные значения прямоугольной составляющей момента

количества движения спина по любому направлению равны $\frac{1}{2}\hbar$ и $-\frac{1}{2}\hbar$, а также - что

магнитный момент электрона (с обратным знаком) имеет то же направление, как и момент количества движения спина, и что собственными значениями его составляющей по любому направлению являются $\frac{e\hbar}{2mc}$ и $-\frac{e\hbar}{2mc}$.² Если электрон в некотором состоянии спина имеет в

некотором направлении момент количества движения спина $\frac{1}{2}\hbar$, то он будет иметь в том же

направлении магнитный момент $-\frac{e\hbar}{2mc}$. Теоретическое основание для таких допущений будет

дано в релятивистской теории электрона (см. главу XIII). В этом параграфе мы примем все эти допущения просто как результаты опыта и исследуем важнейшие следствия из них.

Пусть s_x, s_y, s_z будут тремя прямоугольными составляющими момента количества движения спина. Нам нужны квантовые условия, которые заменят для этих трех наблюдаемых то классическое условие, что все они коммутируют друг с другом. В § 44 будут выведены квантовые условия для трех составляющих момента количества движения одной частицы или системы частиц при вращении вокруг точки. Мы найдем, что эти квантовые условия имеют такой же самый вид в случае одной частицы, как и в случае системы частиц; это наводит на мысль, что тот же самый вид квантовых условий [уравнения (8) в § 44] относится к моменту количества движения вообще, даже и к моменту количества движения вращающегося тела. Это дает нам для s_x, s_y, s_z квантовые условия

$$[s_y, s_z] = s_x; [s_z, s_x] = s_y; [s_x, s_y] = s_z, \quad (38)$$

которые могут быть записаны также и в виде:

$$s_y s_z - s_z s_y = i\hbar s_x, s_z s_x - s_x s_z = i\hbar s_y, s_x s_y - s_y s_x = i\hbar s_z \quad (39)$$

и объединены в одно векторное уравнение

$$\mathbf{s} \times \mathbf{s} = i\hbar \mathbf{s}.$$

Кроме того, вследствие того обстоятельства, что каждая из этих наблюдаемых имеет только два собственных значения $\frac{1}{2}\hbar$ и $-\frac{1}{2}\hbar$, должны существовать и алгебраические соотношения между s_x, s_y, s_z . Квадрат каждой из этих трех наблюдаемых имеет только одно собственное значение $\frac{1}{4}\hbar^2$, вследствие чего его можно приравнять этому значению, т.е. положить:

$$s_x^2 = s_y^2 = s_z^2 = \frac{1}{4}\hbar^2. \quad (40)$$

Удобно положить

$$s_x = \frac{1}{2}\hbar \sigma_x; s_y = \frac{1}{2}\hbar \sigma_y; s_z = \frac{1}{2}\hbar \sigma_z,$$

где $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, три новые наблюдаемые. Магнитный момент электрона будет иметь составляющие

¹ Английское слово spin означает верчение, кручение.

² Здесь e обозначает взятый с обратным знаком заряд электрона. Не следует смешивать его с основанием натуральных логарифмов.

$$-\frac{e\hbar}{2mc}\sigma_x; -\frac{e\hbar}{2mc}\sigma_y; -\frac{e\hbar}{2mc}\sigma_z.$$

Трех наблюдаемых $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, достаточно для того, чтобы вполне описать спин электрона. Они образуют составляющие вектора σ .

Из (39) вытекает:

$$\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i\sigma_x; \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i\sigma_y; \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z, \quad (40)$$

а из (40):

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1,$$

что соответствует тому обстоятельству, что каждая σ имеет как раз два собственных значения +1 и -1. Из первого уравнения (41) следует:

$$2i(\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x) = (2i\sigma_x)\sigma_y + \sigma_y(2i\sigma_x) = (\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y)\sigma_y + \sigma_y(\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y) = -\sigma_z \sigma_y^2 + \sigma_y^2 \sigma_z = 0, \quad (41)$$

так что

$$\sigma_x^2 \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x^2.$$

Если две наблюдаемые удовлетворяют такому соотношению, которое отличается только знаком минус от коммутативного умножения, то говорят, что они антикоммутируют. Итак σ_x антикоммутирует с σ_y , и из симметрии вытекает, что любая из трех наблюдаемых $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ антикоммутирует с любой из остальных. Из формул (41) мы выводим:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_y \sigma_z &= i\sigma_x = -\sigma_z \sigma_y \\ \sigma_z \sigma_x &= i\sigma_y = -\sigma_x \sigma_z \\ \sigma_x \sigma_y &= i\sigma_z = -\sigma_y \sigma_x \\ \sigma_x \sigma_y \sigma_z &= i \end{aligned} \right\} \quad (42)$$

Проверим, что соотношения (42) инвариантны по отношению к вращениям осей; это нужно сделать для того, чтобы показать допустимость наших предположений относительно спина. Пусть составляющими вектора σ в новой системе взаимно-перпендикулярных осей будут

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= l_1 \sigma_x + m_1 \sigma_y + n_1 \sigma_z, \\ \sigma_2 &= l_2 \sigma_x + m_2 \sigma_y + n_2 \sigma_z, \\ \sigma_3 &= l_3 \sigma_x + m_3 \sigma_y + n_3 \sigma_z. \end{aligned}$$

Из (42) мы выводим:

$$\sigma_1^2 = (l_1 \sigma_x + m_1 \sigma_y + n_1 \sigma_z)^2 = l_1^2 \sigma_x^2 + m_1^2 \sigma_y^2 + n_1^2 \sigma_z^2 + l_1 m_1 (\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x) + m_1 n_1 (\sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y) + n_1 l_1 (\sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z) = l_1^2 + m_1^2 + n_1^2 = 1.$$

Далее:

$$\begin{aligned} \sigma_2 \sigma_3 &= (l_2 \sigma_x + m_2 \sigma_y + n_2 \sigma_z)(l_3 \sigma_x + m_3 \sigma_y + n_3 \sigma_z) = l_2 l_3 \sigma_x^2 + m_2 m_3 \sigma_y^2 + n_2 n_3 \sigma_z^2 + l_2 m_3 \sigma_x \sigma_y + m_2 l_3 \sigma_y \sigma_x + m_2 n_3 \sigma_y \sigma_z + n_2 m_3 \sigma_z \sigma_y + n_2 l_3 \sigma_z \sigma_x + l_2 n_3 \sigma_x \sigma_z = l_2 l_3 + m_2 m_3 + n_2 n_3 + i(l_2 m_3 - m_2 l_3) \sigma_z + i(m_2 n_3 - n_2 m_3) \sigma_x + i(n_2 l_3 - l_2 n_3) \sigma_y = i(l_1 \sigma_x + m_1 \sigma_y + n_1 \sigma_z) = i\sigma_1. \end{aligned}$$

Итак $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ удовлетворяют соотношениям такого же вида, как $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$.

Построим теперь матрицы, которые должны быть представителями наблюдаемых спина $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ (матрицы Паули). Эти матрицы должны иметь только два столбца и две строки, так как наблюдаемые, представителями которых они являются, имеют только по два собственных значения. Если взять представление, в котором σ_z диагональна, то представителем σ_z будет

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Пусть σ_x будет представлена матрицей

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{pmatrix}$$

Эта матрица должна быть эрмитовой, так как σ_x — вещественная наблюдаемая; поэтому и a_1 должны быть вещественными числами, а a_2 и a_3 сопряженными комплексными. Уравнение $\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z$ дает

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ -a_3 & -a_4 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} a_1 & -a_2 \\ a_3 & -a_4 \end{pmatrix},$$

откуда $a_2 = a_4 = 0$. Поэтому σ_x представлена матрицей вида

$$\begin{pmatrix} 0 & a_2 \\ a_3 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ур-ние $\sigma_x^2 = 1$ показывает, что должно быть: $a_2 a_3 = 1$. Так как a_2 и a_3 являются комплексно-сопряженными числами, то они должны иметь вид $e^{i\alpha}$ и $e^{-i\alpha}$, где α — вещественное число, так что представителем наблюдаемой σ_x оказывается матрица вида

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}.$$

Таким же образом можно показать, что и σ_y представлена матрицей этого вида. Выбирая надлежащим образом фазы представления, которые не вполне определяются условием, что σ_z диагональна, мы можем добиться того, чтобы представителем σ_x была матрица

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Представитель σ_y , определится тогда из уравнения $\sigma_y = i\sigma_x \sigma_z$. Окончательно мы получаем три матрицы:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

которые являются представителями наблюдаемых σ_x , σ_y , σ_z ; эти матрицы удовлетворяют алгебраическим соотношениям (42). Составляющая вектора спина σ по любому направлению с направляющими косинусами l, m, n обладает представителем

$$\begin{pmatrix} n & l - im \\ l + im & -n \end{pmatrix}. \quad (43)$$

В нашем представлении, в котором σ_z диагональна, состояние спина будет представлено функцией (σ'_z) от независимой переменной σ'_z , область изменения которой состоит всего лишь из двух точек: +1 и -1. Эта функция является, таким образом, парой чисел. Состояние, в котором σ_z имеет значение, равное единице, можно представить например функцией $f_a(\sigma'_z)$, состоящей из двух чисел 1, 0, а то состояние, в котором σ_z имеет значение -1, можно представить например функцией $f_b(\sigma'_z)$, состоящей из двух чисел 0, 1. Любая функция переменной σ'_z , т. е. любая пара чисел, может быть выражена линейной комбинацией этих двух функций. Таким образом всякое состояние спина может быть получено в результате суперпозиции обоих состояний, в которых σ_z имеет соответственно значение +1 и -1. Так, например, состояние, в котором составляющая вектора σ в направлении l, m, n , представленная матрицей (43), имеет значение 1, представлено парой чисел a и b , удовлетворяющих условиям:¹

$$na + (l - im)b = a; (l + im)a - nb = b.$$

Это дает:

$$\frac{a}{b} = \frac{l - im}{1 - n} = \frac{1 + n}{l + im}.$$

Если рассматривать такое состояние как результат суперпозиции двух состояний, в которых значение σ_z равно 1 и -1, то относительные веса в суперпозиции будут:

¹ То обстоятельство, что наблюдаемая s представителем $\begin{pmatrix} n & l - im \\ l + im & -n \end{pmatrix}$ имеет в состоянии с представителем $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ значение 1, равносильно матричному равенству $\begin{pmatrix} n & l - im \\ l + im & -n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 1 \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, которое и написано в тексте в раскрытой форме.

$$|a|^2 : |b|^2 = |l - im|^2 : (1 - n)^2 = (1 + n) : (1 - n).$$

Для полного описания электрона спиновые наблюдаемые $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ нужны наравне с декартовыми координатами x, y, z и с импульсами p_x, p_y, p_z . Мы допускаем, что спиновые наблюдаемые коммутируют с этими координатами и импульсами. Таким образом полной системой коммутирующих наблюдаемых для механической системы, состоящей из одного электрона, будет x, y, z, σ_z . В представлении, в котором все они диагональны, представитель любого состояния будет функцией переменных x', y', z', σ'_z . Так как область изменения σ'_z состоит только из двух точек, то эта функция четырех переменных есть то же самое, что две функции трех переменных, а именно две функции:

$$(x', y', z')_+ = (x', y', z', +1), (x', y', z')_- = (x', y', z', -1).$$

Итак, наличие спина может сказываться или в том, что в выражение волновой функции, представляющей состояние, входит еще одна переменная, или же в том, что волновая функция получает две составляющие.

WWW.NIX.RU

VIII. ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНОМ СИЛОВОМ ПОЛЕ.

§ 44. СВОЙСТВА МОМЕНТА КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ.

Атом состоит из массивного положительно заряженного ядра и из электронов, вращающихся вокруг него под влиянием силы притяжения к ядру и сил отталкивания друг от друга. Точная трактовка этой механической системы представила бы очень трудную математическую задачу. Однако возможно получить некоторое представление о важнейших свойствах этой системы, считая в порядке грубого приближения, что каждый электрон движется независимо от остальных в некотором центральном силовом поле, которое состоит из притяжения к ядру (ядро мы будем считать неподвижным) и из некоторой средней силы, происходящей от остальных электронов. Поэтому рассматриваемая в этой главе задача о движении частицы в центральном силовом поле является краеугольным камнем всей теории строения атома.

Пусть прямоугольные координаты частицы, отнесенные к системе осей с расположенным в начале координат центром сил, будут x, y, z ; соответствующие составляющие количества движения по координатным осям пусть будут p_x, p_y, p_z . Они удовлетворяют квантовым условиям:

$$[x, y] = 0; [x, p_x] = 1; [x, p_y] = 0$$

и т. д. Если пренебречь поправками релятивистской механики, то оператор Гамильтона будет иметь вид.

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V, \quad (1)$$

где потенциальная энергия V зависит только от $(x^2 + y^2 + z^2)$.

Введем теперь составляющие момента количества движения. Как и в классической теории, они определяются равенствами:

$$m_x = yp_z - zp_y; m_y = zp_x - xp_z; m_z = xp_y - yp_x \quad (2)$$

или векторным равенством

$$\mathbf{m} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}.$$

Из этих равенств сразу вытекает тождество

$$m_x x + m_y y + m_z z = 0. \quad (3)$$

Вычислим теперь скобки Пуассона, комбинируя составляющие момента количества движения с наблюдаемыми x, p_x и т. д. и между собою. Проще всего это можно сделать, если воспользоваться правилами (7) и (8) § 32; мы получаем:

$$\left. \begin{aligned} [m_z, x] &= [xp_y - yp_x, x] = -y[p_x, x] = y \\ [m_z, y] &= [xp_y - yp_x, y] = x[p_y, y] = -x \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

$$[m_z, z] = [xp_y - yp_x, z] = 0 \quad (5)$$

Таким же образом

$$[m_x, p_x] = p_y; [m_x, p_y] = -p_x \quad (6)$$

$$[m_x, p_z] = 0 \quad (7)$$

Аналогичные соотношения имеют место и для m_y и m_z . Далее:

$$\left. \begin{aligned} [m_y, m_z] &= [zp_x - xp_z, m_z] = z[p_x, m_z] - [x, m_z]p_z = \\ &= -zp_y + yp_z = m_x \\ [m_z, m_x] &= m_y, [m_x, m_y] = m_z \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Эти формулы совпадают с результатами классической механики. Знак в формулах (4), (6) и (8) легко запомнить с помощью того мнемонического правила, что следует брать знак +, когда все три наблюдаемые (две, написанные в скобке Пуассона, и третья в правой части равенства) расположены в циклическом порядке (x, y, z), и знак - в том случае, когда они расположены в ином порядке.

Из формул (4) и (5) следует:

$$\begin{aligned} [m_z, x^2 + y^2 + z^2] &= x[m_z, x] + [m_z, x]x + y[m_z, y] + [m_z, y]y = \\ &= xy + yx - yx - xy = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Таким же образом из (6) и (7) вытекает:

$$[m_z, p_x^2 + p_y^2 + p_z^2] = 0. \quad (10)$$

Итак m_z коммутирует с наблюдаемыми $(x^2 + y^2 + z^2)$ и $(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$. Поэтому m_z коммутирует и с оператором Гамильтона H , который, согласно формуле (1), есть функция этих двух наблюдаемых. Таким же образом доказывается, что m_x и m_y коммутируют с H . Поэтому момент количества движения есть постоянная, как и в классической механике.

Равенства (8) могут быть переписаны в векторной форме

$$\mathbf{m} \times \mathbf{m} = i\hbar \mathbf{m} \quad (11)$$

Если мы имеем несколько частиц с моментами количества движения m_1, m_2, \dots то соотношению (11) будет удовлетворять каждая из них в отдельности, т. е.

$$\mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_r = i\hbar \mathbf{m}_r$$

Каждый из моментов количества движения m_1, m_2, \dots будет коммутировать со всеми остальными, а поэтому

$$\mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_s + \mathbf{m}_s \times \mathbf{m}_r = 0 \quad (r \neq s).$$

Поэтому, если $\mathbf{M} = \sum_r \mathbf{m}_r$ есть полный момент количества движения, то

$$\begin{aligned} \mathbf{M} \times \mathbf{M} &= \sum_r \mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_r = \sum_r \mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_r + \sum_{r < s} (\mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_s + \mathbf{m}_s \times \mathbf{m}_r) = \\ &= i\hbar \sum_r \mathbf{m}_r = i\hbar \mathbf{M}. \end{aligned} \quad (12)$$

Мы получили равенство такого же вида, как (11); это значит, что составляющие по координатным осям момента количества движения \mathbf{M} любого числа частиц удовлетворяют тем же самым перестановочным соотношениям, каким удовлетворяют и составляющие момента количества движения каждой частицы в отдельности. Поэтому формулы (8) или (11) могут считаться перестановочными соотношениями, которым обязан удовлетворять момент количеству движения вообще. Они действительно выполняются, когда речь идет о моменте количества движения системы частиц, но мы можем допустить их справедливость также и для момента количества движения любого вращающегося тела (так например в § 43 такие соотношения были постулированы для вращающегося электрона).

Введем наблюдаемую k в виде положительного квадратного корня

$$k = \left(m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

Равенства (8) показывают, что если ввести такую систему единиц, в которой $\hbar=1$, то m_x, m_y, m_z удовлетворяют тем же самым условиям, каким в § 30 удовлетворяли α, β и γ , причем наше теперешнее k соответствует величине k в § 30. Поэтому мы можем непосредственно применить к нашим наблюдаемым результаты 30-го параграфа. Таким путем мы узнаем, что k коммутирует с m_x, m_y и m_z и что собственные значения k равны целым или полужелым положительным числам, помноженным на \hbar . Таким же образом, если дано значение k' собственного числа наблюдаемой k , то возможные значения (собственные числа) наблюдаемых m_x, m_y и m_z суть

$$k' - \frac{1}{2} \hbar, k' - \frac{3}{2} \hbar, k' - \frac{5}{2} \hbar, \dots, -k' + \frac{1}{2} \hbar.$$

Они являются следовательно целыми или полужелыми числами \hbar смотря по тому, является ли k' полужелым или числом \hbar . Однако, используя дальше тот факт, что наблюдаемые m_x, m_y и m_z могут быть представлены в виде (2), мы можем показать, что их собственные числа являются целыми, а следовательно собственные значения k -полужелыми.

В самом деле, мы знаем, что m_z может быть представлен оператором $-i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$,

который при переходе к цилиндрическим координатам ρ и φ по формулам $x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$ превращается в $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$. Собственная функция этого оператора должна иметь вид

$f(\rho) e^{\frac{im'z\varphi}{\hbar}}$, где m' его собственное число, $f(\rho)$ произвольная функция ρ . Но в нашей теории

повсюду предполагается, что собственная функция должна быть однозначной функцией, а поэтому m_z' должен быть целым кратным \hbar . Таким же образом доказывается, что m_x и m_y , собственные числа также должны быть целыми. Итак собственные значения составляющих момента количества движения движущейся по орбите частицы должны быть целыми кратными \hbar , хотя, вообще говоря, составляющие момента количества движения, удовлетворяющие перестановочным соотношениям (8), но не имеющие вида (2), могут иметь не только, целые, но и полуцелые собственные числа. Собственные числа момента количества движения электронного спина в § 43 были полуцелыми.

Составляющие момента количества движения по различным направлениям не коммутируют друг с другом; поэтому, вообще говоря, нельзя одновременно приписывать им численные значения. Самое большее, что можно сделать, это - приписать определенное численное значение составляющей момента количества движения по одному направлению. При этом механическая система придет в такое состояние, которое, говоря языком теории Бора, пространственно проквантовано по этому направлению. Существует однако один частный случай, когда всем составляющим можно одновременно приписать численные значения, а именно им всем можно приписать значение нуль, так как это не будет противоречить перестановочным соотношениям (8). В результате получится состояние без момента количества движения, в котором $k = \frac{1}{2}\hbar$, причем пространственное квантование произведено по всем направлениям сразу.

§ 45. ПЕРЕХОД К ПОЛЯРНЫМ КООРДИНАТАМ.

Для дальнейшего рассмотрения задачи о движении частицы в центральном силовом поле удобно ввести полярные координаты. Сперва введем радиус r определенный как положительный квадратный корень:

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}.$$

Вычисляя его скобки Пуассона с наблюдаемыми p_x, p_y, p_z , мы получим с помощью формулы (16) главы VI:

$$[r, p_x] = \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}; \quad [r, p_y] = \frac{y}{r}; \quad [r, p_z] = \frac{z}{r},$$

точь в точь как в классической теории. Можно было бы вычислить те же скобки Пуассона также и по способу, которым в § 39 вычислялась скобка Пуассона $[x, H]$.

Введем теперь наблюдаемую p_r посредством равенства

$$p_r = r^{-1}(xp_x + yp_y + zp_z - i\hbar) \quad (13)$$

Ее скобка Пуассона с наблюдаемой r определяется равенством:

$$\begin{aligned} r[r, p_r] &= [r, rp_r] = [r, xp_x + yp_y + zp_z] = \\ &= x[r, p_x] + y[r, p_y] + z[r, p_z] = \\ &= x \frac{x}{r} + y \frac{y}{r} + z \frac{z}{r} = r. \end{aligned}$$

Поэтому

$$[r, p_r] = 1 \quad \text{или} \quad rp_r - p_r r = i\hbar,$$

т. е. наблюдаемая p_r канонически-сопряжена с r . Собственные значения r должны быть положительны или равны нулю, так как r есть, согласно определению, положительный квадратный корень; поэтому мы пришли в противоречие с результатом, полученным в конце § 19, согласно которому наблюдаемая лишь в том случае может иметь канонически-сопряженную, если ее собственными числами являются все числа от $-\infty$ до $+\infty$. Это противоречие происходит оттого, что наблюдаемая p_r , определенная равенством (13), в строгом смысле слова не существует, так как r имеет собственное число нуль и значит r^{-1} в строгом смысле слова не существует. Несмотря на этот недостаток, наблюдаемая p_r полезна для изучения движения в центральном силовом поле. Наши уравнения, в которых часто будет попадаться p_r , а иногда r^{-1} независимо от p_r , строго говоря неверны; но ошибка при этом ограничивается лишь одной точкой $r=0$, а это ведь слишком маленькая область пространства для того, чтобы сделать неправильными физические следствия из наших уравнений.

Наблюдаемая p_r , определенная равенством (13), вещественна, так как ее комплексно-сопряженная \bar{p}_r удовлетворяет равенству

$$\begin{aligned} \bar{p}_r &= p_x x + p_y y + p_z z + i\hbar = \\ &= xp_x + yp_y + zp_z - 2i\hbar = \\ &= rp_r - i\hbar = p_r r, \end{aligned}$$

откуда

$$\bar{p}_r = p_r$$

Легко проверить, что обе наши новые наблюдаемые r и p_r коммутируют с моментом количества движения. Ур-ние (9) показывает, что m_z коммутирует с r^2 . Поэтому m_z должен коммутировать и с r , так как наблюдаемая r определена как положительный квадратный корень и значит все, что коммутирует с r^2 , должно коммутировать также и с r . Далее, p_r удовлетворяет соотношению

$$r[p_r, m_z] = [rp_r, m_z] = [xp_x + yp_y, m_z] = -yp_x - xp_y + xp_y + yp_x = 0.$$

Итак, r и p_r коммутируют с m_z следовательно они коммутируют также с m_x , m_y и k .

Мы можем теперь выразить функцию Гамильтона через радиальные наблюдения r , p_r и k . Обозначая через \sum_{xyz} сумму, которая получится, если в выражении, стоящем за \sum_{xyz} , подвергнуть x , y и z всем циклическим перестановкам и затем сложить, мы имеем:

$$\begin{aligned} k^2 - \frac{1}{4}\hbar^2 + \sum_{xyz} m_z^2 &= \sum_{xyz} (xp_y - yp_x)^2 = \sum_{xyz} (xp_y xp_y + yp_x yp_x - \\ &- xp_y yp_x - yp_x xp_y) = \sum_{xyz} (x^2 p_y^2 + y^2 p_x^2 - xp_y p_x y - yp_x p_x x + x^2 p_x^2 - \\ &- xp_x p_x x - 2i\hbar xp_x) = (x^2 + y^2 + z^2)(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - (xp_x + yp_y + \\ &+ zp_z) \times (p_x x + p_y y + p_z z + 2i\hbar) = r^2(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - (rp_r + i\hbar)rp_r = \\ &= r^2(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - r^2 p_r^2. \end{aligned}$$

Поэтому

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{k^2 - \frac{1}{4}\hbar^2}{r^2} \right) + V \quad (14)$$

Когда H имеет этот вид, то наблюдаемая k коммутирует не только с H , как и должно быть на том основании, что k есть константа движения, но также и со всеми наблюдаемыми, входящими в H , т. е. с r и с p_r . Поэтому, приведя H к этому виду, мы можем обращаться с k так, как если бы оно было числом. Возможными значениями для k являются его собственные числа, т. е. положительные полуцелые кратные \hbar . Уравнение Шредингера для стационарных состояний будет иметь вид:

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{k^2 - \frac{1}{4}\hbar^2}{r^2} \right) + V \right\} (r|) = H' (r|); \quad (15)$$

если k считается числом, то достаточно считать волновую функцию $(r|)$ функцией только одной переменной. Любое значение параметра H' , при котором это уравнение с дозволенным значением k имеет решение, удовлетворяющее определенным предельным условиям (см. ниже), является возможным значением энергии системы. Уровни энергии (за исключением случая $k = \frac{1}{2}\hbar$) все вырождены; каждый такой уровень соответствует нескольким независимым стационарным состояниям с различными дозволенными значениями прямоугольных составляющих момента количества движения. Для любого значения k число этих независимых состояний, соответствующих одному и тому же значению энергии, равно нечетному числу $\frac{2k}{\hbar}$.

Если написать уравнение Шредингера в первоначальных прямоугольных координатах x , y , z , то получится:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right\} (xyz|) = H' (xyz|), \quad (16)$$

где ∇^2 - оператор Лапласа $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Преобразуя к полярным координатам r , ϑ и φ , получаем:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V \right\} (r|\vartheta|\varphi) = H' (r|\vartheta|\varphi).$$

Решения этого уравнения имеют вид:

$$(r|\vartheta|\varphi) = \chi(r) S_n(\vartheta|\varphi),$$

где S_n — лапласова сферическая шаровая функция порядка n , удовлетворяющая уравнению

$$\left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) S_n(\vartheta|\varphi) = -n(n+1) S_n(\vartheta|\varphi),$$

где n - целое число; $\chi(r)$ есть функция одного только радиуса, удовлетворяющая уравнению

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) + V \right\} \chi(r) = H' \chi(r). \quad (17)$$

Это уравнение, как и (15), отличается тем свойством, что значения H' , для которых оно имеет решения, являются возможными уровнями энергии системы.

Эквивалентность ур-ий (15) и (17) видна из того, что если в ур-ии (15) положить $(r|) = r\chi(r)$ и $n = \frac{k}{\hbar} - \frac{1}{2}$, то как раз получается ур-ие (17). Тот факт, что обе собственные функции $(r|)$ и $\chi(r)$ не тождественно равны, а отличаются множителем r , связан с различием в их физическом смысле. Решение $(r|)$ ур-ия (15) представляет состояние, в котором вероятность того, что частица лежит в сферическом слое между r и $r + dr$, равна $|r|^2 dr$. С другой стороны, решение $(xyz|)$ ур-ия (16) представляет состояние, в котором вероятность того, что частица лежит в малом объеме $dxdydz$, равна $|(xyz)|^2 dxdydz$ или же $|\chi(r) S_n(\vartheta|\varphi)|^2 dxdydz$, а поэтому вероятность того, что она лежит в сферическом слое между r и $r + dr$, должна быть пропорциональна $|\chi(r)|^2 r^2 dr$. Поэтому и из физических соображений следует, что $(r|)$ должна быть пропорциональна $r\chi(r)$.

Следует заметить, что не всякое решение ур-ия (17), помноженное на соответствующую шаровую функцию, даст решение ур-ия (16), так как может случиться, что это решение не удовлетворит ур-ию (16) в начале координат. Легко догадаться, каким образом это может произойти, если рассмотреть тот частный случай, когда потенциал V исчезает (случай свободной частицы). Если положить $H' = 0$, то ур-ие (16) принимает вид:

$$\nabla^2 (xyz|) = 0, \quad (18)$$

а ур-ие (17):

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{n(n+1)}{r^2} \right\} \chi(r) = 0. \quad (19)$$

В частности $\chi(r) = \frac{1}{r}$ является при $n=0$ решением ур-ия (19), но, будучи помножено на соответствующую шаровую функцию $S_0 = 1$, это решение не удовлетворяет ур-ию (18), так как хотя $\nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right)$ исчезает при каждом конечном значении r , интеграл этого выражения, распространенный на любой объем, содержащий начало координат, равен 4π , а потому:

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = 4\pi \delta(x) \delta(y) \delta(z).$$

Поэтому решение $\chi(r) = \frac{1}{r}$ ур-ия (19) не представляет стационарного состояния системы.

Далее, решение $\chi(r) = \frac{1}{r^2}$ (19) при $n=1$, будучи помножено на соответствующую шаровую функцию $S_1 = \cos \vartheta$, дает волновую функцию $(\chi y z)$, обладающую тем свойством, что интеграл квадрата ее абсолютной величины, распространенный на любой, хотя бы и очень малый объем, содержащий начало координат, бесконечен. Эта волновая функция должна изображать состояние, в котором частица наверно находится в начале координат, а это не может быть стационарным состоянием с нулевой энергией в том случае, когда речь идет о свободной частице. Таким же образом для любого n в ур-ии (19) из двух решений $\chi(r) = r^n$ и $\chi(r) = r^{-n-1}$ второе не дает представителя стационарного состояния системы.

Отсюда явствует, что ур-ие (17) не может заменить ур-ия (16) как необходимое и достаточное условие для представителя стационарного состояния. Следует дополнить ур-ие (17) надлежащим предельным условием в точке $r=0$. Всякое решение $\chi(r)$ ур-ия (17), для которого интеграл $\int_0^{\infty} r^2 |\chi(r)|^2 dr$ расходится, должно быть конечно отброшено; должны быть отброшены также и те решения, для которых этот интеграл сходится, но которые под действием оператора ∇^2 дают результат, содержащий δ -функцию и обращающийся в бесконечность в начале координат. Эти условия показывают, что допускаются лишь те решения, которые, если и обращаются в бесконечность при $r \rightarrow 0$, делают это более медленно, чем $\frac{1}{r}$. Соответствующее предельное условие для функции $(r|)$ в ур-ии (15) состоит в том, что она должна стремиться к нулю при $r \rightarrow 0$.

При $r = \infty$ также существуют предельные условия для волновой функции. Если нас интересуют только «замкнутые» состояния, т. е. состояния, в которых частица не уходит на бесконечность, то мы должны потребовать, чтобы интеграл $\int_0^{\infty} |(r|^2)| dr$ или $\int_0^{\infty} r^2 |\chi(r)|^2 dr$ сходился. Физически допускаются однако не только замкнутые состояния, так как возможны и такие состояния, в которых частица приходит с бесконечности, рассеивается центральным силовым полем и вновь уходит на бесконечность. Для таких состояний волновая функция $(\chi y z)$ может оставаться конечной при $r \rightarrow \infty$. Таким состояниям будет посвящена глава X, носящая заглавие «Задачи о столкновениях». Во всяком случае, для того, чтобы волновая функция $(\chi y z)$ представляла состояние, имеющее физический смысл, она не должна стремиться к бесконечности при $r \rightarrow \infty$.

§ 46 УРОВНИ ЭНЕРГИИ ВОДОРОДНОГО АТОМА.

Предыдущие рассуждения могут быть применены к проблеме водородного атома, если пренебречь релятивистской зависимостью массы от скорости и электронным спином.

Потенциальная энергия V равна в этом случае $-\frac{e^2}{r}$, так что ур-ие (15) принимает вид

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{1}{4r^2} + \frac{2me^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} \right] (r|) = -\frac{2mH'}{\hbar^2} (r|), \quad (20)$$

если ввести новую наблюдаемую k отличающуюся множителем \hbar^{-1} от прежнего k . Подробный анализ этого уравнения был сделан Шредингером.¹ Мы вычислим здесь его собственные значения H' , исходя из разложения собственных функций в степенные ряды.

Удобно положить

$$(r|) = f(r) e^{-\frac{r}{a}}, \quad (21)$$

¹ E. Schrorlinger, Ann. d. Phys., 79, 361, 1926.

где $f(r)$ - новая функция и где a есть один из квадратных корней

$$a = \pm \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2mH'}} \quad (22)$$

Ур-ие (20) превращается в

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{a} \frac{d}{dr} - \frac{k^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + \frac{2me^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} \right\} f(r) = 0, \quad (23)$$

Мы ищем решение этого уравнения в форме степенного ряда

$$f(r) = \sum_s c_s r^s, \quad (24)$$

в котором последовательные значения s отличаются друг от друга на единицу, хотя сами они могут и не быть целыми числами. Подставляя (24) в (23), мы получаем:

$$\sum_s c_s \left\{ s(s-1) r^{s-2} - \frac{2s}{a} r^{s-1} - \left(k^2 - \frac{1}{4} \right) r^{s-2} + \frac{2me^2}{\hbar^2} r^{s-1} \right\} = 0.$$

Приравнявая нулю коэффициент при r^{s-2} , мы получаем следующее соотношение между последовательными коэффициентами c_s :

$$c_s \left[s(s-1) - \left(k^2 - \frac{1}{4} \right) \right] = c_{s-1} \left[\frac{2(s-1)}{a} - \frac{2me^2}{\hbar^2} \right]. \quad (25)$$

В предыдущем параграфе мы видели, что допускаются только те волновые функции $(r|)$, которые обращаются в нуль вместе с r , а поэтому, как явствует из формулы (21), $f(r)$ должна стремиться к нулю при $r \rightarrow 0$. Поэтому ряд (24) должен обрываться со стороны s , причем наименьшее значение s должно быть положительным. Единственно возможными наименьшими значениями s будут те, которые дают коэффициент c_s в формуле (25) равным нулю, т.е. $k + \frac{1}{2}$ и $-k + \frac{1}{2}$; но ведь последнее из этих двух отрицательно или равно нулю. Поэтому наименьшее значение s должны быть целыми. Ряд (24) будет, вообще говоря, простирается в бесконечность со стороны больших s . Для больших значений s отношение двух последовательных членов ряда будет [на основании формулы (25)]

$$\frac{c_s}{c_{s-1}} r = \frac{2r}{sa}.$$

Поэтому ряд (24) всегда будет сходящимся, так как отношение двух последовательных его членов при большом s будет такое же самое, как у членов ряда

$$\sum_s \frac{1}{s!} \left(\frac{2r}{a} \right)^s, \quad (26)$$

а этот последний всегда сходится к сумме его равна $e^{\frac{2r}{a}}$.

Рассмотрим теперь поведение нашего решения $(r|)$ при больших значениях r . Необходимо различать два случая: H' положительно и H' отрицательно. Если H' отрицательно, то a [см. формулу (22)] вещественно. Допустим, что для a взято положительное значение корня. Тогда при $r \rightarrow \infty$ сумма ряда (24) будет расти до бесконечности как сумма ряда (26), т.е. по показательному закону $e^{\frac{r}{2a}}$. Из формулы (21) будет вытекать, что $(r|)$ растет до

бесконечности как $e^{\frac{r}{a}}$ и следовательно не представляет физически возможного состояния системы. Поэтому, вообще говоря, при отрицательных значениях H' не существует дозволенного решения уравнения (20). Исключение возникает только в том случае, когда ряд (24) оборвется со стороны больших s , в каковом случае все предельные условия будут выполнены. Условие для того, чтобы ряд (24) таким образом оборвался, заключается в том, чтобы коэффициент при c_{s-1} в формуле (25) обратился в нуль при каком-то значении значка $s-1$, не меньшем, чем его минимальное значение $k + \frac{1}{2}$; это условие равносильно существованию равенства

$$\frac{s}{a} - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0$$

для какого-то целого значения s , не меньшего, чем $k + \frac{1}{2}$. С помощью (22) это условие принимает вид

$$H' = -\frac{me^4}{2s^2\hbar^2} \quad (27)$$

чем и определяются уровни энергии H' . Так как s может быть любым целым числом, то формула (27) дает в согласии с опытом дискретный ряд отрицательных уровней энергии водородного атома. Каждый из них (за исключением самого глубокого, т. е. $s=1$) является вырожденным, так как тот же самый уровень встречается при различных возможных значениях k (k может быть любым положительным полуцелым числом меньше s). Это вырождение накладывается на то, которое было упомянуто в предыдущем параграфе в связи с тем, что возможны различные значения составляющих момента количества движения. Этот последний род вырождения имеет место во всяком центральном силовом поле, в то время как вырождение по отношению к различным значениям k связано с законом обратной пропорциональности квадратам расстояний и даже в случае такого специального поля исчезает, как только принять во внимание релятивистскую механику (см. главу XIII). Решение уравнения (20), в котором H' принимает одно из значений (27), при $r \rightarrow \infty$ стремится к нулю по показательному закону и представляет следовательно замкнутое состояние системы, аналогичное эллиптической орбите в теории Бора.

При любом положительном значении H' , a , вычисленное по формуле (22), будет чистым числом. Ряд (24), приблизительно совпадающий с рядом (26), будет иметь сумму, которая остается конечной при $r \rightarrow \infty$. Поэтому и функция $(r|)$, согласно формуле (21), будет оставаться конечной при $r \rightarrow \infty$ и будет следовательно дозволённым решением уравнения (20), поскольку соответствующая собственная функция $(xyz|)$ будет стремиться к нулю, как $\frac{1}{r}$ - при $r \rightarrow \infty$. Поэтому дозволёнными являются не только дискретные отрицательные уровни энергии (27), но и все положительные уровни энергии. Состояния с положительной энергией не замкнуты, так как их представители $(r|)$ таковы, что интеграл $\int_0^\infty |(r)|^2 dr$ расходится. Эти состояния соответствуют гиперболическим орбитам теории Бора.

§ 47. ПРАВИЛА ОТБОРА.

Если дан гейзенберговский представитель вектора D , т. е. полного электрического момента системы, может случиться, что многие из его матричных элементов $(\alpha'|D|\alpha'')$ обращаются в нуль. Может случиться даже, что все матричные элементы исчезают за исключением лишь тех, у которых α' и α'' удовлетворяют какому-то специальному соотношению. Если это так, то, согласно гейзенберговской интерпретации матричных элементов, в системе может произойти переход, сопровождающийся излучением, только между теми состояниями, номера которых (α' и α'') как раз удовлетворяют этому соотношению. В этом случае мы будем говорить, что существует правило отбора, допускающее только некоторые вполне определенные переходы.¹ Вообще говоря, необходимо рассмотреть в отдельности прямоугольные составляющие D_x , D_y , D_z , вектора D и для каждой из них полупить условие того, что ее матричный элемент $(\alpha'|D|\alpha'')$ не обращается в нуль. Часто будет случаться, что для дозволённых переходов $\alpha \rightarrow \alpha''$, т. е. для таких переходов, у которых вектор $(\alpha'|D|\alpha'')$ не обращается в нуль, часть прямоугольных составляющих $(\alpha'|D_x|\alpha'')$, $(\alpha'|D_y|\alpha'')$, $(\alpha'|D_z|\alpha'')$ равна нулю. Это наложит определенные условия на направление испускания и на состояние

¹ Следует иметь в виду, что гейзенберговская интерпретация матричных элементов электрического момента является приближенной и что следовательно вероятность, переходов, запрещенных правилом отбора, не равна нулю, хотя и очень мала. В некоторых случаях такие «запрещенные» переходы действительно наблюдаются.

поляризации испущенного излучения; согласно гипотезе Гейзенберга эти условия будут такими же, как классические условия, относящиеся к излучению электрического диполя, электрический момент которого равен вектору

$$(\alpha' | \mathbf{D} | \alpha') + (\alpha'' | \mathbf{D} | \alpha'').$$

Существует общий способ получения всех правил отбора. Этот способ таков. Пусть D будет одной из прямоугольных составляющих вектора \mathbf{D} . Нужно получить алгебраическое уравнение, связывающее D и наблюдаемые α , которое было бы линейным по отношению к D и не содержало бы никаких других наблюдаемых, кроме D и α . Такое уравнение будет иметь вид:

$$\sum_r f_r D g_r = 0, \quad (28)$$

где f_r и g_r зависят только от наблюдаемых α . Если это уравнение переписать в представителях, то мы получим:

$$\sum_r f_r(\alpha') (\alpha' | D | \alpha'') g_r(\alpha'') = 0,$$

или

$$(\alpha' | D | \alpha'') \sum_r f_r(\alpha') g_r(\alpha'') = 0.$$

170

Отсюда следует, что $(\alpha' | D | \alpha'') = 0$, если только не соблюдается условие

$$\sum_r f_r(\alpha') g_r(\alpha'') = 0. \quad (29)$$

Это условие, представляющее ту связь, которая должна существовать между α' и α'' для того, чтобы матричный элемент $(\alpha' | D | \alpha'')$ мог не обращаться в нуль, является условием отбора, поскольку идет речь о составляющей D вектора \mathbf{D} .

Выведем теперь правило отбора для m_z и k в случае электрона, движущегося в центральном силовом поле. Составляющие электрического момента в этом случае пропорциональны прямоугольным координатам x , y , z . Сперва рассмотрим m_z . Мы знаем, что m_z коммутирует с z , т. е.

$$m_z z - z m_z = 0.$$

Это и есть уравнение нужного нам типа (28); из него вытекает правило отбора

$$m_z' - m_z'' = 0$$

для составляющей электрического момента в направлении оси z . Далее, из ур-ий (8) следует:

$$[m_z, [m_y, x]] = [m_z, y] = -x \quad \text{или} \quad m_z^2 x - 2m_z x m_z + x m_z^2 - \hbar^2 x = 0.$$

Это опять уравнение типа (28); из него вытекает правило отбора для составляющей электрического момента в направлении оси x :

$$m_z'^2 - 2m_z' m_z'' + m_z''^2 - \hbar^2 = 0 \quad \text{или} \quad (m_z' - m_z'' - \hbar)(m_z' - m_z'' + \hbar) = 0.$$

Для составляющей электрического момента в направлении оси y получается такое же правило. Итак правила отбора для m_z таковы: для того, чтобы было возможно испускание лучистой энергии с поляризацией, соответствующей электрическому диполю, направленному по оси z , m_z' должно оставаться неизменным: оно должно меняться на $\pm \hbar$ для того, чтобы было возможно испускание, соответствующее диполю, направленному по оси x или y .

Возможно определить более точно состояние поляризации лучистой энергии, испущенной при переходе, в котором m_z' меняется на $+\hbar$; для этого нужно рассмотреть условие исчезновения матричных элементов наблюдаемых $x + iy$ и $x - iy$. Имеем:

$$[m_z, x + iy] = y - ix = -i(x + iy) \quad \text{или} \quad m_z(x + iy) - (x + iy)(m_z + \hbar) = 0.$$

Это вновь соотношение типа (28). Из него следует равенство $m_z' - m_z'' - \hbar = 0$, представляющее условие того, что $(m_z' | x + iy | m_z'')$ не обращается в нуль. Таким же образом равенство $m_z' - m_z'' + \hbar = 0$ есть условие того, что $(m_z' | x - iy | m_z'')$ не обращается в нуль. Отсюда следует

$$(m_z' | x - iy | m_z'' - \hbar) = 0$$

или

$$(m'_z | x | m'_z - \hbar) = i(m'_z | y | m'_z - \hbar) = (a + ib) e^{i\omega t},$$

где a , b и ϕ вещественны. Таким же образом

$$(m'_z - \hbar | x | m'_z) = -i(m'_z - \hbar | y | m'_z) = (a - ib) e^{-i\omega t}.$$

Поэтому вектор $(m'_z | D | m'_z - \hbar) + (m'_z - \hbar | D | m'_z)$, определяющий состояние поляризации излучения, испускаемого при переходе $m'_z \rightarrow m''_z = m'_z - \hbar$, имеет следующие три составляющие:

$$\begin{aligned} (m'_z | x | m'_z - \hbar) + (m'_z - \hbar | x | m'_z) &= (a + ib) e^{i\omega t} + (a - ib) e^{-i\omega t} = \\ &= 2a \cos \omega t - 2b \sin \omega t \\ (m'_z | y | m'_z - \hbar) + (m'_z - \hbar | y | m'_z) &= -i(a + ib) e^{i\omega t} + i(a - ib) e^{-i\omega t} = \\ &= 2a \sin \omega t + 2b \cos \omega t \\ (m'_z | z | m'_z - \hbar) + (m'_z - \hbar | z | m'_z) &= 0. \end{aligned}$$

Из вида этих составляющих явствует, что лучистая энергия, испущенная в направлении z , должна быть поляризована по кругу; лучистая энергия, испущенная в любом направлении, лежащем в плоскости xy , должна быть линейно поляризована в этой же плоскости; промежуточным направлениям испускания соответствует эллиптическая поляризация. Направление круговой поляризации лучей, испущенных в направлении оси z , зависит от того, положительна или отрицательна ω . А это последнее зависит от того, какое из двух состояний m'_z и $m''_z = m'_z - \hbar$ обладает большей энергией.

Определим теперь правило отбора для k . Мы имеем:

$$\begin{aligned} [k^2, z] &= [m_x^2, z] + [m_y^2, z] = \\ &= -ym_x - m_x y + xm_y + m_y x = \\ &= 2(m_x x - m_y y + i\hbar z) = \\ &= 2(m_x x - m_y y) = 2(xm_x - m_y y). \end{aligned}$$

Таким же образом

$$[k^2, x] = 2(y m_z - m_y z) \quad \text{и} \quad [k^2, y] = 2(m_x z - x m_z).$$

Отсюда следует:

$$\begin{aligned} [k^2, [k^2, z]] &= 2(k^2, m_x x - m_y y + i\hbar z) = \\ &= 2m_y [k^2, x] - 2m_x [k^2, y] + 2i\hbar [k^2, z] = \\ &= 4m_y (y m_z - m_y z) - 4m_x (m_x z - x m_z) + \\ &+ 2(k^2 z - z k^2) = \\ &= 4(m_x x + m_y y + m_z z) m_z - 4(m_x^2 + m_y^2 + m_z^2) z + \\ &+ 2(k^2 z - z k^2). \end{aligned}$$

Из формулы (3) вытекает, что первый член равен нулю, а поэтому

$$[k^2, [k^2, z]] = -4(k^2 - \frac{1}{4}\hbar^2) z + 2(k^2 z - z k^2) = \\ = -2(k^2 z + z k^2) + \hbar^2 z,$$

откуда

$$k^4 z - 2k^2 z k^2 + z k^4 - 2\hbar^2 (k^2 z + z k^2) + \hbar^4 z = 0. \quad (31)$$

Аналогичные уравнения имеют место для x и y . Все эти уравнения являются как раз уравнениями нужного нам типа (28), и это дает нам правило отбора:

$$k'^4 - 2k'^2 k''^2 + k''^4 - 2\hbar^2 (k'^2 + k''^2) + \hbar^4 = 0$$

или

$$(k' + k'' + \hbar) (k' + k'' - \hbar) (k' - k'' + \hbar) (k' - k'' - \hbar) = 0.$$

Переход между двумя состояниями k' и k'' возможен только тогда, когда один из этих четырех множителей исчезает.

Но первый множитель $(k' + k'' + \hbar)$ никогда не может обратиться в нуль, так как все собственные значения k положительны.

Второй $(k' + k'' - \hbar)$ может обратиться в нуль только тогда, когда $k' = k'' = \frac{1}{2}\hbar$. Но переход между двумя состояниями с этими значениями k запрещен правилом отбора для m_z , что обнаруживается из следующего рассуждения: если оба состояния таковы, что $k' = \frac{1}{2}\hbar$ и

$k'' = \frac{1}{2}\hbar$, то на основании того, что сказано в конце §44, все прямоугольные составляющие момента количества движения должны обратиться в нуль в обоих состояниях, т. е. $m'_x = m'_y = m'_z = 0$ и $m''_x = m''_y = m''_z = 0$. Но правило отбора для m_z показывает, что матричные элементы наблюдаемых x и y , относящиеся к этой паре состояний, исчезают, так как значение m_z при этом переходе не меняется; аналогичные правила отбора для m_x и m_y показывают, что матричный элемент наблюдаемой z также исчезает. Поэтому переходы между этими двумя состояниями не могут происходить. Правило отбора для k принимает теперь более простой вид:

$$(k' - k'' + \hbar)(k' - k'' - \hbar) = 0;$$

это значит, что k должно измениться на $\pm \hbar$. Правило отбора может быть записано также и в виде

$$k'^2 - 2k'k'' + k''^2 - \hbar^2 = 0;$$

а так как это есть условие того, что матричный элемент $(k'|z|k'')$ не обращается в нуль, то мы получаем уравнение:

$$k'^2 z - 2k'zk'' + zk''^2 - \hbar^2 z = 0 \quad \text{или} \quad [k, [k, z]] = -z, \quad (32)$$

результат, который не легко было бы получить более прямым путем.

§ 48. ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА В СЛУЧАЕ ВОДОРОДНОГО АТОМА.

Рассмотрим теперь систему, состоящую из водородного атома в однородном магнитном поле.

Функция Гамильтона (1), в которой потенциальная энергия V имеет вид $-\frac{e^2}{r}$, соответствующий водородному атому без внешнего поля, должна быть изменена вследствие наличия магнитного поля; согласно классической механике это изменение заключается в том, что составляющие количества движения p_x, p_y, p_z заменяются на $p_x + \frac{e}{c}A_x, p_y + \frac{e}{c}A_y, p_z + \frac{e}{c}A_z$ являются составляющими вектор-потенциала, описывающего магнитное поле.¹ Для

¹ Если функции Гамильтона имеет вид то канонические уравнения

$$H = \frac{1}{2m} \left[\left(p_x + \frac{e}{c}A_x \right)^2 + \left(p_y + \frac{e}{c}A_y \right)^2 + \left(p_z + \frac{e}{c}A_z \right)^2 \right] + V,$$

то канонические уравнения

$$\dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x}$$

и т.д. принимают вид:

$$\dot{p}_x = -\frac{e}{cm} \left[\left(p_x + \frac{e}{c}A_x \right) \frac{\partial A_x}{\partial x} + \left(p_y + \frac{e}{c}A_y \right) \frac{\partial A_y}{\partial x} + \left(p_z + \frac{e}{c}A_z \right) \frac{\partial A_z}{\partial x} \right] - \frac{\partial V}{\partial x}$$

и т.д. для

$$p_y, p_z, y, z,$$

Исключая

$$p_x, p_y, p_z$$

Получаем:

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= -\frac{1}{m} \left[\left(p_x + \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_x}{\partial t} + x \frac{\partial A_x}{\partial x} + y \frac{\partial A_x}{\partial y} + z \frac{\partial A_x}{\partial z} \right) \right) \frac{\partial A_x}{\partial x} + \right. \\ &= -\frac{1}{m} \left[-\frac{e}{c} \left(x \frac{\partial A_x}{\partial x} + y \frac{\partial A_y}{\partial x} + z \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \frac{\partial V}{\partial x} + \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_x}{\partial t} + x \frac{\partial A_x}{\partial x} + y \frac{\partial A_x}{\partial y} + z \frac{\partial A_x}{\partial z} \right) \right]. \end{aligned}$$

Полагая $V = -eA_0$ (A_0 - скалярный потенциал), получим:

$$m\ddot{x} = -\frac{e}{c} \left[y \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - z \left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} \right) \right] + e \left(\frac{\partial A_0}{\partial x} + \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} \right),$$

т.е.

$$m\ddot{x} = -\frac{e}{c} (y \mathcal{H}_z - z \mathcal{H}_y) - eE_x;$$

того, чтобы получить однородное магнитное поле H в направлении оси z , нужно положить $A_x = -\frac{1}{2}Hy$, $A_y = \frac{1}{2}Hx$, $A_z = 0$. Гамильтонова функция классической механики будет иметь вид:

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \left(p_x - \frac{1}{2} \frac{e}{c} \mathcal{H}y \right)^2 + \left(p_y + \frac{1}{2} \frac{e}{c} \mathcal{H}x \right)^2 + p_z^2 \right\} - \frac{e^2}{r}$$

Можно перенести эту классическую функцию Гамильтона и в квантовую механику, если прибавить к ней член, соответствующий электронному спину. Электрон имеет магнитный момент $-\frac{e\hbar}{2mc}\sigma$; его магнитная энергия в магнитном поле будет равна $\frac{e\hbar H}{2mc}\sigma_z$. Поэтому в квантовой теории функция Гамильтона будет иметь вид:

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \left(p_x - \frac{1}{2} \frac{e}{c} \mathcal{H}y \right)^2 + \left(p_y + \frac{1}{2} \frac{e}{c} \mathcal{H}x \right)^2 + p_z^2 \right\} - \frac{e^2}{r} + \frac{e\hbar \mathcal{H}}{2mc} \sigma_z \quad (33)$$

Строго говоря, здесь должны были бы также фигурировать, и другие члены, соответствующие взаимодействию магнитного момента электрона с электрическим полем атомного ядра; но такое взаимодействие очень невелико (такого же порядка величины, как релятивистская зависимость массы электрона от его скорости), поэтому здесь мы им пренебрежем и примем его во внимание только в релятивистской теории электрона, которая будет рассмотрена в главе XIII.

Если магнитное поле не слишком велико, то можно пренебречь членами, содержащими H^2 так что функция Гамильтона (32) превращается в

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{e^2}{r} + \frac{e\mathcal{H}}{2mc} (xp_y - yp_x) + \frac{e\hbar \mathcal{H}}{2mc} \sigma_z = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{e^2}{r} + \frac{e\mathcal{H}}{2mc} (m_z + \hbar \sigma_z) \quad (34)$$

Добавочные члены, возникающие в магнитном поле, имеют вид $\frac{eH}{2mc}m_z$ и $\frac{eH}{2mc}\hbar\sigma_z$.

Оба они коммутируют с функцией Гамильтона и являются поэтому константами движения, что значительно облегчает нашу задачу. Стационарными состояниями системы, т. е. собственными состояниями наблюдаемой (34), будут те собственные состояния наблюдаемой

$\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{e^2}{r}$ которые будут в тоже время собственными состояниями наблюдаемых m_z и σ_z или, по крайней мере, наблюдаемой $m_z + \hbar\sigma_z$. Уровнями энергии системы будут ее уровни энергии в отсутствии поля (см. формулу 27, если мы ограничимся замкнутыми состояниями) плюс одно из собственных значений наблюдаемой $\frac{eH}{2mc}(m_z + \hbar\sigma_z)$.

Таким образом любое стационарное состояние системы в отсутствие поля, подвергнутое пространственному квантованию в направлении z , т. е. обладающее определенным численным значением m'_z наблюдаемой m_z (m'_z в целое число раз превосходит \hbar) и удовлетворяющее кроме того условию, что σ_z имеет в нем определенное численное значение $\sigma'_z = \pm 1$, будет стационарным состоянием также и при наличии поля. Энергия в этом стационарном состоянии увеличится в присутствии поля на величину, состоящую из двух частей: одна из них, равная $\frac{eH}{2mc}m'_z$, связана с орбитальным движением и может считаться

возникшей благодаря наличию орбитального магнитного момента $-\frac{em'_z}{2mc}$; другая же часть,

равная $\frac{eH}{2mc}\hbar\sigma'_z$, возникает благодаря спину. Отношение орбитального магнитного момента к

это и есть известная формула Лоренца для силы, действующей на электрон с зарядом $-e$ в произвольном электромагнитном поле.

орбитальному моменту количества движения m'_z равно $-\frac{e}{2mc}$, т. е. вдвое меньше, чем отношение магнитного момента электронного спина к моменту количества движения электронного спина. Этот факт иногда называют магнитной аномалией спина.

Так как m_z входит теперь в величину уровней энергии, то правило отбора для m_z , полученное в предыдущем параграфе, сможет быть подвергнуто непосредственной экспериментальной проверке. Согласно этому правилу отбора m_z может изменяться в акте испускания на \hbar , 0 и $-\hbar$. Это значит, что испущенное количество энергии будет отличаться на $-\frac{e\hbar H}{2mc}$, 0 и $\frac{e\hbar H}{2mc}$ от того, которое испускается в отсутствии поля (σ_z не будет изменяться, так как оно коммутирует с электрическим моментом системы). Поэтому частота испущенного излучения будет отличаться на $-\frac{eH}{4\pi mc}$, 0 и $\frac{eH}{4\pi mc}$ от частоты того же излучения в отсутствии

поля, так что каждая спектральная линия, испускаемая в отсутствии поля, расщепится при наличии поля на три составляющие. Если рассмотреть излучение, испущенное в направлении z , то из формулы (30) следует, что две боковые составляющие расщепленной спектральной линии будут поляризованы по кругу, а средняя будет иметь интенсивность нуль. Это находится в согласии с опытом, а также и с классической теорией явления Зеемана. Однако согласие с классической теорией прекращается, если учесть релятивистские поправки и взаимодействие спина с электрическим полем ядра.

§ 49. СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ.

Предположим, что мы имеем две частицы, движущиеся в центральном силовом поле; m есть момент количества движения одной из них, а μ - момент количества движения второй. Величинами этих векторов служат наблюдаемые k и κ , где k определена формулой (12), а κ формулой

$$\kappa = \left(\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Полным моментом количества движения будет вектор $M = m + \mu$ величина которого есть

$$K = \left(M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Обе наблюдаемые и коммутируют со всеми составляющими векторов m , μ и M . Так как k , κ и K коммутируют между собою, то можно одновременно приписать им всем численные значения. Наша задача заключается теперь в определении возможных численных значений K , когда численные значения k и κ заданы.

Легчайший способ решения этой задачи заключается в том, что мы припишем k и κ заданные численные значения (ведь они коммутирует со всеми наблюдаемыми, упомянутыми в задаче) и затем применим такое представление, в котором представителями m_z и μ_z служат диагональные матрицы. При этом можно игнорировать все те наблюдаемые, описывающие нашу механическую систему, которые не являются функциями составляющих m и μ . Тогда все наши матрицы будут иметь конечное число строк и столбцов; каждая строчка и каждый столбец будут отмечены одним из значений $k - \frac{1}{2}\hbar, k - \frac{3}{2}\hbar, \dots, -k + \frac{1}{2}\hbar$ собственного значения m'_z наблюдаемой m_z и одним из значений $\kappa - \frac{1}{2}\hbar, \kappa - \frac{3}{2}\hbar, \dots, -\kappa + \frac{1}{2}\hbar$ собственного значения μ'_z и μ_z наблюдаемой. Возможными значениями

$$M'_z = m'_z + \mu'_z$$

будут числа

$$k + \kappa - \hbar, k + \kappa - 2\hbar, k + \kappa - 3\hbar, \dots, -k - \kappa + \hbar.$$

В следующей схеме указано, сколько раз встречается каждое из этих значений (для определенности сделано предположение $k \geq \kappa$):

$$\begin{array}{ccccccc}
 k + \kappa - \hbar & k + \kappa - 2\hbar & k + \kappa - 3\hbar & \dots & k - \kappa & k - \kappa - \hbar & \dots \\
 1 & 2 & 3 & \dots & 2\kappa & 2\kappa & \\
 & & -k + \kappa & -k + \kappa - \hbar & \dots & -k - \kappa + \hbar & \\
 & & 2\kappa & 2\kappa - 1 & \dots & 1 &
 \end{array} \quad (35)$$

Если произвести каноническое преобразование к такому представлению, в котором K и M_z диагональны, то количество строк и столбцов матриц, соответствующих определенному значению M'_z наблюдаемой M_z , должно остаться неизменным. Если K', K'', \dots суть возможные значения K , то будут строки и столбцы, соответствующие значениям $K' - \frac{1}{2}\hbar, K' - \frac{3}{2}\hbar, \dots, -K' + \frac{1}{2}\hbar$ наблюдаемой M_z , а также строки и столбцы, соответствующие значениям $K'' - \frac{1}{2}\hbar, K'' - \frac{3}{2}\hbar, \dots, -K'' + \frac{1}{2}\hbar$ наблюдаемой M_z и т. д. Сравнивая эти возможные значения M_z со значениями (35), мы видим, что возможные значения K должны быть:

$$k + \kappa - \frac{1}{2}\hbar, k + \kappa - \frac{3}{2}\hbar, k + \kappa - \frac{5}{2}\hbar, \dots, k - \kappa + \frac{1}{2}\hbar. \quad (36)$$

Этот результат имеет общее значение: он применим к сложению любых двух моментов количества движения, а не обязательно только к орбитальным моментам количества движения двух частиц. Так например его можно применить к орбитальному моменту количества движения и к спину электрона. В этом случае, поскольку величина момента количества движения спина равна $\kappa = \hbar$, схема (36) показывает, что при величине k орбитального момента количества движения результирующий момент количества движения может иметь или величину $k + \frac{1}{2}\hbar$ или величину $k - \frac{1}{2}\hbar$.

В нашем распоряжении теперь есть общий метод, применимый к сложным атомным системам. В изолированной системе полный момент количества движения M всегда является константой движения; его величина K и одна из его составляющих M_z будут константами движения, коммутирующими друг с другом. Попробуем выразить M в виде суммы двух моментов количества движения m и μ , величины которых (k и κ) являются константами движения. Если это нам удастся, попробуем представить одну из этих частей, например m , в виде суммы двух моментов количества движения m_1 и m_2 , величины которых (k_1 и k_2) являются константами движения, и т. д. и т. д. Таким образом мы получаем ряд констант движения $M_z, K, k, \kappa, k_1, k_2, \dots$, которые все коммутируют друг с другом и могут быть приняты, если только их имеется достаточное количество, в качестве основы для гейзенберговского представления. Возможные численные значения K, k, κ, \dots характеризующие столбец и строчку в таком матричном представлении, должны удовлетворять общему правилу (36). Энергия будет некоторой функцией K, k, κ, k_1, k_2 , но не будет зависеть от M_z . Вообще говоря, нельзя сделать так, чтобы $k, \kappa, k_1, k_2, \dots$ были в точности константами движения, но быть может их можно выбрать так, чтобы они были константами движения приблизительно, а затем применить метод возмущений (см. следующую главу)

Выведем теперь правила отбора для величины K результирующего момента количества движения M любой атомной системы. Пусть m будет орбитальным моментом количества движения одного из электронов с координатами x, y, z , и пусть μ будет разность $M - m$. Для настоящего рассуждения не обязательно требовать, чтобы величины k и κ двух моментов количества движения m и μ , на которые разбился M , были константами движения. Найдем условие того, что матричный элемент (k', k'') наблюдаемой x , или y , или z не обращается в нуль. Это условие очевидно совпадает с тем условием, что не должен обращаться в нуль матричный элемент (K', K'') наблюдаемой λ_1 , или λ_2 , или λ_3 , где λ_1, λ_2 , и λ_3 суть три линейно независимые линейные комбинации x, y, z с коэффициентами, которые являются числами или же любыми наблюдаемыми, коммутирующими с K и потому представленными посредством матриц, диагональных по отношению к K . Положим

$$\begin{aligned}\lambda_0 &= M_x x + M_y y + M_z z, \\ \lambda_x &= M_y z - M_z y - i \hbar x, \\ \lambda_y &= M_z x - M_x z - i \hbar y, \\ \lambda_z &= M_x y - M_y x - i \hbar z.\end{aligned}$$

Мы имеем

$$\begin{aligned}M_x \lambda_x + M_y \lambda_y + M_z \lambda_z &= \sum_{xyz} (M_x M_y z - M_x M_z y - i \hbar M_x x) = \\ &= \sum_{xyz} (M_x M_y - M_y M_x - i \hbar M_z) z = 0,\end{aligned}\quad (37)$$

что вытекает из общего условия (11), которому должен подчиняться момент количества движения. Поэтому λ_x , λ_y , и λ_z не являются линейно независимыми линейными комбинациями x , y , z . Но любые две из них, вместе с λ_0 дадут три линейно независимые функции от x , y и z ; тоже можно обозначить λ_1 , λ_2 , λ_3 , так как все коэффициенты M_x , M_y , M_z коммутируют с K . Наша задача сводится к отысканию того условия, что матричный элемент (K' , K'') наблюдаемых λ_0 , λ_x , λ_y , и λ_z , не обращается в нуль. Физический смысл наблюдаемых λ заключается в том, что λ_0 пропорциональна проекции вектора (x, y, z) на направление вектора M , а λ_x , λ_y , λ_z пропорциональны прямоугольным составляющим проекции вектора (x, y, z) на плоскость, перпендикулярную к M .

Из формулы (4) и из того условия, что x , y и z коммутируют с m , вытекает

$$\left. \begin{aligned}[M_z, x] &= [m_z + \nu_z, x] = y \\ [M_z, y] &= -x \quad [M_z, z] = 0.\end{aligned} \right\} \quad (38)$$

Поэтому

$$\begin{aligned}[M_z, \lambda_0] &= [M_z, M_x] x + M_x [M_z, x] + [M_z, M_y] y + M_y [M_z, y] = \\ &= M_y x + M_x y - M_x y - M_y x = 0.\end{aligned}$$

Итак, λ_0 коммутирует с M_z ; из симметрии вытекает, что λ_0 коммутирует также и с M_x и с M_y , а значит и с K . Отсюда следует, что только диагональные элементы ($K' | \lambda_0 | K'$) матрицы, представляющей λ_0 , могут быть отличными от нуля; поэтому правило отбора гласит что, поскольку рассматривается эта составляющая электрического момента, K должно оставаться неизменным. Применяя (38) далее, мы находим:

$$\begin{aligned}[M_z, \lambda_x] &= [M_z, M_y] z - M_z [M_z, y] - i \hbar [M_z, x] = \\ &= -M_x z + M_z x - i \hbar y = \lambda_y \\ [M_z, \lambda_y] &= M_z [M_z, x] - [M_z, M_x] z - i \hbar [M_z, y] = \\ &= M_z y - M_y z + i \hbar x = -\lambda_x \\ [M_z, \lambda_z] &= [M_z, M_x] y + M_x [M_z, y] - [M_z, M_y] x - M_y [M_z, x] = \\ &= M_y y - M_x x + M_x x - M_y y = 0.\end{aligned}$$

Эти соотношения между M_z и λ_x , λ_y , λ_z имеют совершенно такой же вид, как соотношения (4), (5) между m_z и x , y , z ; таким же образом (37) имеет тот же вид, что (3). Поэтому наблюдаемые λ_x , λ_y , λ_z имеют те же самые свойства по отношению к моменту количества движения M , какие имеют x , y , z по отношению к m . Выведенное в § 47 правило отбора для k в том случае, когда электрический момент пропорционален (x, y, z) , может быть поэтому непосредственно применено к отбору K , когда электрический момент пропорционален $(\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z)$. Таким образом мы видим, что, поскольку мы имеем дело с λ_x , λ_y , λ_z , правило отбора для K гласит, что K должно меняться на $\pm \hbar$.

Сопоставляя все результаты, находим правило отбора для K , гласящее, что K должно меняться на 0 или на $\pm \hbar$. Мы приняли во внимание электрический момент, соответствующий одному из электронов, но то же самое правило отбора получится, если мы возьмем любой другой электрон; поэтому оно же останется в силе при рассмотрении результирующего электрического момента.

IX. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ.

§ 50. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ.

В двух предыдущих главах были рассмотрены точные решения некоторых простейших задач квантовой механики. Большинство квантовых задач однако не может быть точно решено средствами современной математики, так как эти задачи приводят к уравнениям, решения которых не могут быть выражены в конечном виде с помощью обыкновенных функций анализа. Для решения таких задач приходится применять метод возмущений. Он заключается в том, что функцию Гамильтона разбивают на две части, из которых одна должна иметь простой вид, а другая должна быть малой. Первая часть может считаться гамильтоновой функцией некоторой более простой или, как говорят, невозмущенной механической системы, допускающей точное решение задачи; прибавление второй части потребует внесения в такое решение невозмущенной задачи некоторых небольших поправок, имеющих характер возмущения. Если эта вторая часть функции Гамильтона содержит числовой множитель ϵ , то решение уравнений возмущенной механической системы может быть получено в виде ряда расположенного по возрастающим степеням ϵ , который (если только он сходится) дает решение нашей задачи с любой желательной степенью точности. Даже тогда, когда этот ряд расходится, полученное с его помощью первое приближение обыкновенно оказывается довольно точным.

В теории возмущений существуют два различных метода. В одном из них возмущение рассматривается как причина изменения состояния невозмущенной системы. В другом методе мы имеем дело с неизменившимися состояниями невозмущенной системы, но предполагаем, что невозмущенная система вместо того, чтобы оставаться все время в одном из этих состояний, беспрестанно переходит от одного из них к другому, т. е. совершает переходы под влиянием возмущения. Какой из этих методов следует применять в каждом данном случае, зависит от характера рассматриваемой задачи. Первый метод обыкновенно оказывается полезным только в тех случаях, когда ни гамильтонова функция невозмущенной системы, ни возмущающая энергия (т. е. поправка к функции Гамильтона) не содержат времени явно; поэтому этот метод применяют к разысканию стационарных состояний системы и к вычислению таких вещей, которые не имеют отношения к определенному моменту времени (например уровней энергии стационарных состояний возмущенной системы или, в случае задач о столкновениях, вероятности рассеяния на данный угол). Второй метод, наоборот, следует применять к решению всех задач, в которых время играет роль, например к тем разыгрывающимся во времени явлениям, которые происходят при внезапном появлении возмущения, или, вообще говоря, ко всем задачам, в которых возмущение как угодно меняется со временем, т. е. возмущающая энергия любым образом содержит время явно. Кроме того этот второй метод следует применять к задачам о столкновениях (хотя возмущающая энергия в этих задачах и не содержит времени явно) для вычисления вероятности поглощения и испускания, так как эти вероятности, в отличие от вероятности рассеяния, не могут быть определены без отношения к вещам, меняющимся с течением времени.

§51. ИЗМЕНЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ, ВЫЗВАННОЕ ВОЗМУЩЕНИЕМ.

Применим первый из двух упомянутых методов к вычислению изменения энергетических уровней механической системы, вызываемого возмущением. Возмущающая энергия, так же как и функция Гамильтона невозмущенной системы, не должна зависеть от времени явно. Поставленная нами задача, разумеется, имеет смысл только в том случае, когда уровни энергии невозмущенной системы дискретны и когда разности между ними велики по сравнению с их изменением, вызванным возмущением. Поэтому применение первого метода к задаче о возмущениях оказывается в некоторых отношениях различным, смотря по тому, являются ли уровни энергии невозмущенной системы дискретными или непрерывными.

Пусть гамильтонова функция возмущенной системы будет

$$H = H_0 + V, \quad (1)$$

где H_0 - гамильтонова функция невозмущенной системы, а V - небольшой возмущающий член. Согласно сделанному предположению каждое собственное значение H' наблюдаемой H

очень мало отличается от некоторого одного собственного значения H''_0 наблюдаемой H_0 . Для удобства будем обозначать каждое собственное значение наблюдаемой H тем же самым количеством штрихов, каким обозначается близкое к нему собственное значение наблюдаемой H_0 . Поэтому в наших обозначениях H' должно отличаться от H''_0 малую величину порядка V и должно отличаться от H'_0 на величину, которая не мала (если только H'_0 не равно H''_0). Мы обязаны следить за тем, чтобы собственные значения наблюдаемых H и H_0 , которые не должны лежать близко друг к другу, были отмечены разным количеством штрихов.

Пусть $\psi(H')$ будет собственным ψ -символом наблюдаемой H , принадлежащим собственному значению H' , так что

$$H\psi(H') = H'\psi(H'). \quad (2)$$

Это значит, что $\psi(H')$ обозначает стационарное состояние возмущенной системы с энергией H' . Далее, пусть $\psi(H''_0)$ будет собственным ψ -символом наблюдаемой H_0 (в некоторый заданный момент времени t), принадлежащим собственному значению H''_0 . Это значит, что

$$H_0\psi(H''_0) = H''_0\psi(H''_0). \quad (3)$$

Для возмущенной системы ψ -символ $\psi(H''_0)$ будет нестационарным состоянием, к тому же различным для различных значений упомянутого t , но для невозмущенной системы он будет стационарным состоянием с энергией H''_0 .

Предположим теперь, что в невозмущенной системе каждому уровню энергии H''_0 принадлежит только одно состояние, т. е. что невозмущенная система не вырождена. Для этого нужно, чтобы наблюдаемая H_0 имела только один независимый собственный ψ -символ, принадлежащий каждому данному собственному значению H''_0 (это условие связано только с видом наблюдаемой H_0 , но не зависит от того, рассматриваем ли мы возмущенную или невозмущенную систему). Из наших допущений о том, что вызванные возмущением изменения уровней энергии малы по сравнению с разностями уровней энергии невозмущенной системы, следует, что существует только один собственный ψ -символ наблюдаемой H , принадлежащий каждому данному собственному значению H' этой наблюдаемой, иными словами - что возмущенная система тоже не вырождена. Тот факт, что возмущающая энергия V мала или что H_0 (в момент времени t) и H суть почти одинаковые наблюдаемые, приводит к тому, что не только их собственные значения приблизительно одинаковы, но и соответствующие собственные ψ -символы почти одинаковы, если отвлечься от возможных численных множителей. Итак, мы будем иметь

$$\psi(H) = c\psi(H'_0) + \psi_1, \quad (4)$$

где c - число и где ψ_1 есть малый ψ -символ. Можно считать, что ψ_1 ортогонален к $\psi(H'_0)$, так как если бы он не был ортогонален, то его можно было бы представить в виде суммы двух частей, из коих одна ортогональна к $\psi(H'_0)$, а другая отличается от $\psi(H'_0)$ лишь численным множителем и поэтому может быть включена в первый член правой части равенства (4).¹ Мы можем положить $c=1$, после чего получаем:

$$\psi(H) = \psi(H'_0) + \psi_1, \quad (5)$$

Где ψ_1 мал и ортогонален к $\psi(H'_0)$.

Из (1), (2) и (5) следует:

$$[H_0 + V] [\psi(H'_0) + \psi_1] = H\psi(H) = H'\psi(H) = H' [\psi(H'_0) + \psi_1].$$

С помощью (3) получаем отсюда:

$$H'_0\psi(H'_0) + H_0\psi_1 + V\psi(H'_0) + V\psi_1 = H'\psi(H'_0) + H'\psi_1.$$

Если пренебречь членом второго порядка малости $V\psi_1$ то это дает:

¹ Если ϕ_1 есть ϕ -символ, сопряженный с ψ_1 , а $\phi(H'_0)$ - сопряженный с $\psi(H'_0)$, то для этого достаточно положить первую часть равной $\psi(H'_0) + \frac{\psi_1\phi(H'_0)}{\psi(H'_0)\phi(H'_0)}\psi(H'_0)$, а вторую равной

$\psi_1 - \frac{\psi_1\phi(H'_0)}{\psi(H'_0)\phi(H'_0)}\psi(H'_0)$. Примечание переводчика.

$$(H' - H_0) \psi(H_0) + (H' - H_0) \psi_1 = V \psi(H_0). \quad (6)$$

Если обе части этого уравнения помножить слева на $\varphi(H'_0)$, т.е. на φ -символ мнимосопряженный с ψ -символом $\psi(H'_0)$, то второй член левой части уравнения даст нуль, так как $\varphi(H'_0)\{H' - H_0\}\psi_1 = \varphi(H'_0)\{H' - H'_0\}\psi_1 = \{H' - H'_0\}\varphi(H'_0)\psi_1 = 0$, в виду ортогональности $\varphi(H'_0)$ и ψ_1 друг ко другу. Поэтому остается

$$H' - H_0 = \varphi(H'_0) V \psi(H_0), \quad (7)$$

если допустить, что $\varphi(H'_0)$ и $\psi(H'_0)$ нормированы.

Это равенство дает нам для любого состояния системы с точностью до величин первого порядка малости значение вызванного возмущением изменения уровня энергии системы. Мы видим, что вычисленное с точностью до малых величин первого порядка изменение уровня энергии равно среднему значению возмущающей энергии в невозмущенном стационарном состоянии. В такой формулировке этот результат теории возмущений в квантовой механике не отличается от соответствующего результата классической механики или старой квантовой механики Бора. Иначе можно сказать, что с точностью до малых величин первого порядка изменение уровня энергии равно соответствующему диагональному элементу матрицы, представляющей возмущающую энергию в таком представлении в котором функция Гамильтона невозмущенной системы диагональна (т. е. в гейзенберговском представлении невозмущенной системы).

Теперь нам нужно рассмотреть тот случай, когда невозмущенная система вырождена, т. е. когда есть несколько собственных ψ -символов наблюдаемой H_0 , принадлежащих одному и тому же собственному значению H'_0 . Возмущение при этом может быть таким, что возмущенная система оказывается невырожденной или же вырожденной не в такой степени, как невозмущенная система. Это значит, что каждый уровень энергии H'_0 невозмущенной системы расщепляется возмущением на несколько уровней энергии H' , мало отличающихся от H'_0 .¹ При этом каждый собственный ψ -символ наблюдаемой H приближенно равен некоторому собственному ψ -символу наблюдаемой H_0 ; но обратное утверждение, а именно что каждый собственный ψ -символ наблюдаемой H_0 , приближенно равен некоторому собственному ψ -символу наблюдаемой H , уже не будет верным, как видно из следующего рассуждения: если ψ_a и ψ_b являются двумя собственными ψ -символами наблюдаемой H_0 , принадлежащими одному и тому же собственному значению, и приближенно совпадают с двумя собственными ψ -символами наблюдаемой H , принадлежащими двум различным собственным значениям, то любая линейная комбинация $a\psi_a + b\psi_b$ этих ψ -символов будет также собственным ψ -символом наблюдаемой H_0 но не обязательно будет приближенным ψ -символом наблюдаемой H . Задача нахождения собственных ψ -символов наблюдаемой H_0 , которые приближенно равны собственным ψ -символам наблюдаемой H , аналогична задаче о вековых возмущениях в классической механике.

Любой собственный ψ -символ наблюдаемой H_0 , принадлежащий собственному значению H'_0 может быть выражен в виде линейной комбинации полной системы таких собственных ψ -символов. Мы выберем эту полную систему так, чтобы она состояла из совместных собственных ψ -символов $\psi(H'_0 \xi')$ наблюдаемой H_0 и нескольких наблюдаемых ξ , которые коммутируют с H_0 и друг с другом и образуют вместе с H_0 полную систему коммутирующих наблюдаемых. Любой собственный ψ -символ $\psi(H'_0)$ может быть выражен в виде $\psi(H'_0) = \sum_{\xi'} \psi(H'_0 \xi') (\xi')$, где коэффициенты (ξ') суть числа, образующие представитель ψ -символа $\psi(H'_0)$. Любой собственный ψ -символ $\psi(H')$ наблюдаемой H , принадлежащий собственному значению H' , которое мало отличается от H'_0 , должен быть приближенно равен некоторому $\psi(H'_0)$, т. е. имеет вид

¹ Для того, чтобы отличать эти уровни энергии друг от друга, понадобилась бы более разработанная система обозначений, так как при употребляющихся в тексте обозначениях они все отмечаются одним и тем же количеством штрихов, а именно тем же количеством штрихов, как и уровень энергии невозмущенной системы, из которого они все возникли. Но для наших теперешних целей эта более разработанная система обозначений оказывается ненужной.

$$\psi(H') = \sum_{\xi'} \psi(H'_0 \xi') (\xi') + \psi_1, \quad (8)$$

где ψ_1 , мало. Как же, как и в случае отсутствия вырождения, мы можем допустить, что ψ -символ ортогонален к каждому $\psi(H'_0 \xi')$: если бы он не удовлетворял атому требованию, то мы могли бы его разложить на сумму двух ψ -символов, из коих первый ортогонален ко всем $\psi(H'_0 \xi')$, а второй является их линейной комбинацией. С помощью (1), (2), (3) мы получаем теперь:

$$(H_0 + V) \left\{ \sum_{\xi'} \psi(H'_0 \xi') (\xi') + \psi_1 \right\} = H' \psi(H') = H' \left\{ \sum_{\xi'} \psi(H'_0 \xi') (\xi') + \psi_1 \right\}$$

или

$$(H' - H'_0) \sum_{\xi'} \psi(H'_0 \xi') (\xi') + (H' - H_0) \psi_1 = V \sum_{\xi'} \psi(H'_0 \xi') (\xi'),$$

где мы пренебрегли членом второго порядка $V\psi_1$. Если обе части этого последнего уравнения помножить слева на $\varphi(H'_0 \xi')$, то произведение $\varphi(H'_0 \xi') \{H' - H_0\} \psi_1$, будет, как и прежде, равно нулю, и у нас останется

$$(H' - H'_0) (\xi') = \sum_{\xi''} \varphi(H'_0 \xi'') V \psi(H'_0 \xi') (\xi'),$$

если только все $\psi(H'_0 \xi')$ нормированы. Этот результат может быть записан также и в виде

$$(H' - H'_0) (\xi') = \sum_{\xi''} (H'_0 \xi' | V | H'_0 \xi'') (\xi'),$$

где $(H'_0 \xi' | V | H'_0 \xi'')$ есть элемент матрицы, представляющей V в представлении $(H_0 \xi)$.

Ур-ие (9) имеет вид типичного уравнения теории собственных значений. Оно показывает, что $(H' - H'_0)$ есть собственное значение той матрицы $(H'_0 \xi' | V | H'_0 \xi'')$, которая получится из представителя возмущающей энергии V в гейзенберговском представлении для невозмущенной системы, если зачеркнуть в этом представителе все строки и столбцы, за исключением относящихся к невозмущенному уровню энергии H'_0 . Каждое вызванное возмущением изменение уровня энергии H'_0 является собственным значением этой матрицы, а ее собственные функции, т. е. величины (ξ') , будут как раз служить коэффициентами в формуле (8), дающими те линейные комбинации собственных ψ -символов наблюдаемой H_0 , принадлежащих собственному значению H'_0 , которые приближенно являются собственными ψ -символами наблюдаемой H и поэтому приближенно представляют стационарные состояния возмущенной системы. Таким образом мы получили в первом порядке приближения уровни энергии и стационарные состояния возмущенной системы. Следует заметить, что все эти величины первого порядка не зависят от значений тех матричных элементов возмущающей энергии, которые относятся к двум различным уровням энергии невозмущенной системы H'_0 и H_0'' .

Методом возмущений можно пользоваться, если это окажется нужным, и для вычислений в более высокой степени приближения. Общие рекуррентные соотношения, позволяющие выразить поправку n -ого порядка малости через члены менее высоких порядков, были получены Борном, Гейзенбергом и Иорданом.¹

§ 52. ВОЗМУЩЕНИЕ КАК ПРИЧИНА ПЕРЕХОДОВ.

Теперь мы перейдем к рассмотрению второго из упомянутых в § 50 методов теории возмущений. Предположим снова, что мы имеем невозмущенную систему с функцией Гамильтона H_0 , не содержащей времени явно, и возмущающую энергию V , которая может быть любой функцией времени. Гамильтонова функция возмущенной системы будет попрежнему $H = H_0 + V$. Для рассматриваемого теперь метода совершенно безразлично, дискретны ли уровни энергии невозмущенной системы (собственные значения наблюдаемой H_0) или непрерывны. Однако для определенности мы ограничимся случаем дискретных собственных значений.

Введем α -представление, в котором диагональны наблюдаемые α образующие полную систему коммутирующих наблюдаемых и являющиеся значениями в момент времени t некоторых динамических переменных, оказывающихся в случае невозмущенной системы

¹ M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, ZS. f. Phys. 35, 565, 1925.

константами движения. Это значит, что H_0 в момент времени t коммутирует с каждой из наблюдаемых α и следовательно обладает представителем в виде диагональной матрицы

$$\langle \alpha' | H_0 | \alpha'' \rangle = H_0' \delta_{\alpha' \alpha''}. \quad (10)$$

Если фазы представления таковы, что имеет место уравнение Шредингера, то, обозначая соответствующих представителей звездочкой, мы получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha' | \rangle^* &= \sum_{\alpha''} \langle \alpha' | H_0 + V | \alpha'' \rangle^* \langle \alpha'' \rangle^* = \\ &= H_0' \langle \alpha' | \rangle^* + \sum_{\alpha''} \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle^* \langle \alpha'' \rangle^*. \end{aligned} \quad (11)$$

Для наших целей однако более выгодно избрать фазы представления так, чтобы они совпали с фазами гейзенберговского представления для невозмущенной системы; при этом представитель состояний $\langle \alpha' | \rangle$ будет связан с шредингеровским представителем того же самого состояния $\langle \alpha' | \rangle^*$ соотношением

$$\langle \alpha' | \rangle^* = e^{-i \frac{H_0' t}{\hbar}} \langle \alpha' | \rangle, \quad (12)$$

которое было выведено в конце § 38. Гейзенберговский и шредингеровский представители наблюдаемой будут связаны аналогичным соотношением

$$\langle \alpha' | \dot{\alpha}'' \rangle^* = e^{-i \frac{(H_0' - H_0'') t}{\hbar}} \langle \alpha' | \dot{\alpha}'' \rangle.$$

Представитель (10) наблюдаемой H_0 разумеется оказывается в том и в другом случае одинаковым, так как он диагонален.

Новый представитель состояния, т.е. $\langle \alpha' | \rangle$, разумеется не удовлетворяет уравнению Шредингера, но взамен этого он удовлетворяет уравнению, которое получается путем подстановки (12) и (11), т.е.

$$\begin{aligned} i\hbar \left[-i \frac{H_0'}{\hbar} e^{-i \frac{H_0' t}{\hbar}} \langle \alpha' | \rangle + e^{-i \frac{H_0' t}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha' | \rangle \right] = \\ = H_0' e^{-i \frac{H_0' t}{\hbar}} \langle \alpha' | \rangle + \sum_{\alpha''} \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle^* e^{-i \frac{H_0'' t}{\hbar}} \langle \alpha'' \rangle, \end{aligned}$$

что дает:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha' | \rangle &= \sum_{\alpha''} e^{i \frac{(H_0' - H_0'') t}{\hbar}} \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle^* \langle \alpha'' \rangle = \\ &= \sum_{\alpha''} \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle \langle \alpha'' \rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

Шредингеровский представитель $\langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle^*$ возмещающей энергии V зависит от t лишь постольку, поскольку V содержит t явно, между тем как представитель $\langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle$, фигурирующий в уравнении (13), быстро изменяется с изменением t , причем его изменение

происходит по гейзенберговскому закону $e^{i \frac{(H_0' - H_0'') t}{\hbar}}$, если мы пренебрежем явной зависимостью V от t .

Ур-ие (13) является основным уравнением рассматриваемого метода теории возмущений. Оно является точным уравнением: до сих пор мы нигде не воспользовались тем обстоятельством, что возмущение мало. Оно показывает, каким образом изменяется со временем представитель состояния возмущенной системы, если представление таково, что это изменение обусловлено исключительно возмущением; поэтому ур-ие (13) наиболее отчетливым образом выражает ту точку зрения, с которой можно рассматривать возмущение как причину беспрестанного изменения состояния системы. В любой момент вероятность того, что наблюдаемые α имеют заданные значения α' , равна

$$P' = |\langle \alpha' | \rangle|^2, \quad (14)$$

если только P' нормировано.

Теперь мы получим приближенное решение уравнения (13) для некоторого заданного начального значения представителя состояния $\langle \alpha' | \rangle$. Так как возмущение V мало, то быстрота изменения $\langle \alpha' | \rangle$ мала и $\langle \alpha' | \rangle$ приблизительно остается равным своему первоначальному

значению, по крайней мере если речь идет о моментах времени, не слишком сильно отличающихся от начального момента времени. Поэтому мы можем получить первое приближение, подставляя вместо $\langle \alpha'' \rangle$ в правой части ур-ия (13) соответствующее начальное значение и затем производя интегрирование. Вслед за этим можно получить и второе приближение, подставляя первое приближение в правую часть (13), и так сколько угодно раз.

Пусть начальное значение $\langle \alpha' \rangle$ (т. е. значение в момент времени $t=0$) будет $a_0(\alpha')$ или» как мы будем писать для краткости, a'_0 . В первом приближении $\langle \alpha' \rangle$ в любой момент времени τ будет:

$$\langle \alpha' \rangle_\tau = a'_0 - \frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha''} \int_0^\tau \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_t a_0'' dt = a'_0 + a'_{1\tau},$$

где через a'_1 обозначена поправка первого порядка, значение которой в момент времени τ равно

$$a'_{1\tau} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha''} a_0'' \int_0^\tau \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_t dt. \quad (15)$$

Второе приближение в любой момент времени T будет:

$$\langle \alpha' \rangle_T = a'_0 - \frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha''} \int_0^T \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_\tau [a_0'' + a'_{1\tau}] d\tau = a'_0 + a'_{1T} + a'_{2T},$$

где a'_2 , т. е. поправка второго порядка, имеет в момент времени T значение

$$\begin{aligned} a'_{2T} &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha''} \int_0^T \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_\tau a'_{1\tau} d\tau = \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha'' \alpha'''} a_0'' \int_0^T \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_\tau d\tau \int_0^\tau \langle \alpha'' | V | \alpha''' \rangle_t dt. \end{aligned} \quad (16)$$

Вероятность (14) того, что наблюдаемые α имеют в некоторый данный момент времени значения α' , с точностью до величин второго порядка равна

$$\begin{aligned} P' &= (a'_0 + a'_{1T} + a'_{2T}) (\bar{a}'_0 + \bar{a}'_{1T} + \bar{a}'_{2T}) = \\ &= a'_0 \bar{a}'_0 + (a'_{1T} \bar{a}'_0 + a'_0 \bar{a}'_{1T}) + (a'_{2T} \bar{a}'_0 + a'_{1T} \bar{a}'_{1T} + a'_0 \bar{a}'_{2T}) + \dots = \\ &= P'_0 + P'_1 + P'_2 + \dots, \end{aligned} \quad (17)$$

где P'_0 - начальное значение этой вероятности, а P'_1 и P'_2 - поправки первого и второго порядка малости.

Предположим теперь, что нам дано не a'_0 , т. е. начальное значение величины $\langle \alpha' \rangle$, но лишь P'_0 , т. е. начальное значение вероятности того, что наблюдаемые α имеют заданные значения α' , и пусть нам нужно вычислить вероятность того, что наблюдаемые α имеют заданные значения в некоторый последующий момент времени. Мы знаем только модуль величины $\langle \alpha' \rangle$, но не ее фазу, поэтому нам нужно взять среднее по всем возможным фазам. В результате такого усреднения выражение (17) вероятности P' значительно упрощается, так как это выражение билинейно по отношению к a_0 и \bar{a}_0 [ведь на основании формул (15) и (16) a_1 и a_2 являются линейными функциями от a_0] и следовательно оно состоит из суммы членов вида $a_0'' \bar{a}_0'''$. Среднее значение величины $a_0'' \bar{a}_0'''$ или $a_0(\alpha'') \bar{a}_0(\alpha''')$ равно нулю, если только α''' не равно α'' ; поэтому остаются только члены вида $a_0'' \bar{a}_0''$. Таким образом P'_0 приводится к следующему виду:

$$\begin{aligned} P'_{1\tau} &= a'_{1\tau} \bar{a}'_0 + a'_0 \bar{a}'_{1\tau} = \\ &= \left[-\frac{i}{\hbar} a'_0 \int_0^\tau \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_t dt \right] \bar{a}'_0 + a'_0 \left[\frac{i}{\hbar} \bar{a}'_0 \int_0^\tau \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_t dt \right] = 0. \end{aligned}$$

Таким же образом и P'_1 приводится к следующему виду:

$$\begin{aligned}
P'_{2T} &= a_{2T} \bar{a}'_0 + a'_{1T} \bar{a}'_{1T} + a'_0 \bar{a}'_{2T} = \\
&= -\frac{1}{\hbar^2} a'_0 \bar{a}'_0 \sum_{\alpha''} \int_0^T (\alpha' | V | \alpha'')_\tau d\tau \int_0^T (\alpha' | V | \alpha')_t dt + \\
&\quad + \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha''} a''_0 \bar{a}''_0 \left| \int_0^T (\alpha' | V | \alpha'')_t dt \right|^2 - \\
&\quad - \frac{1}{\hbar^2} a'_0 \bar{a}'_0 \sum_{\alpha''} \int_0^T (\alpha'' | V | \alpha')_\tau d\tau \int_0^T (\alpha' | V | \alpha'')_t dt
\end{aligned}$$

[при вычислении третьего члена мы воспользовались тем обстоятельством, что матрица $(\alpha' | V | \alpha'')$ эрмитова]. Меняя в третьем члене t и τ местами, мы можем объединить его с первым членом, что дает:

$$\begin{aligned}
&-\frac{|a'_0|^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha''} \left[\int_0^T d\tau \int_0^T dt + \int_0^T dt \int_0^T d\tau \right] (\alpha' | V | \alpha'')_\tau (\alpha'' | V | \alpha')_t = \\
&= -\frac{|a'_0|^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha''} \int_0^T d\tau \int_0^T dt (\alpha' | V | \alpha'')_\tau (\alpha'' | V | \alpha')_t = \\
&= -\frac{|a'_0|^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha''} \left| \int_0^T (\alpha' | V | \alpha'')_t dt \right|^2.
\end{aligned}$$

Поэтому P'_2 принимает вид:

$$\begin{aligned}
P'_{2T} &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha''} \left\{ |a_0''|^2 - |a_0'|^2 \right\} \left| \int_0^T (\alpha' | V | \alpha'')_t dt \right|^2 = \\
&= \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha''} (P_0'' - P_0') \left| \int_0^T (\alpha' | V | \alpha'')_t dt \right|^2,
\end{aligned}$$

и следовательно в момент времени T вероятность того, что наблюдаемые α обладают значениями α' , с точностью до второго порядка равна

$$P'_T = P_0' + \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\alpha''} (P_0'' - P_0') \left| \int_0^T (\alpha' | V | \alpha'')_t dt \right|^2. \quad (18)$$

Этому результату можно дать простое истолкование. Если предположить, что в начальный момент вероятность значений α'' наблюдаемых α была равна единице ($P_0'' = 1$, $P_0' = 1$ при $\alpha' \neq \alpha''$), в каковом частном случае усреднять по фазам чисел a_0 не приходится, то правая часть равенства (18) приводится к единственному члену, который мы обозначим $P(\alpha'', \alpha')$:

$$P(\alpha'', \alpha') = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^T (\alpha' | V | \alpha'')_t dt \right|^2. \quad (19)$$

Это выражение можно истолковать как вероятность перехода системы из состояния α'' в состояние α' под влиянием возмущения V , действовавшего в течение интервала времени от 0 до T . Эта вероятность, симметрична по отношению к α' и α'' . Вновь возвращаясь к общему случаю, мы найдем, что равенству (18) можно дать следующее толкование: $P'_T - P_0'$, т. е. происшедшее в течение интервала времени от 0 до T изменение вероятности того, что наблюдаемые α имеют значения α' , состоит из полной вероятности перехода системы в состояние α' из любого другого состояния α'' , эта вероятность равна

$$\sum_{\alpha''} P_0'' P(\alpha'', \alpha')$$

минус полная вероятность ее ухода из состояния α' в течение того же промежутка времени (эта вероятность равна $P_0' \sum_{\alpha''} P(\alpha', \alpha'')$). Итак обыкновенные правила теории вероятностей оказываются применимыми, что показывает, что между различными процессами перехода не происходит никакой интерференции. Если бы мы не произвели усреднения по начальным фазам, такая интерференция имела бы место.

Подынтегральная функция в выражении (19) является представителем возмущающей энергии в момент времени t в некотором представлении. Это представление не очень сильно

зависит от t , так как если мы положим $V = 0$ то оно станет представлением Гейзенберга и не будет зависеть от t совершенно. Поэтому без ущерба для точности нашего результата мы можем заменить в (19) интеграл матричным элементом

$$\langle \alpha' | \int_0^T V_t dt | \alpha'' \rangle,$$

что дает нам другое выражение вероятности перехода

$$P(\alpha'', \alpha') = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \alpha' | \int_0^T V_t dt | \alpha'' \rangle \right|^2. \quad (20)$$

Это выражение позволяет придать простой физический смысл недиагональным элементам матрицы, представляющей наблюдаемую, если только эту наблюдаемую можно рассматривать как взятый по времени интеграл возмущающей энергии.

§ 53. ПРИМЕНЕНИЕ К ИЗЛУЧЕНИЮ.

В предыдущем параграфе была дана общая теория возмущения атомной системы, причем возмущающая энергия могла как угодно зависеть от времени. На практике можно осуществить такого рода возмущение, подвергая рассматриваемую систему действию падающих на нее электромагнитных волн. Посмотрим, какой вид принимают в этом случае выражения (19) и (20).

Если пренебречь действием магнитного поля падающих лучей и допустить, что длины волн всех составляющих колебаний в спектральном разложении этого излучения велики по сравнению с размерами атомной системы, то возмущающая энергия станет просто скалярным произведением

$$V = (\mathbf{D}, \xi), \quad (21)$$

где \mathbf{D} - полный электрический момент системы, а ξ - электрический вектор падающего излучения. Мы предположим, что ξ является заданной функцией времени. Если для простоты взять тот случай, когда падающее на атом излучение плоско поляризовано и его электрический вектор имеет вполне определенное направление, и если обозначить прямоугольную проекцию вектора \mathbf{D} на это направление через D , то выражение (21) возмущающей энергии V станет обыкновенным произведением

$$V = D \xi,$$

где ξ - величина вектора ξ . Матричные элементы V равны

$$\langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle = \langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle \xi,$$

так как ξ есть число. Но $\langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle$ зависит от времени по Гейзенберговскому закону:

$$\langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle = \langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle_0 e^{\frac{i(H_0' - H_0'')t}{\hbar}},$$

где $\langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle_0$ есть постоянная величина; поэтому выражение (19) для вероятности перехода принимает вид:

$$P(\alpha', \alpha'') = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle|^2 \left| \int_0^T \xi_t e^{\frac{i(H_0' - H_0'')t}{\hbar}} dt \right|^2. \quad (22)$$

Если излучение, падающее в течение промежутка от 0 до T , разложено на гармонические составляющие, то энергия, пересекающая единицу площади и соответствующая единичному интервалу частот вблизи частоты ν , на основании классической электродинамики равна

$$E_\nu = \frac{c}{2\pi} \left| \int_0^T \xi_t e^{2\pi i \nu t} dt \right|^2. \quad (23)$$

Сравнивая с (22), мы видим, что в согласии с теорией Бора вероятность перехода между состояниями α' с энергией H_0' и α'' с энергией H_0'' зависит от той гармонической составляющей падающего излучения, частота которой равна $\nu = \frac{H_0' - H_0''}{\hbar}$. Вероятность перехода связана с интенсивностью соответствующей гармонической составляющей соотношением

$$P(\alpha', \alpha'') = \frac{2\pi}{c\hbar^2} |\langle \alpha' | D | \alpha'' \rangle|^2 E_{\nu}. \quad (24)$$

Это соотношение дает для системы вероятность поглотить энергию и перейти в более высокое квантовое состояние, если первоначально она находилась в состоянии с меньшей энергией, или же, если она уже первоначально находилась в более высоком квантовом состоянии, вероятность испустить энергию под действием падающего на нее излучения и перейти в состояние с меньшей энергией. Изложенная теория не дает объяснения того факта, что система, находясь в одном из более высоких квантовых состояний и не подвергаясь при этом действию падающего на нее излучения, может самопроизвольно испустить энергию и перейти в менее высокое состояние.

Необходимость существования явления испускания лучистой энергии под влиянием излучения (индуцированного испускания) была выведена Эйнштейном¹ еще задолго до открытия квантовой механики, из рассмотрения термодинамического равновесия между атомами и полем черного излучения, удовлетворяющего закону Планка. Эйнштейн показал, что вероятность перехода, связанного с индуцированным испусканием, равна вероятности связанного с поглощением перехода между теми же самыми двумя состояниями, и нашел соотношение между этой вероятностью перехода и вероятностью перехода, связанного со спонтанным испусканием. Приведенная в § 38 гипотеза Гейзенберга о вероятности спонтанного испускания, сопоставленная с теорией Эйнштейна, даст нам следовательно значения вероятностей поглощения и индуцированного испускания. Эти значения находятся в согласии с (24). Итак, теория, изложенная в этой главе, дает частичное подтверждение гипотезы Гейзенберга. Полное подтверждение этой гипотезы дает общая теория, которая будет изложена в главе XII и в которой электромагнитное поле будет рассматриваться как механическая система, взаимодействующая с атомом по законам квантовой механики. Эта общая теория не только подтвердит результат (24), относящийся к поглощению и к индуцированному испусканию, но кроме того даст требуемое значение вероятности спонтанного испускания.

§ 54. ПЕРЕХОДЫ, ВЫЗЫВАЕМЫЕ ВОЗМУЩЕНИЕМ, НЕ ЗАВИСЯЩИМ ОТ ВРЕМЕНИ.

Описанный в §52 метод теории возмущений можно применять и в том случае, когда возмущающая энергия V не содержит времени явно. Так как при этом полная гамильтонова функция H не содержит времени явно, то мы могли бы, если бы пожелали, применить к системе метод теории возмущений, описанный в § 51, и найти стационарные состояния. Выгодность или невыгодность этого метода зависит от того, какие именно сведения о системе мы хотим получить. Если то, что мы хотим узнать, имеет явное отношение к времени, например если мы хотим вычислить полную волновую функцию в некоторый момент времени по ее значению в другой момент времени, то наиболее удобным окажется метод § 52.

Посмотрим, во что превращается вероятность перехода (19), когда V не содержит времени t явно. Матричный элемент $\langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_0$ в этом случае изменяется со временем согласно правилу Гейзенберга; поэтому его интеграл равен

$$\int_0^T \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_t dt = \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_0 \int_0^T e^{i \frac{(H_0' - H_0'') t}{\hbar}} dt = \langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle_0 \frac{e^{i \frac{(H_0' - H_0'') T}{\hbar}} - 1}{i \frac{(H_0' - H_0'')}{\hbar}},$$

если только $H_0' \neq H_0''$. Поэтому вероятность перехода (19) принимает вид:

$$P(\alpha', \alpha'') = |\langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle|^2 \left[e^{i \frac{(H_0' - H_0'') T}{\hbar}} - 1 \right] \left[e^{-i \frac{(H_0' - H_0'') T}{\hbar}} - 1 \right] \frac{1}{(H_0' - H_0'')^2} = 2 |\langle \alpha' | V | \alpha'' \rangle|^2 \frac{1 - \cos \frac{(H_0' - H_0'') T}{\hbar}}{(H_0' - H_0'')^2}. \quad (25)$$

Если H_0'' значительно отличается от H_0' , то эта вероятность перехода мала и остается малой при всех значениях T . Так и должно быть на основании закона сохранения энергии.

¹ A. Einstein. Phys. ZS., 18, 121, 1917.

Ведь полная энергия H постоянна, а значит и собственная энергия H_0 (т. е. полная энергия без ее части V , происходящая вследствие возмущения) должна быть приблизительно постоянной, так как она приблизительно равна H . Это значит, что если наблюдаемая H_0 первоначально имела численное значение H'_0 , то вероятность того, что в последующие моменты времени она будет иметь численное значение, весьма отличающееся от H'_0 , мала.

С другой стороны, если начальное состояние α таково, что существует другое состояние α'' с таким же самым или приблизительно с таким же самым значением собственной энергии H_0 , то вероятность перехода в состояние α'' может быть весьма велика. Физический интерес представляет тот случай, когда конечные состояния таких переходов, т. е. состояния α'' , образуют непрерывный ряд с непрерывным же рядом значений собственной энергии H_0'' , одно из которых равно значению H'_0 собственной энергии в начальном состоянии. Начальное состояние при этом не обязано принадлежать к этому непрерывному ряду конечных состояний; оно может быть изолированным или принадлежать к другому непрерывному ряду состояний. Вспоминая данные в §28 правила истолкования амплитуд вероятностей в случае непрерывного ряда состояний, мы найдем, что при значении (25) величины $P(\alpha', \alpha'')$ вероятность перехода в состояние, лежащее в небольшом интервале от α'' до $\alpha'' + d\alpha''$ будет равна $P(\alpha', \alpha'')d\alpha''$, если начальное состояние α' дискретно, и будет пропорциональна этой же величине, если оно принадлежит к непрерывному ряду состояний.

Допустим, что динамические переменные β , описывающие конечное состояние перехода и образующие полную систему коммутирующих друг с другом и с H_0 , динамических переменных, состоят из самого H_0 и из некоторых других динамических переменных β . (При этом переменные β могут и не иметь смысла в начальном состоянии α' .) Для определенности предположим, что все β имеют только дискретные собственные числа. Полная вероятность перехода в конечное состояние α'' , в котором β имеют значения β'' , а H_0 - какое угодно значение, равна или пропорциональна величине

$$\int P(\alpha', \alpha'') dH_0'' = 2 \int_{-\infty}^{\infty} |\langle \alpha' | V | H_0'', \beta'' \rangle|^2 \frac{1 - \cos \frac{(H_0' - H_0'')T}{\hbar}}{(H_0' - H_0'')^2} dH_0'' =$$

$$= \frac{2T}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} |\langle \alpha' | V | H_0' + \frac{\hbar x}{T}, \beta'' \rangle|^2 \frac{1 - \cos x}{x^2} dx \quad (26)$$

(мы сделали замену переменной $x = \frac{(H_0' - H_0'')T}{\hbar}$). При больших значениях T это приводится к следующему:

$$\frac{2T}{\hbar} |\langle \alpha' | V | H_0', \beta'' \rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx =$$

$$= \frac{2\pi T}{\hbar} |\langle \alpha' | V | H_0', \beta'' \rangle|^2 \quad (27)$$

Таким образом полная вероятность того, что в течение времени T произойдет переход в состояние, в котором β имеют значения пропорциональна T . Поэтому существует определенный коэффициент вероятности рассматриваемого перехода, т. е. его вероятность в единицу времени. Этот коэффициент имеет значение

$$\frac{2\pi}{\hbar} |\langle \alpha' | V | H_0', \beta'' \rangle|^2 \quad (28)$$

он пропорционален квадрату модуля связанного с этим переходом матричного элемента возмущающей энергии.

Для того, чтобы приближенные допущения, сделанные при выводе формулы (27), были справедливы, промежуток времени T не должен быть слишком велик и не должен быть слишком мал. Он должен быть большим по сравнению с периодами самой атомной системы для того, чтобы вычисление интеграла (26), приводящее к результату (27), было правильным;

но он не должен быть чрезмерно большим, так как в противном случае общая формула (19) окажется неприменимой. В самом деле, если бы T могло быть сколь угодно большим, то вероятность (27) могла бы стать больше единицы. Верхний предел T определяется тем условием, что вероятность (19) или (27) должна быть малой по сравнению с единицей. Нетрудно сделать так, чтобы T удовлетворяло обоим этим условиям сразу, если только возмущающая энергия V достаточно мала.

§ 55. АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА.

Одним из простейших примеров применения изложенного в § 51 метода теории возмущений является вычисление вызванного однородным магнитным полем изменения уровней энергии какого угодно атома. Задача о водородном атоме в однородном магнитном поле уже была разобрана в § 48; она оказалась настолько простой, что можно было обойтись и без теории возмущений. Случай какого угодно атома окажется не на много более сложным, если мы сделаем несколько приближенных допущений, позволяющих заменить атом очень простой моделью.

Прежде всего рассмотрим атом в отсутствии магнитного поля с точки зрения, указанной в § 49, и разыщем моменты количества движения, являющиеся константами движения. Полный момент количества движения атома, который мы обозначим \mathbf{j} , конечно является константой движения. Этот момент количества движения можно считать состоящим из двух частей, а именно из полного орбитального момента количества движения всех электронов, который мы обозначим \mathbf{l} , и из полного момента количества движения спина, который мы обозначим \mathbf{s} . Итак $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$. Влияние спинового магнитного момента на движение электронов мало по сравнению с влиянием кулоновских сил; поэтому в первом приближении мы можем им пренебречь. В этом приближении момент количества движения спина каждого электрона оказывается константой движения, так как отсутствуют силы, которые могли бы изменить его ориентацию. Итак \mathbf{s} , а следовательно и \mathbf{l} , являются константами движения. Теперь мы имеем дело с тремя постоянными моментами количества движения спина \mathbf{l} , \mathbf{s} и \mathbf{j} , которые связаны между собой таким же образом, как векторы \mathbf{m} , $\boldsymbol{\mu}$ и \mathbf{M} в § 49. Абсолютные величины \mathbf{l} , \mathbf{s} и \mathbf{j} этих моментов количества движения определяются соотношениями

$$l = \left(l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$s = \left(s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$j = \left(j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

[см. уравнение (12) гл. VIII]. Из (36) в той же главе VIII мы заключаем, что при данных численных значениях \mathbf{l} и \mathbf{s} возможные численные значения \mathbf{j} суть

$$l + s - \frac{1}{2} \hbar, \quad l + s - \frac{3}{2} \hbar, \quad \dots, \quad |l - s| + \frac{1}{2} \hbar.$$

Рассмотрим стационарное состояние, в котором \mathbf{l} , \mathbf{s} и \mathbf{j} имеют определенные численные значения в согласии с приведенной схемой. Энергия этого состояния будет зависеть от \mathbf{l} , но можно подумать, что, если пренебречь магнитным моментом спина, она окажется независимой от \mathbf{s} и от направления вектора \mathbf{s} по отношению к \mathbf{l} , а следовательно - что она окажется независимой от \mathbf{j} . В главе XI мы однако увидим, что эта энергия, хотя и не зависит от направления вектора \mathbf{s} (если пренебречь магнитными моментами спинов), но в значительной степени зависит от его величины \mathbf{s} ; это объясняется некоторыми явлениями, возникающими по той причине, что электроны неотличимы друг от друга. Поэтому различным парам значений \mathbf{l} и \mathbf{s} соответствуют различные уровни энергии системы. Это значит, что \mathbf{l} и \mathbf{s} являются функциями энергии и смысле того общего определения функции, которое было дано в § 15; ведь если задать энергию стационарного состояния, то тем задаются для этого состояния \mathbf{l} и \mathbf{s} .

Теперь мы можем учесть влияние магнитных моментов спинов, трактуя его как малое возмущение по методу § 51. Энергия невозмущенной системы попрежнему будет приблизительно константой движения, а поэтому \mathbf{l} и \mathbf{s} , будучи функциями этой энергии, тоже

будут приблизительно константами движения. Однако направления векторов \mathbf{l} и \mathbf{s} , не будучи функциями невозмущенной энергии, могут не быть приближенными константами движения и могут следовательно испытывать большие вековые изменения. Так как вектор \mathbf{j} есть константа, то единственное возможное изменение \mathbf{l} и \mathbf{s} есть прецессионное движение вокруг вектора \mathbf{j} . Итак мы имеем приближенную модель атома, состоящую из двух векторов \mathbf{l} и \mathbf{s} постоянной длины, прецессирующих вокруг своей суммы \mathbf{j} , которая является неподвижным вектором. Энергия определяется главным образом величинами векторов \mathbf{l} и \mathbf{s} и лишь слегка зависит от их относительного направления, которое определяется через j . Поэтому состояния с одинаковыми \mathbf{l} и \mathbf{s} , но с различными j , обладают очень мало отличающимися друг от друга уровнями энергии; эти уровни образуют то, что называется мультиплетным термом.

Предположим теперь, что наш атом помещен в однородное магнитное поле, величина которого равна H , а направление совпадает с осью z -ов. Добавочная энергия, связанная с этим магнитным полем, будет суммой членов вида

$$\frac{e\hbar}{2mc} (m_z + \hbar \sigma_z), \quad (29)$$

соответствующих отдельным электронам [ср. последний член в уравнении (34) гл. VIII]; полная добавочная энергия поэтому будет

$$\frac{e\hbar}{2mc} \sum (m_z + \hbar \sigma_z) = \frac{e\hbar}{2mc} (l_z + 2s_z) = \frac{e\hbar}{2mc} (j_z + s_z). \quad (30)$$

Это и есть наша возмущающая энергия V . Теперь мы применим метод § 51 к определению изменения уровней энергии, вызванного этой возмущающей энергией. Такой способ будет законным лишь в том случае, когда поле настолько слабо, что V мало по сравнению с разностями энергии внутри самого мультиплета.

Наша невозмущенная система вырождена, так как направление вектора \mathbf{j} не определено. Поэтому из представителя возмущающей энергии V в гейзенберговском представлении для невозмущенной системы мы должны извлечь те матричные элементы, которые относятся (по своим строкам и столбцам) к одному и тому же определенному уровню энергии, и вычислить собственные значения образованной ими матрицы. Лучше всего это можно сделать расцепив предварительно V на две части таким образом, чтобы одна из них являлась константой невозмущенного движения и чтобы ее представитель поэтому содержал только матричные элементы относящиеся (по своим строкам и столбцам) к одному и тому же невозмущенному уровню энергии, в то время как представитель второй части содержит только матричные элементы, строки и столбцы которых относятся к различным невозмущенным уровням энергии, вследствие чего эта вторая часть не участвует в возмущении первого порядка. Член, содержащий j_z , в (30) является константой невозмущенного движения и потому целиком принадлежит первой части. Для члена, содержащего s_z , мы имеем:

$$s_z (j_x^2 + j_y^2 + j_z^2) = j_z (s_x j_x + s_y j_y + s_z j_z) + (s_z j_x - j_z s_x) j_x + (s_z j_y - j_z s_y) j_y$$

или

$$s_z = \frac{j_z}{j^2 - \frac{1}{4} \hbar^2} \frac{1}{2} \left[\left(j^2 - \frac{1}{4} \hbar^2 \right) - \left(l^2 - \frac{1}{4} \hbar^2 \right) + \left(s^2 - \frac{1}{4} \hbar^2 \right) \right] + \frac{1}{j^2 - \frac{1}{4} \hbar^2} [\gamma_y j_x - \gamma_x j_y], \quad (31)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \gamma_x &= s_z j_y - j_z s_y = s_z l_y - l_z s_y = l_y s_z - l_z s_y \\ \gamma_y &= j_z s_x - s_z j_x = l_z s_x - s_z l_x = l_z s_x - l_x s_z \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

Первый член в этом выражении s_z является константой невозмущенного движения и потому целиком принадлежит к первой части, в то время как второй член, как мы сейчас увидим, целиком принадлежит ко второй части.

В соответствии с формулами (32) мы введем:

$$\gamma_z = l_x s_y - l_y s_x$$

Легко проверить, что и что

$$j_x \gamma_x + j_y \gamma_y + j_z \gamma_z = 0$$

и что

$$[j_z, \gamma_x] = \gamma_y; [j_z, \gamma_y] = -\gamma_x; [j_z, \gamma_z] = 0.$$

Эти соотношения имеют такой же вид, как соотношения (3), (4) и (5) гл. VIII, так что наши $\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z$ связаны моментом количества движения \mathbf{j} таким же точно образом, как в главе VIII x, y, z были связаны с моментом количества движения \mathbf{m} . Поэтому мы можем воспользоваться готовым результатом рассуждения в § 47, где мы получили условие того, что матричный элемент x, y и z не обращается в нуль в таком представлении, в котором k диагонально. Таким способом мы находим, что единственными не обращающимися в нуль элементами матриц γ_x, γ_y и γ_z в таком представлении, в котором j диагонально, являются элементы, относящиеся к переходам, сопровождающимся изменением j на $\pm \hbar$. Коэффициенты при γ_x и γ_y во втором члене правой части равенства (31) коммутируют с j , так что представитель всего этого члена должен содержать только матричные элементы, соответствующие переходам, при которых j меняется на $\pm \hbar$, и следовательно соответствующие двум различным уровням энергии невозмущенной системы.

Поэтому возмущающая энергия V , если пренебречь той ее частью, представитель которой состоит из матричных элементов, относящихся к двум различным невозмущенным уровням энергии, принимает вид

$$\frac{e\hbar}{2mc} j_z \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{\left(j^2 - \frac{1}{4} \hbar^2 \right) - \left(l^2 - \frac{1}{4} \hbar^2 \right) + \left(s^2 - \frac{1}{4} \hbar^2 \right)}{j^2 - \frac{1}{4} \hbar^2} \right\} \quad (33)$$

Собственные значения этого выражения дают в первом порядке приближения изменение уровней энергии. Выбирая представление так, чтобы j_z было диагональным, т. е. беря основные состояния, пространственно-протонированные в направлении z , мы можем сделать представитель выражения (33) диагональным. Выражение (33) дает нам непосредственно в первом порядке приближения изменение уровней энергии, вызванное магнитным полем. Это выражение известно под названием формулы Ланде.

Результат (33) сохраняется только в том случае, когда возмущающая энергия V мала по сравнению с разностями энергии внутри мультиплета. Для больших значений V нужна более сложная теория. Однако в весьма сильных полях, когда разности энергии внутри мультиплета малы по сравнению с V , теория вновь становится очень простой. Мы можем совершенно пренебречь энергией магнитных моментов спина в случае атома в отсутствии магнитного поля, так что в нашей невозмущенной системе сами векторы \mathbf{l} и \mathbf{s} , взятые в отдельности, являются константами движения, а не только их величины l и s . Возмущающая энергия V ,

которая попрежнему равна $\frac{eH}{2mc}(j_z + s_z)$, является теперь константой движения для невозмущенной системы; поэтому ее собственные значения непосредственно дают изменение энергетических уравнений. Эти собственные значения равны величине $\frac{eH\hbar}{2mc}$ помноженной на целое число или на целое число с половиной смотря по тому, является ли число электронов четным или нечетным.

Х. ЗАДАЧИ О СТОЛКНОВЕНИЯХ.

§ 56. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ.

В этой главе мы будем заниматься задачами, относящимися к частице, которая приходит с бесконечно-большого расстояния, встречается или «сталкивается» с некоторой атомной системой и затем, подвергшись рассеянию на некоторый угол, вновь уходит на бесконечность. Атомную систему, производящую рассеяние, мы будем для краткости называть рассеивателем. Итак мы имеем механическую систему, состоящую из рассеивателя и падающей на него частицы, которые взаимодействуют друг с другом; мы должны рассматривать эту систему по законам квантовой механики и вычислить, в частности, вероятность рассеяния на каждый данный угол. Эта задача впервые была решена Борном, метод которого по существу эквивалентен методу, изложенному в следующем параграфе. Мы должны принять во внимание возможность того, что рассеиватель, рассматриваемый как отдельная механическая система, может иметь ряд различных стационарных состояний и что, если первоначально он находился в одном из них, когда частица приходила с бесконечности, то при уходе частицы вновь на бесконечность он может оказаться в другом стационарном состоянии. Таким образом сталкивающаяся с рассеивателем частица может вызвать переход его из одного состояния в другое.

Гамильтонова функция всей системы, состоящей из рассеивателя и частицы, не будет содержать времени явно, так что вся эта система будет иметь стационарные состояния, представленные периодическими решениями уравнения Шредингера. Постараемся правильно понять смысл этих стационарных состояний. Совершенно очевидно, что в каждом состоянии системы частица будет почти все время находиться на бесконечности и следовательно вероятность нахождения частицы в каком либо конечном объеме, усредненная по времени, будет равняться нулю. Но ведь в стационарном состоянии вероятность нахождения частицы в заданном конечном объеме, как и всякий другой результат наблюдения, не может зависеть от времени; следовательно эта вероятность равняется своему среднему значению, которое, как мы видели, есть нуль. Поэтому нас будут интересовать только относительные значения вероятности нахождения частицы в том или ином конечном объеме, поскольку абсолютные значения этих вероятностей равны нулю. Выражая это математически, мы находим следующее: пусть символ ψ , обозначающий стационарное состояние, нормирован надлежащим образом (в смысле удобства физического истолкования), т. е. так, что $\varphi\psi = 1$; далее, пусть Q обозначает наблюдаемую, являющуюся функцией положения частицы в данный момент времени, и притом такую, что она равна единице, когда частица находится в некотором заданном конечном объеме, а в противном случае равна нулю; тогда $\varphi Q\psi = 0$, и это означает, что среднее значение, т. е. вероятность нахождения частицы в заданном объеме, равно нулю. Поэтому для нас будет более удобно обозначить стационарное состояние ψ - символом, нормированным к бесконечности, т. е. сделать так, чтобы было $\varphi\psi = \infty$, причем бесконечность должна быть такой, что $\varphi Q\psi$ оказывается конечной величиной. Это конечное значение $\varphi Q\psi$ и дает относительную вероятность нахождения частицы в заданном объеме.

Желая получить наглядное описание состояния, обозначенного символом ψ , который нормирован не так, как принято обычно для удобства физического истолкования, а так, чтобы было $\varphi\psi = n$, предположим для удобства, что мы имеем дело с n одинаковыми системами, находящимися в одном и том же пространстве, но не взаимодействующими друг с другом, так что каждая из них совершает свое собственное движение независимо от остальных. В этом случае величина $\varphi a\psi$, где a есть некоторая наблюдаемая, может быть истолкована как полное значение a для всех n систем. Применяя эти соображения к упомянутому ψ символу, который нормирован так, чтобы было $\varphi\psi = \infty$, и который обозначает стационарное состояние системы, состоящей из рассеивателя и сталкивающейся с ним частицы, мы должны вообразить бесконечное множество таких систем с рассеивателями, расположенными в одной и той же точке пространства, и с частицами, распределенными в пространстве непрерывно. Количество частиц в заданном конечном объеме будет иметь вид $\varphi Q\psi$, где Q — наблюдаемая, определение которой дано выше и которая имеет значение 1, когда частица

находится в заданном объеме, и значение 0, когда она находится в другом месте. Если ψ - символ представлен волновой функцией Шредингера, зависящей от декартовых координат частицы, то квадрат модуля этой функции может быть истолкован непосредственно как плотность частиц. Однако следует помнить, что у каждой частицы есть свой собственный, лично ей принадлежащий рассеиватель. Различные частицы могут обладать рассеивателями, находящимися в различных состояниях. Поэтому каждому состоянию рассеивателя будет соответствовать своя плотность частиц, а именно плотность частиц, принадлежащих рассеивателю в этом состоянии. Это обстоятельство будет учтено тем, что волновая функция будет содержать не только переменные, описывающие положение частицы, но и переменные, описывающие состояние рассеивателя.

Для определения коэффициентов рассеяния нам нужно будет исследовать стационарные состояния всей системы, состоящей из рассеивателя и частицы. Пусть например мы хотим определить вероятность рассеяния по различным направлениям, если рассеиватель первоначально находился в заданном стационарном состоянии и падающая частица имела первоначально скорость, заданную и по величине и по направлению; тогда мы должны исследовать такое стационарное состояние всей системы которое с изложенной выше точки зрения содержит на больших расстояниях от места нахождения рассеивателя только частицы, движущиеся с этой заданной (по величине и направлению) скоростью и принадлежащие рассеивателю в заданном начальном состоянии, а также и частицы, удаляющиеся от места нахождения рассеивателя и принадлежащие быть может, рассеивателям в различных стационарных состояниях. Это весьма близко соответствует действительному положению вещей, при экспериментальном определении коэффициентов рассеяния, с той только разницей, что нарисованная нами картина описывает в действительности всего лишь одну систему, состоящую из рассеивателя и частицы. Распределение удаляющихся от рассеивателя частиц на бесконечно большом расстоянии дает нам не все те сведения о коэффициентах рассеяния, которые могут быть получены из опыта. Для практического вычисления стационарных состояний, описываемых в этой картине, можно воспользоваться изложенным в § 51 методом возмущений, взяв в качестве невозмущенной системы например такую, в которой между рассеивателем и частицей нет никакого взаимодействия.

Имея дело с задачами о столкновениях, следует принять во внимание также и ту возможность, что рассеиватель может оказаться способным поглощать и вновь испускать частицу. Эта возможность возникает тогда, когда существует одно или несколько состояний, поглощения, т. е. таких приблизительно стационарных состояний, которые в некоторый момент времени являются замкнутыми в смысле § 45 (замкнутыми состояниями называются такие, в которых вероятность нахождения частицы на расстоянии большем, чем r , от рассеивателя стремится к нулю при $r \rightarrow \infty$). Так как состояние поглощения является лишь приближенно стационарным состоянием, то его свойство замкнутости сохраняется лишь временно, и по истечении некоторого достаточно большого промежутка времени вновь будет иметься конечная вероятность того, что частица движется к бесконечности. Физически это обозначает, что имеется конечная вероятность спонтанного испускания частицы. Тот факт, что, описывая условия необходимые для того, чтобы могло произойти явление испускания или поглощения, мы должны были пользоваться словом «приблизительно», показывает, что эти условия не могут быть выражены точным математическим языком. Мы можем придать смысл этим явлениям лишь в том случае, когда мы пользуемся методом возмущений. Эти явления происходят тогда, когда невозмущенная система/состоящая из рассеивателя и частицы, имеет замкнутые стационарные состояния. Возмущение нарушает стационарность этих состояний и приводит к спонтанному испусканию и к обратному процессу – поглощению.

Для вычисления вероятности поглощения и испускания необходимо иметь дело с нестационарными состояниями системы, в противоположность вычислению коэффициентов рассеяния; при этом нужно будет применить метод возмущений, изложенный в § 52. Поэтому для вычисления коэффициента испускания нужно рассмотреть описанные выше нестационарные состояния поглощения. Далее, так как за поглощением всегда вновь следует испускание, то его нельзя отключить от рассеяния, если производить опыты, в которых режим остается неизменным, что соответствует стационарному состоянию системы. Отличие

появляется лишь тогда, когда мы имеем дело с нестационарным случаем, например начинаем пускать поток падающих частиц в некоторый строго определенный момент времени; так что рассеянные частицы появятся, как только падающие частицы встретятся с рассеивателями, а те частицы, которые были поглощены и испущены вновь, начнут появляться лишь через некоторое время. Этим потоком частиц будет изображаться некоторый нестационарный ψ -символ, нормированный к бесконечности, которым и можно воспользоваться для вычисления коэффициента поглощения.

§ 57. КОЭФФИЦИЕНТ РАССЕЙЯНИЯ.

Посмотрим, как вычисляется коэффициент рассеяния, сперва в том случае, когда нет ни поглощения ни испускания, т. е. когда наша невозмущенная система не имеет замкнутых стационарных состояний. В качестве такой невозмущенной системы мы можем для удобства взять систему, в которой между рассеивателем и частицей нет взаимодействия. Ее гамильтонова функция будет поэтому иметь вид

$$H_0 = H_s + W, \quad (1)$$

где H_s есть функция Гамильтона для самого рассеивателя, а W есть функция Гамильтона для частицы, т. е.

$$W = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \quad (2)$$

Возмущающая энергия V , которую мы будем считать малой, будет функцией декартовых координат частицы x, y, z , а также быть может и ее импульсов p_x, p_y, p_z и динамических переменных, описывающих рассеиватель.

Так как нас теперь интересуют только стационарные состояния всей системы, то мы можем использовать описанный в § 51 метод возмущений. Наша невозмущенная система обязательно имеет непрерывный ряд уровней энергии, так как в ее состав входит свободная частица; вследствие этого нужно внести в метод возмущений некоторые изменения. Вопрос о вызванном возмущением изменении уровней энергии, стоявший в центре внимания в § 51, теряет смысл; условие, сделанное в § 51 о том, что для обозначения приблизительно равных собственных значений H_0 и H употребляется одинаковое количество штрихов, также отпадает. Не может возникнуть и задача о вековых возмущениях, так как если невозмущенная система вырождена, то возмущенная, которая также должна иметь непрерывный ряд уровней энергии, будет вырожденной в такой же самой степени. Любой собственный ψ -символ невозмущенной функции Гамильтона H_0 , принадлежащий, допустим, собственному значению H'_0 , будет приближенно равен некоторому собственному ψ -символу возмущенной функции Гамильтона H , а именно каждому из бесконечного множества собственных ψ -символов наблюдаемой H , принадлежащих некоторому узкому интервалу * собственных значений H' , приближенно равных H'_0 . (В случае непрерывного ряда собственных значений смысл приближенного равенства двух ψ -символов не может быть точно определен без помощи теории более строгой, нежели та, которая составляет предмет этой книги. Следует однако заметить, что этот смысл должен быть таков, что два собственных ψ -символа наблюдаемой, принадлежащих двум приблизительно равным собственным значениям, приблизительно равны, хотя они и ортогональны друг ко другу.)

Выразим, как прежде, стационарное состояние $\psi(H')$ возмущенной системы в виде суммы собственного ψ -символа $\psi(H'_0)$ невозмущенной функции Гамильтона и небольшой поправки ψ_1 . Но мы уже не имеем права сделать допущение, что ортогонально к $\psi(H'_0)$, которое мы сделали в формуле (5) в § 51. Причина та, что если ввести таким же образом, как в формуле (4) в § 51, и затем выразить ψ_1 в виде суммы двух частей, из которых одна пропорциональна $\psi(H'_0)$, а другая ортогональна к $\psi(H'_0)$, то в случае непрерывного ряда собственных значений H'_0 обе эти части могут быть большими, хотя их сумма мала. Например эти части могут иметь вид $\psi(H'_0)$ и $-\psi(H'_0 + \delta H'_0)$. Так как мы не можем потребовать, чтобы было и ортогональным к $\psi(H'_0)$ и малым, то мы предпочитаем сделать

его малым. Для того, чтобы загладить этот недостаток простоты в ψ_1 , мы выберем H'_0 так, чтобы оно было в точности равно H' . Обозначим это число H'_0 или H' равное энергии искомого стационарного состояния, через E . Мы имеем уравнение

$$(E - H_0) \psi(H'_0) = V \psi(H'), \quad (3)$$

которое дает

$$(E - H_0) \psi_1 = V \psi(H') \text{ или } (E - H_s - W) \psi_1 = V \psi(H'_0) \quad (4)$$

[см. формулу (1)], если пренебречь членом второго порядка $V \psi_1$. Мы воспользуемся ур-ием (4) для определения стационарных состояний возмущенной системы в первом порядке приближения.

Пусть α обозначает полную систему коммутирующих друг с другом переменных, описывающих рассеиватель и являющихся стационарными состояниями самого рассеивателя (без частицы); ими можно воспользоваться для обозначения стационарных состояний рассеивателя. Для этого нужно, чтобы H_s коммутировало со всеми α и было их функцией. Выберем для всей системы (рассеиватель плюс частица) такое представление, в котором все α , а также x, y, z , т. е. координаты частицы, были бы диагональны. При этом H_s тоже будет диагональным. Пусть представителем $\psi(H'_0)$ будет $(x\alpha|0)$, а представителем ψ_1 пусть будет $(x\alpha|1)$, где одна буква x написана для краткости вместо трех букв x, y, z . Таким же образом будем писать просто dx вместо произведения $dx dy dz$. С помощью (2) ур-ие (4), переписанное в представителях, принимает вид

$$\left\{ E - H_s(\alpha') + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\} (x\alpha'|1) = \sum_{\alpha''} \int (x\alpha'|V|x''\alpha'') dx'' (x''\alpha''|0). \quad (5)$$

Предположим, что падающая частица имеет количество движения p^0 и что начальное стационарное состояние рассеивателя есть α^0 . Тогда стационарным состоянием $\psi(H'_0)$ нашей невозмущенной системы будет такое, в котором $p = p^0$ и $\alpha = \alpha^0$; его представитель поэтому будет иметь вид

$$(x\alpha|0) = \delta_{\alpha\alpha^0} e^{i \frac{(p^0, x)}{\hbar}}. \quad (6)$$

Вследствие этого ур-ие (5) сводится к следующему:

$$\left\{ E - H_s(\alpha') + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\} (x\alpha'|1) = \int (x\alpha'|V|x^0\alpha^0) dx^0 e^{i \frac{(p^0, x^0)}{\hbar}}$$

или

$$\{k^2 + \nabla^2\} (x\alpha'|1) = F, \quad (7)$$

где

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \{E - H_s(\alpha')\} \quad (8)$$

и где

$$F = \frac{2m}{\hbar^2} \int (x\alpha'|V|x^0\alpha^0) dx^0 e^{i \frac{(p^0, x^0)}{\hbar}} \quad (9)$$

является совершенно определенной функцией переменных x, y, z и α' . Кроме того должно быть

$$E = H'_0 = H_s(\alpha^0) + \frac{(p^0)^2}{2m}. \quad (10)$$

Наша задача заключается теперь в том, чтобы получить решение $(x\alpha'|1)$ ур-ия (7), которое при значениях x, y, z , соответствующих точкам на большом расстоянии от рассеивателя, представляло бы только частицы, удаляющиеся от него. Квадрат модуля этого решения, т. е. $|(x\alpha'|1)|^2$, даст плотность рассеянных частиц, принадлежащих рассеивателям в

состоянии α' , если плотность падающих частиц равна $|(x\alpha'|1)|^2$, т. е. единице. При переходе к полярным координатам ρ, ϑ, φ ур-ие (7) принимает вид:

$$\left\{ k^2 + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} (r \vartheta \varphi \alpha' | 1) = F. \quad (11)$$

Но F должно стремиться к нулю при $r \rightarrow \infty$, что вытекает из того физического факта, что энергия взаимодействия рассеивателя и частицы должна стремиться к нулю, когда расстояние между ними увеличивается до бесконечности. Если в уравнении (11) совершенно пренебречь величиной F , то приближенное решение при больших r будет:

$$(r \vartheta \varphi \alpha' | 1) = u(\vartheta \varphi \alpha') e^{\frac{ikr}{r}}, \quad (12)$$

где u есть любая функция переменных ϑ, φ и α' (при подстановке этого выражения в левую часть ур-ия (11) получается результат порядка $\frac{1}{r^8}$). Если не пренебрегать величиной F , то решение ур-ия (11) попрежнему будет при больших r иметь вид (12), предполагая, что F стремится к нулю достаточно быстро при $r \rightarrow \infty$, но функция и при этом будет вполне однозначно определяться видом решения при меньших значениях r .

Для таких значений α' наблюдаемых α , при которых k^2 , определенное формулой (8), оказывается положительным, нужно выбрать для k в формуле (12) положительный квадратный корень из k^2 для того, чтобы (12) могло представлять только частицы, движущиеся наружу, т. е. частицы, для которых радиальная составляющая количества движения p_r , представленная оператором $-i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$, имеет положительное значение. При этом плотность рассеянных частиц, принадлежащих рассеивателям в состоянии α' , равная квадрату модуля выражения (12), уменьшается с возрастанием r по закону обратных квадратов, что очевидно и с физической точки зрения; распределение этих частиц по направлениям определяется выражением $|u(\vartheta \varphi \alpha')|^2$. Далее, величина количества движения этих рассеянных частиц, которую мы обозначим через P' равна $k\hbar$, так как показательная функция в (12) должна иметь вид $e^{\frac{p'r}{\hbar}}$; поэтому с помощью (8) и (10) можно заключить, что энергия этих частиц равна

$$\frac{P'^2}{2m} = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = E - H_s(\alpha') = H_s(\alpha^0) - H_s(\alpha') + \frac{p^0{}^2}{2m}.$$

Это выражение в точности равно энергии падающих частиц, т. е. $\frac{p^0{}^2}{2m}$ минус увеличение энергии рассеивателя, т. е. $H_s(\alpha') - H_s(\alpha^0)$; этот результат находится в согласии с законом сохранения энергии. Для тех значений α' , при которых k^2 оказывается отрицательным, рассеянных частиц нет вовсе, так как полная начальная энергия частицы недостаточна для того, чтобы рассеиватель оказался в состоянии α' .

Теперь мы должны вычислить и $\vartheta \varphi \alpha'$ для таких значений α' , при которых k^2 положительно, и получить таким образом угловое распределение рассеянных частиц, принадлежащих рассеивателям в состоянии α' . Достаточно вычислить u в направлении $\vartheta = 0$, т. е. в направлении полярной оси, так как это направление совершенно произвольно. Применим теорему Грина, которая гласит, что объемный интеграл $\int (A \nabla^2 B - B \nabla^2 A) dx$, распространенный на любой объем, равен поверхностному интегралу $\int \left(A \frac{\partial B}{\partial n} - B \frac{\partial A}{\partial n} \right) ds$, распространенному на поверхность, ограничивающую этот объем, где A и B суть любые

функции точки, $a \frac{\partial}{\partial n}$ обозначает дифференцирование по направлению внешней нормали.

Положим

$$A = e^{-ikr \cos \theta}, \quad B = (r \partial_{\varphi \alpha'} | 1)$$

и применим теорему к большому шару, центр которого лежит в начале координат. Подынтегральная функция в объемном интеграле равна [см. формулу (7) или (11)]

$$\begin{aligned} e^{-ikr \cos \theta} \nabla^2 (r \partial_{\varphi \alpha'} | 1) - (r \partial_{\varphi \alpha'} | 1) \nabla^2 e^{-ikr \cos \theta} &= \\ = e^{-ikr \cos \theta} (\nabla^2 + k^2) (r \partial_{\varphi \alpha'} | 1) &= e^{-ikr \cos \theta} F, \end{aligned}$$

между тем как подынтегральная функция поверхностного интеграла, на основании формулы (12) оказывается равной

$$\begin{aligned} e^{-ikr \cos \theta} \frac{\partial}{\partial r} (r \partial_{\varphi \alpha'} | 1) - (r \partial_{\varphi \alpha'} | 1) \frac{\partial}{\partial r} e^{-ikr \cos \theta} &= \\ = e^{-ikr \cos \theta} u \left(-\frac{1}{r^2} + \frac{ik}{r} \right) e^{ikr} + i \frac{u}{r} e^{ikr} k \cos \theta e^{-ikr \cos \theta} &= \\ = \frac{iku}{r} (1 + \cos \theta) e^{ikr(1 - \cos \theta)}, \end{aligned}$$

если пренебречь величинами порядка $\frac{1}{r^2}$. Поэтому мы имеем:

$$\begin{aligned} \int e^{-ikr \cos \theta} F dx &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} r^2 \sin \theta d\theta i \frac{ku}{r} (1 + \cos \theta) e^{ikr(1 - \cos \theta)} = \\ &= ikr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\gamma u(\partial_{\varphi \alpha'}) (2 - \gamma) e^{ikr\gamma}, \end{aligned}$$

где $\gamma = 1 - \cos \theta$ и где объемный интеграл в левой части равенства распространен на все пространство. Интегрируя по частям правую часть по γ мы приводим ее к виду:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ \left[u(\partial_{\varphi \alpha'}) (2 - \gamma) e^{ikr\gamma} \right]_{\gamma=0}^{\gamma=2} - \int_0^2 d\gamma \cdot e^{ikr\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \left[u(\partial_{\varphi \alpha'}) (2 - \gamma) \right] \right\}.$$

Второй член в фигурных скобках имеет порядок величины $\frac{1}{r}$, что может быть выяснено дальнейшим интегрированием по частям; поэтому в дальнейшем им можно пренебречь. Остается

$$\int e^{-ikr \cos \theta} F dx = -2 \int_0^{2\pi} d\varphi u(0 \varphi \alpha') = -4\pi u(0 \varphi \alpha'),$$

что и дает значение $u(\partial_{\varphi \alpha'})$ для направления $\theta = 0$.

Этот результат можно записать в виде:

$$u(0 \varphi \alpha') = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i p' r \frac{\cos \theta}{\hbar}} F dx, \quad (13)$$

так как $P' = \hbar k$ вектор p' обозначает количество движения рассеянных электронов, уходящих по некоторому направлению (причем следовательно величина вектора p' равна P'), то значение и для этого направлений будет:

$$u(\partial' \varphi \alpha') = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i \frac{(p', x)}{\hbar}} F dx,$$

что вытекает из формулы (13), если сделать это направление полярной осью. С помощью (9) это выражение принимает вид

$$\begin{aligned} u(\partial' \varphi \alpha') &= -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int \int e^{-i \frac{(p', x)}{\hbar}} dx (x \alpha' | V | x^0 \alpha^0) dx^0 e^{i \frac{(p^0, x^0)}{\hbar}} = \\ &= -2\pi m \hbar^2 (p' \alpha' | V | p^0 \alpha^0), \end{aligned}$$

если сделать преобразование от координат x -частицы к ее импульсам, воспользовавшись функцией преобразования (36) главы VIII. При этом одна буква p обозначает все три составляющие количества движения частицы.

Плотность рассеянных частиц, принадлежащих рассеивателям в состоянии α' , будет равна величине $\frac{|u(\partial' \varphi \alpha')|^2}{r^2}$. Так как их скорость есть $\frac{P'}{m}$, то количество таких частиц,

появляющихся в единицу времени в единице телесного угла вокруг направления вектора p' , будет равно $\frac{P}{m} |u(\mathcal{G}'\varphi'\alpha')|^2$. Плотность падающих частиц равна, как мы видели, единице; поэтому число падающих частиц, пересекающих единицу площади в единицу времени, равно их скорости $\frac{P'}{m}$, где p^0 есть величина вектора p^0 . Поэтому эффективная площадь, в которую должна попасть падающая частица для того, чтобы быть рассеянной в единице телесного угла вокруг направления p' и оставить при этом рассеиватель в состоянии α' , будет равна

$$\frac{P'}{P^0} |u(\mathcal{G}'\varphi'\alpha')|^2 = 4\pi^2 m^2 h^2 \frac{P'}{P^0} |(p'\alpha' | V | p^0\alpha^0)|^2, \quad (15)$$

Это и есть коэффициент рассеяния, относящийся к переходам рассеивателя из состояния α^0 в состояние α' . Он зависит от того матричного элемента $(p'\alpha' | V | p^0\alpha^0)$ возмущающей энергии V , у которого столбец $p^0\alpha^0$ и строчка $p'\alpha'$ относятся соответственно к начальному и к конечному состояниям невозмущенной системы, совершающей этот связанный с рассеянием переход. Таким образом результат (15) некоторым образом аналогичен результатам (19) и (20) главы IX, хотя численные коэффициенты в обоих случаях разные, соответственно различию в характере обоих процессов перехода.

§58. РЕШЕНИЕ ТОЙ ЖЕ ЗАДАЧИ В p -ПРЕДСТАВЛЕНИИ.

В самом результате (15), относящемся к коэффициенту рассеяния, имеется ссылка только на такое представление, в котором количество движения p диагонально. Можно ожидать, что для более прямого доказательства того же самого результата следовало бы все время оперировать p -представлением, а не x -представлением, от которого лишь в самом конце совершается переход к p -представлению, как делалось в § 57. Впрочем на первый взгляд кажется, что такое доказательство не было бы большим улучшением, так как не столь прямой характер доказательства, основанного на x -представлении, искупается его большей наглядностью, а именно тем, что квадрат модуля x -представителя состояния может быть истолкован как плотность потока частиц в процессе рассеяния. Однако способ, оперирующий x -представлением, имеет более серьезные недостатки. Одним из важнейших применений теории столкновений является ее; применение к тому случаю, когда падающими частицами являются фотоны. Но фотон не есть простая частица: он обладает поляризацией. Из классической электромагнитной теории света следует, что фотон с определенным количеством движения, т. е. с определенным направлением движения и определенной частотой, может находиться в различных состояниях поляризации (плоской, круговой и т. д.), между тем как фотон, обладающий определенным положением в пространстве, что можно для наглядности представить себе в виде электромагнитного возмущения, сосредоточенного в очень маленьком объеме, не может иметь определенного состояния поляризации. Эти факты означают, что поляризационная наблюдаемая фотона коммутирует с его количеством движения, но не с его положением. В результате оказывается, что метод, оперирующий p -представлением, непосредственно применим к случаю фотонов - необходимо только ввести в представитель динамическую переменную, описывающую поляризацию, и трактовать ее наравне с переменными α , описывающими рассеиватель; способ же, основанный на x -представлении, неприменим. Далее, имея дело с фотонами, необходимо принять во внимание релятивистскую зависимость массы от скорости. Это легко сделать, если пользоваться p -представлением; в случае x -представления это совсем не так легко.

Если учесть релятивистскую зависимость массы частицы от скорости, то уравнение (4) попрежнему остается в силе, но W определяется уже равенством

$$\frac{W^2}{c^2} = m^2 c^2 + P^2 = m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2, \quad (16)$$

а не равенством (2). Переписанное в p -представителях уравнение (4) принимает вид

$$[E - H_s(\alpha') - W](p\alpha' | 1) = \sum_{\alpha''} \int (p\alpha' | V | p''\alpha'') dp''(p''\alpha'' | 0),$$

где под W подразумевается определенная функция переменных p_x, p_y, p_z заданная формулой (16). То же самое может быть переписано в виде:

$$\{W' - W\} (p \alpha' | 1) = \sum_{\alpha''} \int (p \alpha' | V | p'' \alpha'') dp'' (p'' \alpha'' | 0), \quad (17)$$

где величина

$$W' = E - H_s(\alpha') \quad (18)$$

есть энергия, которая нужна на основании закона сохранения энергии для того, чтобы рассеянная частица принадлежала рассеивателю в состоянии α' . Преобразуя (6) с помощью функции преобразования (36) главы VI, мы находим, что p -представитель ψ -символа $\psi(H'_0)$ есть

$$(p \alpha | 0) = h^{\frac{3}{2}} \delta_{\omega\alpha} \delta(p - p^0), \quad (19)$$

что легче всего проверить посредством обратного преобразования к x -представлению. При этом $\delta(p - p^0)$ обозначает произведение

$$\delta(p_x - p_x^0) \delta(p_y - p_y^0) \delta(p_z - p_z^0).$$

Уравнение (17) принимает вид:

$$\{W' - W\} (p \alpha' | 1) = h^{\frac{3}{2}} (p \alpha' | V | p^0 \alpha^0). \quad (20)$$

Сделаем теперь каноническое преобразование от прямоугольных составляющих p_x, p_y, p_z вектора \mathbf{p} к его полярным координатам P, ω, χ , которые определяются формулами:

$$p_x = P \cos \omega, \quad p_y = P \sin \omega \cos \chi, \quad p_z = P \sin \omega \sin \chi.$$

Если в новом представлении $P^2 \sin \omega$ будет весовой функцией, то вес, приписываемый каждому данному объему p -пространства, будет такой же самый, как и в прежнем p -представлении, так что каноническое преобразование будет просто введением нового обозначения столбцов и строк матриц без всякого изменения значения матричных элементов или чисел, образующих представитель состояния. Поэтому в новом представлении (20) получит вид:

$$\{W' - W\} (P \omega \chi \alpha' | 1) = h^{\frac{3}{2}} (P \omega \chi \alpha' | V | P^0 \omega^0 \chi^0 \alpha^0), \quad (21)$$

где W есть теперь функция одной переменной P .

Коэффициент при $(P \omega \chi \alpha' | 1)$, равный $\{W' - W\}$, является теперь уже простым численным множителем, а не дифференциальным оператором, как было в методе, основанном на x -представлении. Поэтому мы имеем право разделить на этот множитель и получить таким образом явное выражение для $(P \omega \chi \alpha' | 1)$. Однако, если α' таково, что величина W' , определенная из формулы (18), превосходит mc^2 , то множитель $W' - W$ будет обращаться в нуль в некоторой точке области изменения P , а именно в точке $P = P'$, где P' определяется через W по формуле (16). Для функции $(P \omega \chi \alpha' | 1)$ это будет особенной точкой. Существование такой особенной точки показывает, что $(P \omega \chi \alpha' | 1)$ представляет бесконечное множество частиц, движущихся на большом расстоянии от своих рассеивателей с энергией сколь угодно близкой к W' и что поэтому мы должны изучить именно эту особенную точку функции $(P \omega \chi \alpha' | 1)$ для того, чтобы получить распределение частиц по направлениям на бесконечности.

В результате деления уравнения (21) на $\{W' - W\}$ мы получаем:

$$(P \omega \chi \alpha' | 1) = h^{\frac{3}{2}} \frac{(P \omega \chi \alpha' | V | P^0 \omega^0 \chi^0 \alpha^0)}{W' - W} + \lambda(\omega \chi \alpha') \delta(W' - W), \quad (22)$$

где λ есть произвольная функция переменных ω, χ, α' [ведь если выражение, содержащее $\delta(W' - W)$ в виде множителя, помножится на $W' - W$, произведение обращается в тождественный нуль]. Желая придать смысл первому члену правой части равенства (22), условимся, что интегрирование этого члена по P в промежутке, содержащем P' должно производиться так: сперва произведем интегрирование в этом промежутке, исключив из него предварительно маленький промежуток от $P' - \varepsilon$ до $P' + \varepsilon$, и затем вычислим предел этого интеграла при $\varepsilon \rightarrow 0$. Всего этого достаточно для того, чтобы выражение (22) получило точный смысл, ибо когда мы имеем дело с такими представлениями, в которых строчки и

столбцы образуют непрерывный ряд, нас фактически интересуют только интегралы представителей состояний, а не сами эти представители. Мы видим, что, вследствие наличия неопределенной функции λ в (22), уравнение (21) недостаточно для полного определения представителя $(P\omega\chi|1)$. Эту функцию λ мы должны выбрать так, чтобы $(P\omega\chi|1)$ представляла только частицы, удаляющиеся от своих рассеивателей, так как; нам нужно, чтобы выражение (19) было представителем всех частиц, приближающихся к рассеивателям.

Рассмотрим сперва общий случай, когда $(P\omega\chi|)$ т. е. представитель состояния частицы, удовлетворяет уравнению типа

$$\{W' - W\} (P\omega\chi|) = f(P\omega\chi), \quad (23)$$

где $f(P\omega\chi)$ есть любая функция от P , ω и χ и где W' есть число, превосходящее mc^2 , так что $(P\omega\chi|)$ имеет вид:

$$(P\omega\chi|) = \frac{f(P\omega\chi)}{W' - W} + \lambda(\omega\chi)\delta(W' - W). \quad (24)$$

Постараемся узнать, какой вид должна иметь λ для того, чтобы $(P\omega\chi|)$ было представителем только частиц, удаляющихся от рассеивателей. Это мы можем сделать, перейдя к x -представлению, или - еще лучше - к представлению $r\vartheta\varphi$, и затем сравнивая новый представитель состояния при больших значениях r с выражением (12). Функция преобразования имеет вид:

$$(r\vartheta\varphi|P\omega\chi) = h^{-\frac{3}{2}} e^{i\frac{(p, x)}{\hbar}} = h^{-\frac{3}{2}} e^{iPr \frac{\cos\omega \cos\vartheta + \sin\omega \sin\vartheta \cos(\chi - \varphi)}{\hbar}}$$

Для направления $\vartheta = 0$ находим:

$$\begin{aligned} (r0\varphi|) &= h^{-\frac{3}{2}} \int_0^\infty P^2 dP \int_0^{2\pi} d\chi \int_0^\pi \sin\omega d\omega e^{i\frac{Pr \cos\omega}{\hbar}} (P\omega\chi|) = \\ &= h^{-\frac{3}{2}} \int_0^\infty P^2 dP \int_0^{2\pi} d\chi \left[\frac{e^{i\frac{Pr \cos\omega}{\hbar}} (P\omega\chi|)}{i\frac{Pr}{\hbar}} \right]_{\omega=0}^{\omega=\pi} + \\ &+ \int_0^\pi d\omega \frac{e^{i\frac{Pr \cos\omega}{\hbar}}}{i\frac{Pr}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial\omega} (P\omega\chi|). \end{aligned}$$

Второй член в фигурных скобках имеет порядок величины $\frac{1}{r^2}$, что может быть проверено при помощи дальнейшего интегрирования по частям по отношению к ω ; поэтому им можно пренебречь. Остается, таким образом

$$\begin{aligned} (r0\varphi|) &= \frac{i}{2\pi r\sqrt{h}} \int_0^\infty PdP \int_0^{2\pi} d\chi \left\{ e^{-i\frac{Pr}{\hbar}} (P\pi\chi|) - e^{i\frac{Pr}{\hbar}} (P0\chi|) \right\} = \\ &= \frac{i}{r\sqrt{h}} \int_0^\infty PdP \left\{ e^{-i\frac{Pr}{\hbar}} (P\pi\chi|) - e^{i\frac{Pr}{\hbar}} (P0\chi|) \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

Если вместо $(P\omega\chi|)$ подставить его значение из (24), то первый член подынтегральной функции в (25) дает

$$\frac{i}{r\sqrt{h}} \int_0^\infty PdP e^{-i\frac{Pr}{\hbar}} \left\{ \frac{f(P\pi\chi)}{W' - W} + \lambda(\pi\chi)\delta(W' - W) \right\}. \quad (26)$$

При этом часть интеграла, содержащая $\delta(W' - W)$, может быть вычислена непосредственно; если воспользоваться соотношением

$$PdP = \frac{WdW}{c^2},$$

вытекающим из (16), получается

$$\begin{aligned} \frac{i}{rc^2 \sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} W dW e^{-i \frac{Pr}{h} \lambda(\pi\gamma)} \delta(W' - W) = \\ = \frac{i}{rc^2 \sqrt{h}} W' \lambda(\pi\gamma) e^{-i \frac{P'r}{h}}. \end{aligned} \quad (27)$$

Для вычисления остальной части интеграла (26) воспользуемся формулой

$$\int_0^{\infty} g(P) \frac{e^{-i \frac{Pr}{h}}}{P' - P} dP = g(P') \int_0^{\infty} \frac{e^{-i \frac{Pr}{h}}}{P' - P} dP, \quad (28)$$

которая верна с точностью до членов, содержащих $\frac{1}{r}$, для любой непрерывной функции $g(P)$.

(Справедливость этой формулы вытекает из того, что интеграл

$$\int_0^{\infty} K(P) e^{-i \frac{Pr}{h}} dP$$

имеет в случае любой непрерывной функции $K(P)$ порядок $\frac{1}{r}$, и из того, что разность

$$\frac{g(P)}{P' - P} - \frac{g(P')}{P' - P}$$

есть непрерывная функция.) Пренебрегая членами, содержащими $\frac{1}{r}$, и маленьким промежутком от $P' - \varepsilon$ до $P' + \varepsilon$ в промежутке интегрирования, мы вычисляем правую часть равенства (28) и получаем

$$\begin{aligned} g(P') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i \frac{Pr}{h}}}{P' - P} dP = g(P') e^{-i \frac{P'r}{h}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i \frac{(P' - P)r}{h}}}{P' - P} dP = \\ = i g(P') e^{-i \frac{P'r}{h}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin \frac{(P' - P)r}{h}}{P' - P} dP = i \pi g(P') e^{-i \frac{P'r}{h}}. \end{aligned} \quad (29)$$

В нашем примере

$$g(P) = \frac{i}{r \sqrt{h}} \frac{P f(P \pi \gamma) (P' - P)}{W' - W}.$$

При $P = P'$ это выражение стремится к пределу:

$$g(P') = \frac{i}{r \sqrt{h}} \frac{P' f(P' \pi \gamma) W'}{P' c^2} = \frac{i}{rc^2 \sqrt{h}} W' f(P' \pi \gamma).$$

Подставляя это в (29) и прибавляя выражение (27), мы получаем для интеграла (26) значение:

$$\frac{W'}{rc^2 \sqrt{h}} \{ -\pi f(P' \pi \gamma) + i \lambda(\pi \gamma) \} e^{-i \frac{P'r}{h}}. \quad (30)$$

Аналогично этому второй член подинтегральной функции в интеграле (25) дает:

$$\frac{W'}{rc^2 \sqrt{h}} \{ -\pi f(P 0 \gamma) - i \lambda(0 \gamma) \} e^{i \frac{P'r}{h}}. \quad (31)$$

Сумма этих двух выражений и есть значение $(r0\varphi)$ при большом r .

Мы требуем, чтобы $(r0\varphi)$ представляла только частицы, удаляющиеся от рассеивателей, откуда следует, что она должна содержать множитель $e^{i \frac{P'r}{h}}$, но не $e^{-i \frac{P'r}{h}}$. Поэтому выражение (30) должно, равняться нулю, что дает

$$\lambda(\pi \gamma) = -i \pi f(P' \pi \gamma). \quad (32)$$

Таким образом мы видим, что условие, по которому $(r0\varphi)$ представляет в направлении $\vartheta = 0$ только частицы, удаляющиеся от рассеивателя, определяет значение λ для противоположного направления $\vartheta = \pi$. Так как направление полярной оси ($\vartheta = 0$ или $\omega = 0$) совершенно произвольно, то можно обобщить результат (32) и написать его в виде

$$\lambda(\omega \gamma) = -i \pi f(P' \omega \gamma), \quad (33)$$

что дает нам значение λ для какого угодно направления. Подставляя это значение в (24), мы получаем результат, который может быть записан в виде

$$(P\omega\chi|) = f(P\omega\chi) \left\{ \frac{1}{W' - W} - i\pi\delta(W' - W) \right\}, \quad (34)$$

так как в члене суммы, содержащем множитель $\delta(W' - W)$, можно заменить P на P' , ничего этим не изменяя. Условие, что $(P\omega\chi|)$ будет представителем только частиц, удаляющихся от рассеивателя, таким образом сводится к тому, что в его состав входит множитель

$$\left\{ \frac{1}{W' - W} - i\pi\delta(W' - W) \right\}. \quad (35)$$

Если взять λ из (33), то выражение (30) исчезает и значение $(r0\varphi|)$ при больших r определяется одним лишь выражением (31), а именно:

$$(r0\varphi|) = -\frac{2\pi W'}{rc^2\sqrt{h}} f(P'0\chi) e^{i\frac{P'r}{h}}.$$

Обобщая, можно написать это в виде

$$(r0\varphi|) = -\frac{2\pi W'}{rc^2\sqrt{h}} f(P'\omega\chi) e^{i\frac{P'r}{h}}.$$

Это равенство дает нам значение функции $(r0\varphi|)$ для любого направления ϑ, φ через посредство функции $f(P'\omega\chi)$ для того же направления. Оно имеет вид равенства (12), в котором

$$u(0\varphi) = -\frac{2\pi W'}{c^2\sqrt{h}} f(P'\omega\chi);$$

поэтому оно определяет распределение частиц, удаляющихся с количеством движения P' число этих частиц на единицу телесного угла и в единицу времени составляет

$$\frac{c^2 P'}{W'} |u|^2 = \frac{4\pi^2 W' P'}{hc^2} |f(P'\omega\chi)|^2. \quad (36)$$

Таким образом это распределение представлено функцией $(P\omega\chi|)$ из формулы (34).

Из этого общего вывода мы можем заключить, что если нам дан какой угодно представитель $(P\omega\chi|)$, представляющий только удаляющиеся частицы и удовлетворяющий уравнению типа (23), число таких частиц в единице телесного угла в единицу времени будет определяться формулой (36). Если этот представитель $(P\omega\chi|)$ дан в задаче, в которой число падающих частиц в единице объема равно 1, то это соответствует коэффициенту рассеяния, равному

$$\frac{4\pi^2 W^0 W' P'}{hc^4 P^0} |f(P'\omega\chi)|^2. \quad (37)$$

Таким образом важно знать только значение функции $f(P\omega\chi)$ в точке $P = P'$.

Если применить эту общую теорию к уравнениям (21) и (22), то из формулы

$$f(P\omega\chi) = h^{\frac{3}{2}} (P\omega\chi\alpha' | V | P^0\omega^0\chi^0\alpha^0)$$

на основании (37) вытекает значение коэффициента рассеяния:

$$\frac{4\pi^2 h^2 W^0 W' P'}{c^4 P^0} |(P'\omega\chi\alpha' | V | P^0\omega^0\chi^0\alpha^0)|^2. \quad (38)$$

Если пренебречь релятивистскими поправками и положить

$$\frac{W^0 W'}{c^4} = m^2,$$

то этот результат приводится к результату (15), полученному в предыдущем параграфе с помощью теоремы Грина.

§ 53 ДИСПЕРСИОННОЕ РАССЕЙНИЕ

Теперь нам предстоит определить рассеяние в тех случаях, когда падающая частица может быть поглощена, т. е. когда невозмущенная система, состоящая из рассеивателя и частицы, обладает замкнутыми стационарными состояниями с поглощенной частицей. Существование подобных замкнутых состояний невозмущенной системы, как будет видно из дальнейшего,

оказывает значительное влияние на рассеяние в возмущенной системе, причем это влияние очень сильно зависит от энергии падающей частицы, что приводит в оптике к явлению дисперсии (когда падающая частица есть фотон).

Введем представление, основными состояниями которого являются стационарные состояния невозмущенной системы, как было и в случае p -представления предыдущего параграфа. Эти стационарные состояния суть во-первых состояния $\psi(p'\alpha')$ в которых частица имеет определенное количество движения p' , а рассеиватель находится в определенном состоянии α' , во-вторых замкнутые состояния ψ_k , образующие отдельный ряд дискретных состояний. Мы допустим, что все эти состояния независимы и ортогональны друг ко другу, так что мы имеем дело с представлением обычного ортогонального типа. Вероятно такое допущение не может быть оправдано в том случае, когда падающая частица есть электрон или атомное ядро, так как в этом случае даже и в поглощенном состоянии ψ_k частица наверно должна где-нибудь находиться, так что мы имеем право ожидать, что ψ_k может быть разложено по собственным ψ -символам $\psi(x'\alpha')$ наблюдаемых x, y, z и α , а следовательно и по $\psi(p'\alpha')$. С другой стороны, когда частица есть фотон, то в поглощенных состояниях она уже не существует, а следовательно эти поглощенные состояния наверно независимы от состояний $\psi(p'\alpha')$ в которых частица существует, и ортогональны к ним. Поэтому наше допущение оправдывается в этом случае, который и является практически важным.

Представитель состояния будет теперь состоять из дискретного ряда чисел (k) , относящихся к основным состояниям ψ_k , и из трехмерных непрерывных рядов чисел $(p'\alpha')$, относящихся к $\psi(p'\alpha')$ (каждой системе значений α' соответствует такой трехмерный ряд). Аналогично этому и матрицы, являющиеся представителями наблюдаемых, будут содержать дискретные ряды строчек и столбцов, отмеченный числами k , и непрерывные ряды, отмеченные числами (p, α) . Так например матрица, представляющая возмущающую энергию, будет содержать элементы

$$(k' | V | k''), (k' | V | p'' \alpha''), (p' \alpha' | V | k'') \text{ и } (p' \alpha' | V | p'' \alpha'').$$

Так как нас интересует рассеяние, то мы должны попрежнему иметь дело со стационарными состояниями всей системы, которые попрежнему удовлетворяют уравнению типа (3). Однако теперь нам нужно приближение второго порядка; поэтому нельзя пользоваться ур-ием (4), введенным лишь с точностью первого порядка. Точное ур-ие (3), написанное в представителях, дает:

$$\left. \begin{aligned} (W' - W) (p' \alpha' |) &= \sum_{p'' \alpha''} \int (p' \alpha' | V | p'' \alpha'') c p'' (p'' \alpha'' |) + \sum_{k''} (p' \alpha' | V | k'') (k'' |) \\ (E - E_k) (k |) &= \sum_{p'' \alpha''} \int (k | V | p'' \alpha'') d p'' (p'' \alpha'' |) + \sum_{k''} (k | V | k'') (k'' |) \end{aligned} \right\} (39)$$

где W' определяется из (18), а E_k есть энергия стационарного состояния ψ_k невозмущенной системы. Если мы представим точный ψ -символ $\psi(H')$ в виде суммы $\psi(H'_0)$, поправки первого порядка ψ_1 , поправки второго порядка ψ_2 и т. д., т. е. положим

$$\psi(H') = \psi(H'_0) + \psi_1 + \psi_2 + \dots,$$

то r -ая поправка будет определяться $(r-1)$ -ой посредством уравнения

$$(E - H_0) \psi_r = V \psi_{r-1}.$$

Поэтому ее представитель $(p\alpha'|r)$, $(k|r)$ определится из

$$\left. \begin{aligned} (W' - W) (p\alpha' | r) &= \sum_{p'' \alpha''} \int (p\alpha' | V | p'' \alpha'') c p'' (p'' \alpha'' | r-1) + \sum_{k''} (p\alpha' | V | k'') (k'' | r-1) \\ (E - E_k) (k | r) &= \sum_{p'' \alpha''} \int (k | V | p'' \alpha'') d p'' (p'' \alpha'' | r-1) + \sum_{k''} (k | V | k'') (k'' | r-1) \end{aligned} \right\} (40)$$

При $r = 0$ эти уравнения оказываются обобщением ур-ния (17) на тот случай, когда существуют поглощенные состояния ψ_k . Представителем невозмущенного стационарного состояния $\psi(p^0 \alpha^0)$ будет теперь не просто (19), но

$$(p \alpha | 0) = h^{\frac{3}{2}} \delta_{\alpha \alpha^0} \delta(p - p^0), \quad (k | 0) = 0. \quad (41)$$

Поэтому поправка первого порядка определится из

$$\{W' - W\} (p \alpha' | 1) = h^{\frac{3}{2}} (p \alpha' | V | p^0 \alpha^0), \quad (42)$$

$$\{E - E_k\} (k | 1) = h^{\frac{3}{2}} (k | V | p^0 \alpha^0). \quad (43)$$

Можно принять, что матричные элементы $(k' | V | k'')$ возмущающей энергии V равны нулю, так как эти матричные элементы несущественны для исследуемых нами явлений; если бы они не обращались в нуль, то это просто обозначало бы, что поглощенные состояния ψ_k не выбраны надлежащим образом. Мы допустим далее, что матричные элементы $(p' \alpha' | V | p'' \alpha'')$ являются малыми величинами второго порядка, если принять матричные элементы $(k' | V | p'' \alpha'')$ и $(p' \alpha' | V | k'')$ за малые величины первого порядка. В случае фотонов, разобранных в главе XII, это допущение окажется справедливым. Из (43) и (42) вытекает, что $(k | 1)$ есть малая величина первого порядка, если только E не близко к одному из дискретных уровней энергии E_k , а $(p \alpha | 1)$ есть величина второго порядка. Из первого ур-ния (40) величина $(p \alpha | 2)$ определяется с точностью до величины второго порядка малости уравнением

$$\{W' - W\} (p \alpha' | 2) = h^{\frac{3}{2}} \sum_{k''} (p \alpha' | V | k'') (k'' | V | p^0 \alpha^0) \frac{1}{E - E_{k''}}.$$

Полная поправка второго порядка, которая возникает отчасти из $(p \alpha | 1)$, а отчасти из $(p \alpha | 2)$, удовлетворяет поэтому уравнению

$$\begin{aligned} \{W' - W\} \{ (p \alpha' | 1) + (p \alpha' | 2) \} = \\ = h^{\frac{3}{2}} \left\{ (p \alpha' | V | p^0 \alpha^0) + \sum_k \frac{(p \alpha' | V | k) (k | V | p^0 \alpha^0)}{E - E_k} \right\}. \end{aligned}$$

Это уравнение типа (23), если только α' таково, что $W' > mc^2$, т. е. если α' , как конечное состояние рассеивателя, не противоречит закону сохранения энергии. Поэтому из общего результата (37) можно заключить, что коэффициент рассеяния есть

$$\frac{4 \pi^2 h^2 W^0 W' \rho'}{c^4 p^0} = \left| (p' \alpha' | V | p^0 \alpha^0) + \sum_k \frac{(p' \alpha' | V | k) (k | V | p^0 \alpha^0)}{E - E_k} \right|^2 \quad (44)$$

Можно считать рассеяние состоящим из двух частей: из части, определяемой матричным элементом возмущающей энергии $(p' \alpha' | V | p^0 \alpha^0)$, и из части, определяемой матричными элементами $(p' \alpha' | V | k)$ и $(k | V | p^0 \alpha^0)$. Первая часть, совпадающая с полученным ранее результатом (38), может быть названа истинным рассеянием. Вторая часть может считаться происходящей от поглощения падающей частицы в состояние k и следующего за этим поглощением испускания такой же частицы по другому направлению. Тот факт, что оба члена приходилось складывать перед тем, как модуль возводился в квадрат, обозначает, что между обоими типами рассеяния происходит интерференция. Невозможно отделить оба рода рассеяния экспериментальным путем, так как различие их чисто математическое.

§ 60. РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЯНИЕ.

Предположим, что энергия падающих частиц меняется непрерывно, в то время как начальное состояние рассеивателя α^0 фиксировано. Полная энергия E при этом тоже меняется непрерывно, и формула (44) показывает, что когда E приближается к одному из дискретных уровней энергии E_k , рассеяние становится очень большим. На основании формулы (44) рассеяние даже должно стать бесконечно большим, когда E в точности равно одному из E_k . В действительности бесконечный коэффициент рассеяния, разумеется, физически невозможен, откуда мы можем заключить, что приближенные допущения, сделанные при выводе формулы

(44), перестают быть законными, когда E близко к E_k . Поэтому для того, чтобы исследовать рассеяние и в этом случае, мы должны вернуться к точным уравнениям (39) и использовать другой способ приближенного их решения.

Пусть E близко к некоторому определенному E_k . Большой член суммы в коэффициенте рассеяния (44) происходит от тех элементов матрицы, представляющей V , которые находятся в строчке k или в столбце k , т.е. от элементов типа $(k|V|p\alpha)$ или $(p\alpha|V|k)$. Рассеяние, происходящее от других матричных элементов возмущающей энергии V , имеет меньший порядок величины. Это наводит на мысль, что мы можем в уравнениях (39) пренебречь всеми матричными элементами V за исключением тех, которые важны для нашей задачи, т.е. тех, которые имеют вид $(p\alpha'|V|k)$ и $(k|V|p\alpha')$, где α' есть состояние рассеивателя, не обладающее слишком большим значением энергии для того, чтобы закон сохранения энергии запрещал ему быть конечным состоянием рассеивателя. Уравнения (39) приводятся к виду:

$$(W' - W)(p\alpha'|) = (p\alpha'|V|k)(k|), \quad (45)$$

$$(E - E_k)(k|) = \sum_{\alpha'} \int (k|V|p\alpha') dp (p\alpha'|), \quad (46)$$

где суммирование $\sum_{\alpha'}$ производится по таким значениям α' , что величина W' определяемая из (18), оказывается больше, чем mc^2 . Эти уравнения настолько просты, что их возможно разрешить, не делая Дальнейших неточных допущений.

Из (45) мы получаем посредством деления на $W' - W$:

$$(p\alpha'|) = \frac{(p\alpha'|V|k)(k|)}{W' - W} + \lambda\delta(W' - W). \quad (47)$$

Нужно выбрать λ , которая может быть любой функцией от α' и от количества движения p , таким образом, чтобы (47) представляла, кроме падающих частиц (19), только частицы, движущиеся от рассеивателя [Правая часть равенства (19) действительно при подстановке α' вместо α получает вид $\lambda\delta(W' - W)$, так как для того, чтобы эта правая часть не исчезла, нужны условия $\alpha' = \alpha^0$ и $p = p^0$, откуда $W' = E - H_s(\alpha') = E - H_s(\alpha^0) = W^0$ и $W = W^0$ и следовательно $W' = W$] Поэтому $(p\alpha'|)$ должно равняться

$$(p\alpha'|) = h^{\frac{3}{2}} \delta_{\alpha', \alpha^0} \delta(p - p^0) + (p\alpha'|V|k)(k|) \left\{ \frac{1}{W' - W} - i\pi\delta(W' - W) \right\}. \quad (48)$$

Из общей формулы (37) получается коэффициент рассеяния

$$\frac{4\pi^2}{hc^4} \frac{W^0 W' P'}{P^0} |p\alpha'|V|k|^2 |k|^2. \quad (49)$$

Остается определить значение $(k|)$. Это можно сделать, подставляя в (46) вместо $(p\alpha'|)$ его значение, взятое из (48). Это дает

$$\begin{aligned} (E - E_k)(k|) &= \\ &= h^{\frac{3}{2}} (k|V|p^0\alpha^0) + (k|) \sum_{\alpha'} \int |k|V|p\alpha'|^2 \left\{ \frac{1}{W' - W} - i\pi\delta(W' - W) \right\} dp = \\ &= h^{\frac{3}{2}} (k|V|p^0\alpha^0) + (k|) \{ a - ib \}, \end{aligned}$$

где

$$a = \sum_{\alpha'} \int |k|V|p\alpha'|^2 \frac{dp}{W' - W} \quad (50)$$

и где

$$\begin{aligned} b &= \pi \sum_{\alpha'} \int |k|V|p\alpha'|^2 \delta(W' - W) dp = \\ &= \pi \sum_{\alpha'} \int \int |k|V|P\omega\alpha'|^2 \delta(W' - W) P^2 dP \sin\omega d\omega d\chi = \\ &= \pi \sum_{\alpha'} P' W' \frac{1}{c^2} \int \int |k|V|P'\omega\alpha'|^2 \sin\omega d\omega d\chi. \end{aligned} \quad (51)$$

Таким образом

$$(k|) = h^{\frac{3}{2}} \frac{(k|V|p^0\alpha^0)}{E - E_k - a + ib}. \quad (52)$$

Заметим, что a и b вещественны и b при этом положительно.

Подставляя в (49) это значение $(k|)$, получаем коэффициент рассеяния:

$$\frac{4\pi^2 h^2 W^0 W' P'}{c^4 P^0} \frac{|(p' \alpha' | V | k)|^2 |(k | V | p^0 \alpha^0)|^2}{(E - E_k - a)^2 + b^2}. \quad (53)$$

Полную эффективную площадь, на которую должна упасть частица для того, чтобы подвергнуться рассеянию по какому-либо направлению, мы можем получить, интегрируя (53) по всем направлениям рассеяния, т. е. по всем направлениям вектора p' , величина которого фиксирована и равна P' и затем суммируя по всем состояниям α' , которые должны быть приняты во внимание, т. е. которые удовлетворяют условию $W' > mc^2$. С помощью формулы (51) это дает результат:

$$\frac{4\pi h^2 W^0}{c^2 P^0} \frac{b |(k | V | p^0 \alpha^0)|^2}{(E - E_k - a)^2 + b^2}. \quad (54)$$

Если мы предположим, что E непрерывно меняется, проходя через значение E_k , то изменение выражений (53) и (54) будет обусловлено главным образом знаменателем $(E - E_k - a)^2 + b^2$, который мал. Если пренебречь зависимостью других множителей от E , то наибольшее рассеяние будет тогда, когда E равно $E_k + a$; когда же E отличается от $E_k + a$ на b , то рассеяние будет равно половине своего максимального значения. Большая величина рассеяния, имеющая место в том случае, когда энергия падающей частицы такова, что E почти равно E_k , приводит к образованию линии поглощения. Середина этой линии смещена на расстояние a от резонансной энергии падающей частицы, т. е. от той энергии, при которой полная энергия как раз равна E_k величина же $2b$ есть то, что иногда называют шириной линии поглощения.

§ 61. ИСПУСКАНИЕ И ПОГЛОЩЕНИЕ.

Для изучения испускания и поглощения необходимо рассмотреть нестационарные состояния системы и применить метод теории возмущений, изложенный в § 52. Желая определить коэффициент спонтанного испускания, мы должны взять начальное состояние, в котором частица уже поглощена и предположить, что

$$(k|) = 1, (p_s|) = 0,$$

и затем определить вероятность того, что в некоторый позднейший момент времени частица будет удаляться от рассеивателя к бесконечности, обладая определенным количеством движения. Применим метод 54-го параграфа. Из результата (28), полученного в этом параграфе, видно, что вероятность испускания частицы в направлении $\omega' \chi'$ при условии перехода рассеивателя в состояние α' , рассчитанная на единицу времени и на единицу изменения углов ω и χ , равна:

$$\frac{2\pi}{\hbar} |(k | V | W' \omega' \chi' \alpha')|^2, \quad (55)$$

разумеется, если только α' таково, что энергия частицы W' определенная из (18), превосходит mc^2 . Для значений α' , не удовлетворяющих этому условию, испускание невозможно. При этом матричные элементы $(k | V | W' \omega' \chi' \alpha')$ должны относиться к такому представлению, в котором W, ω, χ, α диагональны и весовая функция равна единице. Матричные элементы возмущающей энергии V , фигурировавшие в трех предыдущих параграфах, относились к представлению, в котором p_x, p_y, p_z диагональны с весовой функцией 1 или же в котором P, ω, χ диагональны с весовой функцией $P^2 \sin \omega$. Поэтому они относились бы и к такому представлению, в котором W, ω, χ диагональны с весовой функцией $\frac{dP}{dW} P^2 \sin \omega = \frac{WP}{c^2} \sin \omega$. Поэтому матричный элемент $(k | V | W \omega' \chi' \alpha')$ в выражении

(55) в $\left(\frac{WP}{c^2} \sin \omega'\right)^{\frac{1}{2}}$ раз больше, чем наш прежний матричный элемент $(k | V | P' W \omega' \chi' \alpha')$ или $(k | V | p' \alpha')$, так что (55) равно

$$\frac{2\pi}{\hbar} \frac{W' P'}{c^2} \sin \omega' |(k|V|p' \alpha')|^2.$$

Вероятность испускания в единицу телесного угла в единицу времени при условии одновременного перехода рассеивателя в состояние α' поэтому равна

$$\frac{2\pi}{\hbar} \frac{W' P'}{c^2} |(k|V|p' \alpha')|^2. \quad (56)$$

Для того, чтобы получить полную вероятность в единицу времени испускания частицы по любому направлению и при любом конечном состоянии рассеивателя, мы должны проинтегрировать (56) по всем углам ω', χ' и просуммировать по всем состояниям α' , энергия $H_s(\alpha')$ которых такова, что ее сумма с mc^2 меньше, чем E_k . Результат равен как раз $\frac{2b}{\hbar}$, где b определяется формулой (51). Итак существует простое соотношение между полным коэффициентом испускания и полушириной b линии поглощения.

Рассмотрим теперь поглощение. Для этого нужно взять такое начальное состояние, в котором частица наверно не поглощена, но падает на рассеиватель, обладая определенным количеством движения. Это значит, что представитель начального состояния должен иметь вид (41). Определим теперь вероятность того, что частица по истечении времени T уже будет поглощена. Так как наше конечное состояние ψ_k не принадлежит к непрерывному ряду состояний, то можно применить непосредственно результат (28) § 54. Если же взять в качестве представителя начального состояния

$$(p \alpha |)_0 = \delta_{\alpha \alpha'} \delta(p - p^0), (k |)_0 = 0, \quad (57)$$

то рассуждения, произведенные в §§ 52 и 54, равно как и уравнение (25), попрежнему применимы и показывают, что вероятность поглощения частицы за время T с переходом всей системы в состояние ψ_k равна

$$2 |(k|V|p^0 \alpha^0)|^2 \frac{1 - \cos \frac{(E_k - E) T}{\hbar}}{(E_k - E)^2}$$

Это соответствует распределению падающих частиц с плотностью $\frac{1}{h^3}$ [так как в (57) по сравнению с (41) недостает множителя $h^{3/2}$]. Поэтому, когда одна падающая частица пересекает единицу площади в единицу времени, вероятность того, что поглощение произойдет за время T , равна

$$\frac{2 h^3 W^0}{c^2 P^0} |(k|V|p^0 \alpha^0)|^2 \frac{1 - \cos \frac{(E_k - E) T}{\hbar}}{(E_k - E)^2}. \quad (58)$$

Для вычисления коэффициента поглощения нужно рассмотреть случай, когда падающие частицы не все имеют в точности одно и то же значение энергии $W^0 = E - H_s(\alpha^0)$, но что их энергия как-то распределена вокруг необходимой для поглощения величины $E_k - H_s(\alpha^0)$. Если взять такой поток падающих частиц, что на единицу площади и на единицу интервала энергии приходится в единицу времени одна частица, то вероятность того, что после момента времени T частица уже будет поглощена, равна интегралу выражения (58) по E . Этот интеграл может быть вычислен таким же образом, как (26) в § 56; он равен

$$\frac{4 \pi^2 h^3 W^0 T}{c^2 P^0} |(k|V|p^0 \alpha^0)|^2.$$

Поэтому вероятность того, что при потоке падающих частиц, составляющем 1 частицу на единицу площади и на единицу интервала энергии в единицу времени, поглощение произойдет в единицу времени, равна

$$\frac{4 \pi^2 h^3 W^0}{c^2 P^0} |(k|V|p^0 \alpha^0)|^2. \quad (59)$$

Это и есть коэффициент поглощения.

Отметим связь между коэффициентами поглощения и испускания (59) и (56) и вычисленными в предыдущем параграфе коэффициентами резонансного рассеяния. Если поток падающих частиц не состоит из частиц с одинаковой энергией, но составляет одну

частицу на единицу интервала энергии и на единицу площади в единицу времени, то полное количество подвергающихся рассеянию частиц, энергия которых была близка к энергии линии поглощения, равно интегралу выражения (54) по E .

Если пренебречь зависимостью числителя этого выражения от E , то на основании формулы

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{(E - E_k - a)^2 + b^2} dE = \pi$$

мы видим, что этот интеграл должен равняться (59). Итак полное количество рассеянных частиц вблизи линии поглощения равно полному количеству поглощенных. Поэтому мы имеем право рассматривать эти рассеянные частицы как частицы, которые были поглощены, а затем испущены по другому направлению. Далее, число частиц вблизи линии поглощения, рассеиваемых в единицу телесного угла около данного направления p' при условии, что рассеиватель переходит в состояние k' , равно интегралу выражения (53) по E ; таким же образом мы находим, что этот интеграл равен

$$\frac{4\pi^2 h^2 W^0 W' P'}{c^4 P^0} \frac{\pi}{b} |(p' \alpha' | V | k)|^2 |(k | V | p^0 \alpha^0)|^2.$$

Это как раз равно коэффициенту поглощения (59), помноженному на коэффициент испускания (56) и деленному на $\frac{2b}{\hbar}$, т. е. на полный коэффициент испускания.

Это согласуется с той точкой зрения, согласно которой частицы, претерпевшие резонансное рассеяние, были поглощены и испущены вновь; согласно этой точке зрения отношение числа частиц, испущенных вновь в единицу телесного угла около заданного направления, к полному числу поглощенных частиц будет как раз равно частному от деления коэффициента испускания по этому направлению на полный коэффициент испускания, если только процессы поглощения и испускания управляются независимо друг от друга своими особыми законами вероятности.

WWW.NIX.RU

XI. СИСТЕМЫ, СОСТОЯЩИЕ ИЗ ОДИНАКОВЫХ ЧАСТИЦ.

§ 62. СИММЕТРИЧЕСКИЕ И АНТИСИММЕТРИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ.

Если изучаемая в атомной физике система состоит из нескольких одинаковых частиц, например из нескольких электронов, то эти частицы абсолютно неотличимы друг от друга. Если две из них поменяются местами, то в системе нельзя будет обнаружить ни малейшего изменения. Это обстоятельство приводит к тому, что в квантовой механике возникают некоторые любопытные явления, которым нельзя подыскать параллель в классической теории; эти явления связаны с тем фактом, что в квантовой механике никакими способами невозможно обнаружить на опыте, произошел ли в системе переход, состоящий только в том, что две одинаковые частицы обменялись местами.

Нет сомнения в том, что удовлетворительная теория должна считать два неразличимые на опыте состояния системы одним и тем же состоянием; когда обе одинаковые частицы меняются местами, эта теория должна отрицать, что произошел переход из одного состояния в другое. Мы увидим, что такая теория может быть построена в полном согласии с принципами квантовой механики.

Предположим, что мы имеем дело с системой, состоящей из одинаковых частиц. В качестве динамических переменных мы можем выбрать систему переменных ξ_1 , описывающих первую частицу, аналогичную систему переменных ξ_2 , описывающих вторую частицу, и т. д. и т. д., и наконец систему переменных ξ_n , относящихся n -ой частице. При этом ξ_r и ξ_s будут коммутировать друг с другом, если $r \neq s$. (Могут понадобиться еще и дополнительные динамические переменные, описывающие добавочные части системы, если только в состав этой системы входит кроме n одинаковых частиц что-то еще; но в этой главе мы можем не упоминать явно об этих добавочных переменных.) Функция Гамильтона, описывающая движение системы, может быть выражена в виде функции переменных $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$. Из того факта, что все частицы тождественны, необходимо вытекает, что оператор Гамильтона должен быть симметрической функцией переменных $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$, т. е. что вид этой функции не должен меняться при любой перестановке переменных ξ_r . Это условие сохраняется, каким бы возмущением система ни подвергалась.

Мы можем выбрать такое представление, в котором наблюдаемые q_1, q_2, \dots, q_n диагональны, где q_1 суть значения в момент времени t коммутирующих друг с другом переменных, описывающих первую частицу, q_2 — значения в момент времени t аналогичных переменных, описывающих вторую частицу, и т. д. Кроме того мы можем выбрать фазы этого представления таким образом, чтобы для всех частиц они были одинаковы (это значит, что если, например, некоторый импульс p_1 , описывающий первую частицу, представлен в виде $-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_1}$, то соответствующий импульс p_r , относящийся к частице r , должен быть

представлен в виде $-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_r}$. Выбранное представление таково, что все частицы в нем

совершенно равноправны. Условие, что гамильтонова функция H симметрична по отношению ко всем частицам, может быть при этом заменено условием, что представитель этой функции $(q'_1 q'_2 \dots q'_n | H | q''_1 q''_2 \dots q''_n)$ или, как мы будем писать для краткости, $(q' | H | q'')$, симметричен по отношению ко всем q , т. е. остается неизменным, когда одна и та же перестановка применена ко всем q' и ко всем q'' . Математически это условие может быть записано в виде:

$$(q' | H | q'') = (Pq' | H | Pq''), \quad (1)$$

где P обозначает любую перестановку чисел $1, 2, \dots, n$, а Pq' обозначает ряд чисел, полученный в результате применения этой перестановки к индексам выражения $q'_1 q'_2 \dots q'_n$.

Пусть $(q'_1 q'_2 \dots q'_n |)$ или короче $(q' |)$ будет волновая функция, представляющая любое состояние системы. Она должна удовлетворять волновому уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (q' |) = \int (q' | H | q') dq'' (q'' |). \quad (2)$$

Если применить любую перестановку P к переменным q' в волновой функции $(q' |)$, то получится функция $(Pq' |)$, удовлетворяющая уравнению

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (Pq' |) &= \int (Pq' | H | q'') dq'' (q'' |) = \\ &= \int (Pq' | H | Pq'') dq'' (Pq'' |), \end{aligned}$$

так как значение интеграла не может измениться, как ни переставлять в подинтегральной функции те переменные q'' , по которым производится интегрирование. Применяя равенство (1), получаем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (Pq' |) = \int (q' | H | q'') dq'' (Pq'' |), \quad (3)$$

откуда следует, что функция $(Pq' |)$ представляет решение волнового уравнения (2). Итак, если мы будем производить какие-угодно перестановки переменных в каком-либо решении волнового уравнения, мы будем получать другие решения.

Предположим, что мы имеем дело с состоянием, представитель которого $(q' |)$ является в некоторый определенный момент времени симметрической функцией по отношению ко всем переменным q' , т. е. при любой перестановке P удовлетворяется равенство

$$(q' |) = (Pq' |). \quad (4)$$

Правые части уравнений (2) и (3) в этом случае равны, а потому

$$\frac{\partial}{\partial t} (q' |) = \frac{\partial}{\partial t} (Pq' |).$$

Обе части этого равенства представляют производные по времени от обеих частей равенства (4), а это показывает, что если равенство (4) справедливо в какой-либо один момент времени, то оно же будет справедливо и в момент времени, следующий за первоначальным через бесконечно малый промежуток и т. д., а следовательно оно же будет справедливо и во все моменты времени вообще. Следовательно, если волновая функция была симметрической в начальный момент времени, то она будет всегда оставаться симметрической.

Аналогично этому рассмотрим состояние, представитель которого $(q' |)$ в некоторый определенный момент времени является антисимметрической функцией переменных q' , т. е. $(q'_1 q'_2 \dots q'_n |)$ меняет знак, когда любая пара переменных q' меняется местами. В этом случае мы будем иметь

$$(q' |) = \pm (Pq' |), \quad (5)$$

где берется знак + или -, смотря по тому, будет ли перестановка P четной или нечетной, т. е. смотря по тому, может ли перестановка P быть осуществлена посредством четного или нечетного числа транспозиций. Таким же образом, как раньше, можно показать, что если волновая функция в начальный момент была антисимметрической, то антисимметрической она всегда будет оставаться и впредь.

Произведем каноническое преобразование к такому представлению Q , в котором, как и в первоначальном представлении q , все частицы равноправны. Это значит, что Q_1, Q_2, \dots, Q_n являются системами наблюдаемых, описывающими первую, вторую и т. д. частицы, причем фазы выбраны для всех частиц одинаково. Функция преобразования будет иметь вид

$$\begin{aligned} (Q'_1 Q'_2 \dots Q'_n | q'_1 q'_2 \dots q'_n) &= \\ &= (Q'_1 | q'_1) (Q'_2 | q'_2) \dots (Q'_n | q'_n), \end{aligned} \quad (6)$$

где все множители $(Q'_r | q'_r)$ одинаково зависят от своих переменных Q'_r и q'_r . Если функцию $(Q'_1 Q'_2 \dots Q'_n | q'_1 q'_2 \dots q'_n)$ мы обозначим для краткости $(Q' | q')$, то это последнее условие даст

$$(Q' | q') = (PQ' | Pq'), \quad (7)$$

где P - любая перестановка. Новым представителем какого-либо состояния является функция

$$(Q') = \int (Q' | q') d q' (q'). \quad (8)$$

Отсюда выводим:

$$\begin{aligned} (PQ') &= \int (PQ' | q') d q' (q') = \int (PQ' | Pq') d q' (Pq') = \\ &= \int (Q' | q') d q' (Pq'). \end{aligned} \quad (9)$$

Последнее равенство основано на формуле (7). Если $(q' |)$ есть симметрическая функция, т. е. если равенство (4) справедливо, то правые части равенств (8) и (9) равны друг другу, откуда следует, что $(Q' |) = (PQ' |)$ т. е. и что $(Q' |)$ есть симметрическая функция. Таким же образом доказывается, что если $(q' |)$ есть антисимметрическая функция, то тем же свойством обладает и функция $(Q' |)$. Отсюда следует, что свойство представителя данного состояния быть симметрической или антисимметрической функцией не меняется при каноническом преобразовании. Эта инвариантность, наряду с тем уже доказанным фактом, что если волновая функция была первоначально симметрической или антисимметрической, то такой она останется всегда, показывает, что свойство симметричности или антисимметричности есть свойство самих состояний, а не только свойство их представителей. Поэтому мы имеем право говорить о симметрических или антисимметрических состояниях.

Инвариантность и перманентность симметрических свойств состояний показывает, что в природе могут существовать определенного рода частицы, для которых осуществляются только симметрические или антисимметрические состояния. Имеет ли это место, нельзя узнать на основании общих теоретических соображений; для решения этого вопроса необходимо обратиться к установленным на опыте специальным фактам, относящимся к данному роду частиц. В случае фотонов вопрос может быть решен с помощью формулы излучения Планка. Только тогда, когда мы делаем допущение, что в системе, состоящей из фотонов, осуществляются одни лишь симметрические состояния, мы получаем статистическую механику, приводящую в случае статистического равновесия к закону излучения Планка. Такая статистическая механика получила название статистики Эйнштейна-Бозе, так как она была впервые введена Бозе и Эйнштейном еще до появления современной квантовой механики.

В случае электронов, мы должны воспользоваться тем фактом, что если мы будем приближенно считать каждый электрон в атоме движущимся по своей собственной «орбите» (т. е. описываемым своей собственной волновой функцией, зависящей только от его собственных переменных), то два электрона никогда не находятся на одной и той же орбите. Об этом факте, известном под названием принципа запрета Паули, можно заключить на основании всей совокупности опытных данных, относящихся к строению атома. Посмотрим, каким образом можно согласовать этот факт с нашей теорией. Если волновые функции, изображающие различные орбиты, суть

$$(q' | \alpha_1), (q' | \alpha_2), \dots, (q' | \alpha_n),$$

то волновой функцией, представляющей состояние всего атома, будет произведение

$$(q'_1 | \alpha_1) (q'_2 | \alpha_2) \dots (q'_n | \alpha_n) = (q' | \alpha) \quad (10)$$

[обозначение $(q' | \alpha)$ введено для краткости]. Применяя к $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ в выражении (10) различные перестановки, мы получим разные другие волновые функции, изображающие то же самое распределение электронов по различным орбитам. Всего будет $n!$ таких волновых функций вида $(q' | P\alpha)$. Любая линейная комбинация этих волновых функций будет также изображать то же самое распределение электронов. Одной из возможных линейных комбинаций будет сумма

$$\sum_p (q' | P\alpha), \quad (11)$$

которая симметрична по отношению к переменным q' . В числе линейных комбинаций будет такая сумма

$$\sum_p \pm (q' | P\alpha), \quad (12)$$

где берется знак + или - смотря по тому, является ли P четной или нечетной перестановкой; линейная комбинация (12) будет уже антисимметрической функцией по отношению к тем же переменным. Антисимметрическая волновая функция (12) обладает тем свойством, что она

тождественно обращается в нуль, если две величины α одинаковы.¹ Поэтому, если мы допустим, что для электронов осуществляются только антисимметрические состояния, то непосредственным следствием будет отсутствие таких состояний, в которых два электрона движутся по одной и той же орбите, а это и есть принцип Паули. Такое допущение является единственным возможным допущением, приводящим к принципу Паули.

Таким образом мы видим, что в случае фотонов следует брать симметрические, а в случае электронов - антисимметрические состояния. Это есть частный случай эмпирического правила, которое повидимому соблюдается без всяких исключений, а именно — что осуществляются только симметрические или только антисимметрические состояния, смотря по тому, обладают ли рассматриваемые частицы зарядом, превосходящим заряд электрона в четное или в нечетное число раз. Если для рассматриваемого рода частиц допускаются только симметрические или только антисимметрические состояния, то теория больше не позволяет различать два состояния, которые отличаются друг от друга только тем, что частицы поменялись местами, и затруднения, упомянутые в начале этого параграфа, исчезают.

§ 63. ПЕРЕСТАНОВКИ КАК НАБЛЮДАЕМЫЕ.

Построим теперь общую теорию систем, содержащих n одинаковых частиц, в том случае, когда позволены состояния с любой степенью симметрии, т. е. когда осуществляются не только симметрические и не только антисимметрические состояния. Состояние системы, вообще говоря, не только не обязано быть симметрическим или антисимметрическим, но также (при $n > 2$) не должно быть линейной комбинацией симметрических и антисимметрических состояний.

Пусть P будет любая перестановка, а ψ - любой ψ -символ; можно дать совершенно определенный смысл ψ -символу $P\psi$, получаемому в результате действия перестановки P на символ ψ . Этот смысл таков: под $P\psi$ мы подразумеваем ψ -символ, представителем которого является $(Pq' |)$, т. е. результат действия перестановки P на представитель $(q' |)$ символа- ψ . Определенный таким образом ψ -символ $P\psi$, как это явствует из формулы (9), не зависит от того, каким представлением мы пользуемся для его определения. Далее, операция посредством которой $P\psi$ получается из ψ , есть операция линейная. Поэтому мы можем считать $P\psi$ произведением наблюдаемой P и ψ -символа ψ , иными словами—мы можем считать перестановку P наблюдаемой.

Существует $n!$ перестановок, каждую из которых мы можем считать наблюдаемой. Одна из них, например P_1 , есть тождественная перестановка, которая равна единице. Если ψ обозначает симметрическое состояние, то равенство

$$P\psi = \psi \quad (13)$$

будет верно для любой перестановки P ; это значит, что симметрическое ψ будет собственным ψ -символом для всякой перестановки, причем соответствующее собственное значение равно единице. Таким же образом любое антисимметрическое ψ будет собственным ψ -символом любой перестановки, причем соответствующее собственное значение будет равно +1 или -1 смотря по тому, является ли перестановка четной или нечетной.

Произведение любых двух перестановок есть также перестановка; поэтому любая функция перестановок может быть выражена в виде линейной комбинации всех $n!$ перестановок.

Любой перестановке P соответствует обратная перестановка P^{-1} , удовлетворяющая условию

$$PP^{-1} = P^{-1}P = P_1 = 1$$

¹ Если мы будем писать $(q' | \alpha)$ в развернутом виде [формула (10)], то сумма (12) сможет быть записана в виде определителя:

$$\begin{vmatrix} (q'_1 | \alpha_1) & (q'_1 | \alpha_2) & \dots & (q'_1 | \alpha_n) \\ (q'_2 | \alpha_1) & (q'_2 | \alpha_2) & \dots & (q'_2 | \alpha_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (q'_n | \alpha_1) & (q'_n | \alpha_2) & \dots & (q'_n | \alpha_n) \end{vmatrix},$$

о чем нетрудно догадаться, если вспомнить правило, по которому приписывается знак + или - различным произведениям по n элементов в каждом, из которых складывается определитель. Оба утверждения, сделанные в тексте, а именно - что функция (12) антисимметрична и что она тождественно исчезает при равенстве различных α , становится очевидным следствиями элементарных свойств определителей.

Перестановка P , как и всякая другая наблюдаемая, может быть представлена матрицей. Ее q -представитель $(q' | P | q'')$ будет удовлетворять условию

$$\int (q' | P | q'') dq'' (q' |) = (Pq' |),$$

откуда

$$\begin{aligned} (q' | P | q'') &= \delta (Pq' - q'') = \\ &= \delta (q' - P^{-1}q''). \end{aligned} \quad (14) \quad (15)$$

Функция δ в равенстве (14) или (15) представляет произведение n множителей типа $\delta(\{Pq'\}_r - q''_r)$ или $\delta(q'_r - \{P^{-1}q''\}_r)$. Комплексно-сопряженной наблюдаемой по отношению к P будет наблюдаемая \bar{P} , представленная матрицей

$$\begin{aligned} (q' | \bar{P} | q'') &= (\overline{q'' | P | q'}) = \delta (q'' - P^{-1}q') = \\ &= (q' | P^{-1} | q'') \end{aligned}$$

(см. формулы 15 и 14). Отсюда следует:

$$\bar{P} = P^{-1}. \quad (16)$$

Поэтому перестановки, вообще говоря, не являются вещественными наблюдаемыми, поскольку комплексно-сопряженные наблюдаемые равны не им самим, а обратным перестановкам.

Всякая перестановка чисел $1, 2, 3, \dots, n$ может быть представлена в виде произведения конечного числа циклов; так например при $n=8$ символ

$$P_a = (143) (27) (58) (6) \quad (17)$$

обозначает перестановку, которая получается таким образом: всякое число, стоящее в скобке, заменяется следующим за ним числом, а последнее число в скобке заменяется первым числом в той же скобке. P_a есть перестановка, превращающая 12345678 в 47138625 . «Тип» перестановки определяется теми числами, на которые разбивается число элементов по скобкам, т. е. числами элементов во всех скобках. Так например тип перестановки P_a определяется разбивкой числа 8 на числа $3+2+2+1$. Перестановки одного и того же типа, т. е. соответствующие одинаковой разбивке числа n , мы называем подобными. Так например перестановка P_a (формула 17) подобна перестановке

$$P_b = (871) (35) (46) (2). \quad (18)$$

Всевозможные $n!$ перестановок n элементов могут быть разбиты на системы подобных друг другу перестановок; каждая такая система называется классом. Перестановка $P_1=1$ сама по себе образует целый класс. Всякая перестановка подобна своей обратной.

Если две перестановки P_a и P_b подобны, то любой из этих двух символов, например P_b , может быть получен посредством применения некоторой перестановки P к другому символу, т. е. к P_a . Так например в случае формул (17) и (18) под перестановкой P подразумевается та, которая превращает 14327586 в 87135462 , т. е. перестановка $P=(18623)(475)$.

Между P_a и P_b тогда должна существовать зависимость

$$P_b = PP_aP^{-1}. \quad (19)$$

Для того, чтобы проверить это утверждение, заметим, что произведение $P_a \psi$ символа P_a на символ ψ превратится в $P_b \psi$ если применить перестановку P к множителю P_a но не к ψ . Если же мы помножим все произведение $P_a \psi$ на P слева, то тем самым перестановка P будет применена и к множителю P_a и к множителю ψ ; для того, чтобы в результате все-таки получилось $P_b \psi$, мы должны предварительно помножить ψ на P^{-1} слева, а это значит, что $PP_aP^{-1}\psi$ равно $P_b \psi$. Другое доказательство основывается на том замечании, что когда перестановка P применяется к представителю $\delta(P^a q' - q'')$ перестановки P_a , то в результате получается $\delta(PP_a q' - q'')$ или $\delta(PP_a P^{-1} q' - q'')$, а это и есть представитель перестановки $PP_a P^{-1}$.

Ур-ие (19) есть общая формула, имеющая место, когда P_a и P_b подобны. Конечно, P не определяется однозначно заданием перестановок P_a и P_b , но из существования перестановки P , удовлетворяющей ур-ию (19), следует, что перестановки P_a и P_b подобны.¹

§64. ПЕРЕСТАНОВКИ КАК КОНСТАНТЫ ДВИЖЕНИЯ.

Перестановку P можно рассматривать как наблюдаемую в каждый момент времени; поэтому ее можно считать механической переменной. Посмотрим, как P меняется со временем. Тот факт, что функция Гамильтона симметрична, сразу приводит к уравнению

$$PH = HP, \quad (20)$$

что можно проверить посредством рассуждений подобных тем, которые были применены к уравнению (19),¹ или же посредством применения матриц. А именно из (14) следует:

$$(q' | PH | q'') = \int \delta(Pq' - q'') dq'' (q'' | H | q'') = (Pq' | H | q''),$$

а из (15):

$$(q' | HP | q'') = \int (q' | H | q'') dq'' \delta(q'' - P^{-1}q'') = (q' | H | P^{-1}q'').$$

Отсюда, с помощью (1), можно заключить, что правые стороны последних двух равенств равны. Ур-ие (20) показывает, что каждая перестановка есть константа движения. Перестановки P остаются постоянными также и в том случае, когда система подвергается любому возмущению, если только и возмущающий потенциал, прибавляемый к функции Гамильтона, будет симметрической функцией. Итак постоянство всех P есть абсолютное постоянство.

С какой бы системой в квантовой механике мы ни имели дело, если только мы нашли константу движения α , то мы знаем, что если в некотором состоянии α первоначально имела числовое значение α' , то она всегда будет иметь в этом состоянии то же самое значение, так что мы можем привести в соответствие различным состояниям различные значения α' и получить таким образом классификацию состояний. Эта процедура однако не столь непосредственна, когда мы имеем несколько констант движения α , которые не коммутируют друг с другом (в случае перестановок P это так и есть), так как в этом случае не существует состояний, в которых все α одновременно имеют числовые значения. Рассмотрим сперва случай системы, в которой функция Гамильтона не содержит времени явно. Существование некоммутирующих друг с другом констант движения α является в этом случае признаком того, что система является вырожденной. Мы должны поискать такую β , которая была бы функцией всех α и имела одно и то же значение β' во всех состояниях, принадлежащих одному и тому же уровню энергии H' , так что с помощью β возможно классифицировать уровни энергии системы. Условие, которым определяется β может быть выражено тем, что β должна быть функцией от H (в смысле общего определения функции наблюдаемых величин), так что β должна коммутировать со всякой наблюдаемой, которая коммутирует с H , т. е. со всякой константой движения. Если кроме различных α нет констант движения или если все α образуют систему, коммутирующую со всеми другими независимыми константами движения, то наша задача сводится к нахождению такой функции β наблюдаемых α , которая коммутировала бы со всеми α . Тогда мы сможем каждому уровню энергии системы привести в соответствие определенную числовую величину β'

¹ Всякий цикл, состоящий из m элементов, может быть записан на m различных ладов, так как все равно, с какого элемента цикла начать, лишь бы они следовали друг за другом в определенном порядке. Поэтому, если в символе P_a заменить одно из m возможных написаний цикла, состоящего из m элементов, другим, а в символе P_b оставить все в прежнем виде, то перестановка P будет уже другая. Отсюда видно, что P не определяется однозначно. Далее, если даны две перестановки P' и P'' , связанные равенством $P'' = PP'P^{-1}$, и если перестановку P' написать в виде произведения циклов P_a , а через P_b обозначить результат применения перестановки P к символу P_a , то будет $P_b = PP'P^{-1} = P''$ и значит P' и P'' действительно подобны друг другу, что и утверждается в тексте.

¹ Символ $PH\psi$ есть результат применения перестановки P к произведению $H\psi$; для этого нужно применить P и к H и к ψ и потом PH помножить на $P\psi$. Но $PH=H$; отсюда $PH\psi$.

наблюдаемой β . Если возможно найти несколько таких наблюдаемых β , то все они должны коммутировать друг с другом, так что мы сможем приписать им всем одновременно числовые значения и таким образом получить полную классификацию уровней энергии. Если же функция Гамильтона содержит время явно, то невозможно говорить об уровнях энергии, но все же β дадут полезную классификацию состояний.

Этому методу мы и последуем, имея дело с перестановками P . Мы должны найти такую функцию χ , всех P , что $P\chi P^{-1} = \chi$ для любого P . Очевидно, что в качестве χ можно взять $\sum P_c$, сумму всех перестановок определенного класса c , т. е. сумму всевозможных перестановок подобных друг другу, так как сумма $\sum PP_c P^{-1}$ должна состоять из тех же самых перестановок, сложенных в другом порядке. Для каждого класса можно построить одну такую функцию χ . Других независимых χ быть не может, так как любая функция перестановок P может быть выражена в виде линейной функции этих перестановок с постоянными коэффициентами, а для того, чтобы она коммутировала со всеми P , необходимо, чтобы коэффициенты при подобных перестановках в ней были одинаковы.¹ Таким образом мы получаем все χ , которые могут быть использованы для классификации состояний. Удобнее определить каждую χ не в виде суммы всех перестановок данного класса, а в виде арифметического среднего, т. е.

$$\chi_c = n_c^{-1} \sum P_c,$$

где n_c есть число перестановок P в классе c . Другое выражение для χ_c есть

$$\chi_c = n!^{-1} \sum_p PP_c P^{-1}, \quad (21)$$

где суммирование распространено на все $n!$ перестановок P . Каждой перестановке P соответствует одно χ - назовем его $\chi(P)$, - равное арифметическому среднему всех перестановок, подобных перестановке P . Одно из χ есть $\chi(P_1) = 1$

Полученные таким образом константы движения $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_m$ будут иметь определенные численные значения в каждом стационарном состоянии системы, если функция Гамильтона не содержит времени явно; но даже и в самом общем случае они могут быть употреблены для классификации состояний в том смысле, что каждой возможной системе численных значений $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi'_m$ наблюдаемых χ соответствует некоторая система состояний. Так как все χ являются абсолютными константами движения, то все эти системы состояний будут изолированными, т. е. переходы из состояния одной системы в состояние другой системы никогда не будут происходить.

Количество возможных систем значений χ' наблюдаемых χ ограничено тем обстоятельством, что между χ существуют алгебраические соотношения. Произведение типа $\chi_p \chi_q$ двух χ может быть, разумеется, выражено в виде линейной функции перестановок P , а так как оно коммутирует со всеми P , то оно должно быть выражено в виде линейной функции χ :

$$\chi_p \chi_q = a_1 \chi_1 + a_2 \chi_2 + \dots + a_m \chi_m, \quad (22)$$

где все a суть числа. Все численные значения χ' наблюдаемых χ должны быть собственными значениями этих наблюдаемых, вследствие чего и они удовлетворяют тем же самым алгебраическим уравнениям. Каждому решению χ' этих уравнений соответствует изолированная система состояний. Одним из решений очевидно является $\chi'_p = 1$ для всех χ_p , и это дает систему симметрических состояний, удовлетворяющих ур-ию (13). Другое очевидное решение есть $\chi'_p = \pm 1$, где знак + или знак - берется смотря по тому, будут ли перестановки в классе P четными или нечетными; это дает систему антисимметрических состояний. Другие решения в каждом частном случае могут быть найдены обычными

¹ Это легко может быть выведено из того факта, что все перестановки линейно независимы друг от друга

алгебраическими способами, так как можно вычислить коэффициенты α в формуле (22) непосредственно из соображений о типе тех перестановок, к которым относятся соответствующие χ . Каждое решение отличается лишь некоторым определенным множителем от того, что в теории групп называется характером группы перестановок. Все χ являются вещественными наблюдаемыми, так как всякая перестановка P подобна своей комплексно-сопряженной P^{-1} и вместе с нею входит в виде слагаемого в определение χ ; поэтому все χ' должны быть вещественными числами.

Количество возможных решений уравнений (22) определить легко, так как оно должно равняться количеству различных собственных значений произвольной функции B наблюдаемых χ . С помощью уравнений типа (22) можно выразить B в виде линейной функции всех χ :

$$B = b_1 \chi_1 + b_2 \chi_2 + \dots + b_m \chi_m. \quad (23)$$

Таким же образом можно выразить в виде линейных функций от χ и все величины B^2, B^3, \dots, B^m . Из этих m уравнений и из уравнения $\chi(P_1) = 1$ мы можем исключить m неизвестных $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_m$, в результате чего остается алгебраическое уравнение степени m относительно B :

$$B^m + c_1 B^{m-1} + c_2 B^{m-2} + \dots + c_m = 0.$$

Все m решений этого уравнения дадут m возможных собственных значений B , каждое из которых, согласно (23), будет линейной функцией от b_1, b_2, \dots, b_m с коэффициентами, представляющими возможную систему значений $\chi'_1, \chi'_2, \dots, \chi'_m$. Все таким образом полученные системы значений χ' должны быть различны, так как, если бы было меньше чем m возможных систем значений χ' , то существовала бы такая линейная функция наблюдаемых χ , все собственные значения, которой исчезали бы, откуда следовало бы, что исчезает и сама функция и что наблюдаемые χ следовательно не являются линейно независимыми. Таким образом число возможных систем численных значений χ в точности равно m , т. е. числу всех классов перестановок или же числу способов представить n в виде суммы положительных целых чисел. Это число и есть число изолированных систем состояний.

Свойства перестановок P , которые не являются в то же время свойствами χ , будут только описывать вырождение состояний, если функция Гамильтона рассматриваемой механической системы не содержит времени явно. Если ψ обозначает некоторое стационарное состояние, то $f(P)\psi$, где $f(P)$ есть любая функция перестановок, будет обозначать другое состояние, соответствующее тому же самому уровню энергии, если только $f(P)\psi$ не исчезает тождественно. Развертывая $f(P)\psi$ в линейную комбинацию членов полной системы независимых стационарных состояний, относящихся к тому же уровню энергии, мы получим представление $f(P)$ и в частности представление каждого P . Таким образом мы видим, что если мы получим матричное представление всех P при условии, что каждое χ имеет определенное численное значение χ' , то число строчек и столбцов этих двух матриц будет равно степени вырождения состояний (т. е. числу независимых состояний, соответствующих данному уровню энергии) в данной изолированной системе χ' . Это вырождение является существенным; его нельзя устранить посредством возмущения симметричного по отношению ко всем одинаковым частицам. Состояния ψ и $f(P)\psi$ неразличимы опытным путем, так как каждое наблюдение, которое может быть на самом деле произведено, должно обязательно состоять в измерении какой-либо наблюдаемой, которая симметрична по отношению ко всем частицам и поэтому коммутирует с $f(P)$. Это замечание остается в силе и тогда, когда функция Гамильтона содержит время явно.

§ 65. ВЫЧИСЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ.

Применяя изложенный в §51 метод теории возмущений, вычислим в первом приближении уровни энергии в том случае, когда функция Гамильтона не содержит времени явно. Мы

предположим, что в невозмущенных состояниях каждая из одинаковых частиц имеет свою собственную «орбиту», т. е. свою собственную волновую функцию $(q' | \alpha)$, содержащую координаты q' только этой частицы. Всего у нас будет n орбит, по числу частиц, и мы предположим пока, что все эти орбиты различны; обозначим их $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$. Волновая функция, представляющая невозмущенное состояние всей системы, будет произведением (10). Применяя к $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ любую перестановку P_a , мы получим другую волновую функцию

$$(q'_1 | \alpha_r) (q'_2 | \alpha_s) \dots (q'_n | \alpha_i) = (q' | P_a \alpha), \quad (24)$$

представляющую другое невозмущенное состояние, с той же энергией. Таким образом всего будет $n!$ невозмущенных состояний, если сделать допущение, что нет других причин вырождения. Следуя методу, изложенному в §51 для того частного случая, когда невозмущенная система вырождена, мы должны рассмотреть те элементы матрицы возмущающей энергии V , которые соответствуют состояниям с одинаковой энергией, т. е. элементы типа $(P_a \alpha | V | P_b \alpha)$, где P_a и P_b две перестановки. Эти элементы образуют матрицу с $n!$ строками и $n!$ столбцами; собственные значения этой матрицы в первом приближении представляют поправки к энергетическим уровням.

Нам необходимо теперь различать два рода перестановок: переустановки q и перестановки α . Существенное различие между ними лучше всего уясняется из следующего рассуждения. Рассмотрим какую-нибудь перестановку, например транспозицию чисел 2 и 3. Эту транспозицию можно толковать или как обмен предметами № 2 и № 3, или как обмен предметами, которые находятся на местах № 2 и № 3. Эти две операции, вообще говоря, приводят к различным результатам. До сих пор мы понимали каждую перестановку именно в первом смысле; переставляемыми предметами были переменные q_1, q_2, \dots, q_n в волновой функции, являющейся представителем состояния системы. В таком смысле можно применить перестановку к любой функции переменных q . Перестановка же во втором понимании этого слова имеет смысл только в том случае, если она применяется к такой функции переменных q , в которой каждое q имеет определенное место. Не всякая функция удовлетворяет этому условию, но любая из $n!$ функций типа (24) ему удовлетворяет, так как место, занимаемое каждым q , определяется тем α , которое вместе с ним стоит в скобке. Любая перестановка, примененная к переменным q , находящимся на данных местах, производит то же самое действие, как обратная перестановка, примененная к α .¹ Перестановка переменных q (т. е. перестановка в первом смысле слова) может считаться обыкновенной наблюдаемой, так как она может быть применена к любой функции переменных q , а следовательно к представителю любого ψ -символа. С другой стороны перестановка мест, занимаемых переменным q , или перестановка различных α может считаться наблюдаемой только в ограниченном смысле слова, так как она может быть помножена лишь на такой ψ -символ, представитель которого есть одна из $n!$ волновых функций (24) или линейная комбинация этих функций. Такие перестановки букв $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, являющиеся наблюдаемыми в этом ограниченном смысле слова, мы будем обозначать символами P^2 .

Можно построить алгебраические функции наблюдаемых P^2 , которые тоже будут наблюдаемыми в этом ограниченном смысле. В частности можно построить $\chi(P_a^\alpha)$, т. е. арифметическое среднее всех P^2 , подобных данному P_a . При этом $\chi(P_a^\alpha)$ должна равняться $\chi(P_a)$ т. е. арифметическому среднему подобных перестановок переменных q , так как полная совокупность перестановок данного типа очевидно должна быть той же самой, независимо от того, применяются ли перестановки к предметам q или к местам α .

Если каким-либо произвольным способом установлено одно-одно-значное соответствие между q и α [это и происходит автоматически, когда мы нумеруем, как в

¹ Легко видеть, что действие каждой перестановки, примененной к q , находящимся на данных местах, уничтожается последующей такой же перестановкой, примененной к α . Если вслед за этим мы применим к α обратную перестановку, то получим прежнее действие, откуда и следует сделанное в тексте утверждение.

формуле (10), все q и все α номерами $1, 2, 3, \dots, n$], то можно придать смысл любой перестановке α , если только дана такая же перестановка q . Этот смысл определяется тем, что $(q | \alpha) = (Pq | P\alpha)$.

Применим перестановку P_a к α в обеих частях этого равенства, что дает нам

$$(q | P_a \alpha) = (Pq | P_a P \alpha). \quad (25)$$

Это уравнение указывает на связь между перестановками q и перестановками α , произведенными в волновой функции (24).

Матрица $(q | \alpha) = (Pq | P\alpha)$, которую нам предстоит теперь изучить, может быть получена из $(q' | V | q'')$ посредством канонического преобразования, в котором функциями преобразования являются волновые функции $(q' | P_a \alpha)$ (формула 24) и их комплексно-сопряженные $(P_a \alpha | q')$. если только эти функции надлежащим образом нормированы.

Итак:

$$(P_a \alpha | V | P_b \alpha) = \int \int (P_a \alpha | q') dq' (q' | V | q'') dq'' (q'' | P_b \alpha). \quad (26)$$

Для любого P будет:

$$(P_a P \alpha | V | P_b P \alpha) = \int \int (P_a P \alpha | q') dq' (q' | V | q'') dq'' (q'' | P_b P \alpha)$$

и, когда мы применим ту же перестановку P к переменным q' и q'' , по которым производится интегрирование,

$$= \int \int (P_a P \alpha | Pq') dq' (Pq' | V | Pq'') dq'' (Pq'' | P_b P \alpha).$$

С помощью формулы (25) это дает:

$$(P_a P \alpha | V | P_b P \alpha) = \int \int (P_a \alpha | q') dq' (Pq' | V | Pq'') dq'' (q'' | P_b \alpha). \quad (27)$$

Если возмущение V симметрично по отношению ко всем частицам, мы получаем [наподобие формулы (1)]:

$$(q' | V | q'') = (Pq' | V | Pq''),$$

откуда, сравнивая (26) и (27), находим:

$$(P_a \alpha | V | P_b \alpha) = (P_a P \alpha | V | P_b P \alpha). \quad (28)$$

Обозначим для сокращения $(P \alpha | V | \alpha) = V_p$. Тогда, полагая в формуле (28) $P = P_b^{-1}$, мы получаем:

$$(P_a \alpha | V | P_b \alpha) = (P_a P_b^{-1} | V | \alpha) = V_{P_a P_b^{-1}}.$$

Таким образом матричный элемент $(P_a \alpha | V | P_b \alpha)$ а зависит только от произведения перестановок $P_a P_b^{-1}$, откуда следует, что из всех $(n!)^2$ элементов матрицы имеется только $n!$ различных. Коэффициент при V в этой матрице есть матрица, элементы которой равны нулю или 1, причем 1 появляется там, где

$$(P_a \alpha | V | P_b \alpha) = V_p,$$

т. е. там, где $P_a P_b^{-1} = P$. Но эта последняя матрица, будучи помножена на любую волновую функцию $(q | P_b \alpha)$, дает $(q | P_a \alpha)$, где $P_a P_b^{-1} = P$, т. е. дает $(q | P P_b \alpha)$, откуда следует, она как раз является представителем наблюдаемой P^2 (перестановки P , примененной к α). Поэтому вся матрица $(P_a \alpha | V | P_b \alpha)$ равна матрице, представляющей $\sum_p V_p P^2$, где суммирование производится по всем $n!$ перестановкам P , и мы можем положить

$$V = \sum_p V_p P^2. \quad (29)$$

Эта формула показывает, что возмущающая энергия V равна линейной функции наблюдаемых P^2 с численными коэффициентами V_p . Это, разумеется, не точная, а приближенная формула, так как в ней пренебрегается теми матричными элементами V , которые относятся к парам различных уровней энергии невозмущенной системы. Но в первом приближении формулу (29) можно применить к вычислению уровней энергии, и она оказывается очень удобной для этого, так как с выражением $\sum_p V_p P^2$ легко иметь дело.

Следует помнить, что это выражение есть наблюдаемая только в вышеупомянутом ограниченном смысле слова, но и этот ограниченный смысл достаточно широк для того, чтобы равенство (29) было справедливым, если пренебречь матричными элементами V , относящимися к парам различных уровней энергии невозмущенной системы.

В качестве примера применения формулы (29) определим среднюю энергию всех тех состояний, возникающих из данного состояния невозмущенной системы, которые образуют изолированную систему состояний. Для этого нужно вычислить арифметическое среднее собственных значений V , когда χ имеют определенные численные значения χ' . Арифметическое среднее собственных значений P_a^α при любом P^2 равно арифметическому среднему собственных значений $P^\alpha P_a^\alpha P^{\alpha-1}$, а следовательно и арифметическому среднему собственных значений $n!^{-1} \sum_{p^\alpha} P^\alpha P_a^\alpha P^{\alpha-1}$, т. е. $\chi'(P_a^\alpha)$ или $\chi'(P_a)$. Поэтому среднее арифметическое собственных значений V есть $\sum_p V_p \chi'(P)$. Такой же метод можно применить и к вычислению среднего арифметического собственных значений любой функции от V , причем для вычисления среднего нужно только заменить каждое P^α через $\chi(P)$.

Количество уровней энергии в изолированной системе состояний $\chi = \chi'$, возникающих из данного состояния невозмущенной системы, равно количеству собственных значений (29), совместимых с уравнениями $\chi = \chi'$. Оно равно количеству строк и столбцов в представлении перестановок P , где все χ равны χ' , а это и есть, как явствует из конца предыдущего параграфа, степень вырождения состояний в этой изолированной системе состояний.

Легко внести в теорию необходимые изменения в том случае, когда орбиты $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ невозмущенной системы не все различны. Предположим например, что α_1 , и α_2 одинаковы. Тогда перестановка P_{12}^α , производящая обмен α_1 , и α_2 , должна равняться единице. Смысл имеют только те функции от P^α которые коммутируют с P_{12}^α . Этого однако для нас достаточно для того, чтобы суметь проделать такие же рассуждения, как раньше, и придти к результату такого же вида, как (29). При этом член суммы (29), содержащий перестановку P_{12}^α , уже не входит в выражение этой суммы, так как его можно слить с членом, содержащим тождественную перестановку P_1^α . Из остающихся членов любые две перестановки P_a^α и P_b^α должны иметь общий коэффициент, если одна из них может быть получена из другой посредством транспозиции α_1 и α_2 . В результате этого $\sum_p V_p P^2$ будет коммутировать с P_{12}^α и таким образом будет иметь смысл. Условие $P_{12}^\alpha = 1$ будет накладывать ограничения на возможные числовые значения χ' , которые могут принимать χ , и тем самым уменьшит число характеров.

§ 66. ПРИМЕНЕНИЕ К ЭЛЕКТРОНАМ.

Рассмотрим теперь тот случай, когда одинаковыми частицами, о которых идет речь, являются электроны. В этом случае, согласно принципу Паули (см. § 62), нужно рассматривать лишь антисимметрические состояния. Необходимо теперь принять во внимание свойства электрона, связанные со спином. Действие спина на движение электрона в электромагнитном поле не очень велико. Появятся добавочные силы, действующие на электрон и зависящие от его магнитного момента, что потребует введения дополнительных членов в выражение функции Гамильтона. Связанный со спином момент количества движения не будет иметь непосредственного влияния на движение электрона, но он будет играть роль в тех случаях, когда имеются силы, стремящиеся повернуть магнитный момент: ведь магнитный момент; и момент количества движения электрона обязаны всегда иметь одно и то же направление. Эти явления однако очень малы, такого же порядка малости, как релятивистское изменение массы со скоростью; поэтому нет нужды вводить их в нерелятивистскую теорию. Важность спина заключается не в этих его маленьких влияниях на движение электрона, а в том факте, что он заставляет приписать электрону возможность находиться в двух состояниях,

соответствующих двум возможным значениям слагающей спина по любому выбранному направлению, вследствие чего число независимых состояний электрона, движущегося в заданном поле, удваивается. В соединении с принципом Паули этот факт приводит к чрезвычайно важным следствиям.

Выберем такое представление, в котором диагональными наблюдаемыми q_r , описывающими электрон r , являются три его декартовы координаты x, y, z и слагающая σ_z его вектора спина σ , введенного в § 43, на ось z -ов. Представителем состояния будет

$$(x_1, x_2, \dots, x_n, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n |) = (x \sigma |), \quad (30)$$

где вместо x, y, z написана только одна буква x и опущен значок z при всех σ_z , входящих в это выражение. Принцип Паули требует, чтобы выражение (30) было антисимметрично по отношению к x и σ вместе, т. е. чтобы применение одной и той же перестановки к x_1, x_2, \dots, x_n и к $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ оставляло (30) неизменным или же меняло знак смотря по тому, будет ли эта перестановка четной или нечетной. Символически можно писать:

$$(x, \sigma |) = \pm (Px, P\sigma |), \quad (31)$$

где P есть какая-либо перестановка. Таким образом, даже, если мы пренебрежем спиновыми силами в функции Гамильтона, нам придется принять во внимание переменные спина для того, чтобы определить, какие состояния разрешаются принципом Паули.

Непосредственное применение теории, изложенной в трех предыдущих параграфах, к электронам не дает ничего интересного, так как все дозволенные состояния должны быть собственными состояниями любой перестановки, принадлежащими собственным значениям ± 1 . Мы можем однако рассматривать и такие перестановки P , которые действуют только на переменные x в выражении представителей состояний, и применять нашу теорию к этим перестановкам. Они также могут рассматриваться как наблюдаемые. Но они кроме того являются константами движения, если в функции Гамильтона мы пренебрежем членами, соответствующими спиновым силам, и будем вследствие этого рассматривать функцию Гамильтона, не содержащую спиновых наблюдаемых σ . Вместе с такими перестановками P мы можем ввести и их χ (средние арифметические всех P , входящих в данный класс) и утверждать, что каждой возможной системе значений χ' этих наблюдаемых χ соответствует одна изолированная система состояний. Таким образом изолированные системы состояний будут существовать в случае систем, содержащих несколько электронов, даже и тогда, когда мы ограничимся рассмотрением только тех состояний, которые удовлетворяют принципу Паули. Эта «изолированность» является, конечно, приближенной, так как все χ можно считать постоянными только в том случае, если мы пренебрегаем спиновыми силами. В действительности всегда будет маленькая вероятность перехода из одной изолированной системы состояний в другую изолированную систему состояний.

Из (31) мы находим:

$$PP^\sigma = \pm 1, \quad (32)$$

где P обозначает любую перестановку, действующую на переменные x в выражении представителя состояния, а P^σ — такую же самую перестановку, действующую на переменные σ . Таким образом между P и P^σ существует простое соотношение, обозначающее, что вместо изучения наблюдаемых P мы можем получить все нужные нам результаты, например характеры χ' , изучая наблюдаемые P^σ . Изучать P^σ гораздо легче, чем P , так как переменные σ в волновой функции могут принимать только значения $+1$ и -1 ($+1$ и -1 являются собственными числами каждого σ_z). Вследствие этого имеется меньше характеров χ' в случае группы перестановок переменных σ , чем в общем случае j -группы перестановок, так как функция переменных $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ благодаря этому обстоятельству не может быть антисимметричной по отношению к более чем двум из них.

Изучение наблюдаемых P^z становится особенно легким благодаря тому, что мы можем выразить их в виде алгебраических функций переменных σ . Рассмотрим величину

$$O_{12} = \frac{1}{2} (1 + (\sigma_1, \sigma_2)).$$

С помощью ур-ний (42) (см. § 43) мы сейчас же находим:

$$(\sigma_1, \sigma_2)^2 = (\sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z})^2 = 3 - 2(\sigma_1, \sigma_2), \quad (33)$$

откуда

$$O_{12}^2 = \frac{1}{4} (1 + 2(\sigma_1, \sigma_2) + (\sigma_1, \sigma_2)^2) = 1. \quad (34)$$

Далее:

$$O_{12}\sigma_{1x} = \frac{1}{2} (\sigma_{1x} + \sigma_{2x} - i\sigma_{1z}\sigma_{2y} + i\sigma_{1y}\sigma_{2z}),$$

$$\sigma_{2x}O_{12} = \frac{1}{2} (\sigma_{2x} + \sigma_{1x} + i\sigma_{1y}\sigma_{2z} - i\sigma_{1z}\sigma_{2y}),$$

откуда

$$O_{12}\sigma_{1x} = \sigma_{2x}O_{12}.$$

Подобные же соотношения имеют место и для σ_{1y} и σ_{1z} так что мы имеем:

$$O_{12}\sigma_1 = \sigma_2O_{12}$$

Или

$$O_{12}\sigma_1O_{12}^{-1} = \sigma_2,$$

Отсюда с помощью (34) мы получаем:

$$O_{12}\sigma_2O_{12}^{-1} = \sigma_1.$$

Эти перестановочные соотношения между O_{12} , σ_1 и σ_2 в точности совпадают с соотношениями между P_{12}^σ , σ_1 и σ_2 ¹ есть транспозиция спиновых переменных 1-го и 2-го электрона. Поэтому можно положить

$$O_{12} = cP_{12}^\sigma,$$

где c есть число. Ур-ие (34) показывает, что $c = \pm 1$. Для того, чтобы определить, какой из двух знаков следует взять, заметим, что собственными значениями P_{12}^σ являются 1, 1, 1, -1, так как имеются три независимых симметрических и одна антисимметрическая функция двух переменных σ_{1z} и σ_{2z} , а именно, следуя принятому в § 43 обозначению, три симметрические функции

$$f_z(\sigma_1)f_z(\sigma_2), f_x(\sigma_1)f_x(\sigma_2), f_y(\sigma_1)f_y(\sigma_2) + f_y(\sigma_1)f_x(\sigma_2)$$

и одна антисимметрическая $f_x(\sigma_1)f_y(\sigma_2) - f_y(\sigma_1)f_x(\sigma_2)$. Поэтому среднее арифметическое собственных значений P_{12}^σ равно $\frac{1}{2}$. Далее, среднее арифметическое собственных значений (σ_1, σ_2) очевидно равно нулю, а следовательно среднее арифметическое собственных значений O_{12} равно $\frac{1}{2}$. Поэтому мы должны взять $c = +1$, так что можно положить

$$P_{12}^\sigma = \frac{1}{2} (1 + (\sigma_1, \sigma_2)).$$

Таким образом всякая перестановка P^σ , состоящая из одной транспозиции, может быть выражена в виде алгебраической функции от σ . Всякая другая перестановка P^σ может быть выражена в виде произведения транспозиций, а потому в конечном счете также может

¹ Если $f(\sigma_1, \sigma_2)$ есть любая функция от σ_1 и σ_2 , то $P_{12}^\sigma \sigma_1 f(\sigma_1, \sigma_2) = \sigma_2 f(\sigma_2, \sigma_1) = \sigma_2 P_{12}^\sigma f(\sigma_1, \sigma_2)$, откуда $P_{12}^\sigma \sigma_1 = \sigma_2 P_{12}^\sigma$ и таким же образом $P_{12}^\sigma \sigma_2 = \sigma_1 P_{12}^\sigma$.

быть написана в виде функции от σ . С помощью соотношения (32) мы сможем выразить все P в виде алгебраических функций от σ больше не вводя в рассмотрение P^σ . Так как квадрат транспозиции равен единице и так как в случае перестановки, состоящей из одной транспозиции, в формуле (32) можно взять знак -, то мы имеем

$$P_{12} = -\frac{1}{2} \{1 + (\sigma_1, \sigma_2)\}. \quad (35)$$

Формулу (35) удобно применить к вычислению характеров определяющих изолированные системы состояний. Так например, в случае перестановок, состоящих из одной транспозиции, мы имеем

$$\chi_{12} = \chi(P_{12}) = -\frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{2}{n(n-1)} \sum_{r < i} (\sigma_r, \sigma_i) \right\}.$$

Если мы введем наблюдаемую s , являющуюся абсолютной величиной полного спинового момента количества движения $\frac{1}{2} \sum_r \sigma_r$, измеренного в единицах \hbar , посредством формулы

$$s^2 - \frac{1}{4} = \left(\frac{1}{2} \sum_r \sigma_r, \frac{1}{2} \sum_r \sigma_r \right),$$

по аналогии с уравнением (12) в главе VIII, то мы будем иметь

$$2 \sum_{r < i} (\sigma_r, \sigma_i) = \left(\sum_r \sigma_r, \sum_r \sigma_r \right) - \sum_r (\sigma_r, \sigma_r) = 4s^2 - 1 - 3n.$$

Отсюда следует:

$$\chi_{12} = -\frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{4s^2 - 1 - 3n}{n(n-1)} \right\} = -\frac{n(n-4) + 4s^2 - 1}{2n(n-1)}. \quad (36)$$

Таким образом χ_{12} может быть выражено в виде функции наблюдаемой s и числа электронов n . Подобным же способом можно вычислить и все остальные χ , которые станут при этом функциями только от s и n , так как не существует других симметрических функций от всех наблюдаемых σ , входящих в рассмотрение. Поэтому каждому собственному значению s' наблюдаемой s соответствует только одна система численных значений χ' величин χ и следовательно только одна изолированная система состояний. Собственными значениями наблюдаемой s являются числа

$$\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}n - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}n - \frac{3}{2}, \dots$$

(ряд заканчивается числом $\frac{1}{2}$ или 1).

Таким образом мы видим, что каждое стационарное состояние системы, состоящей из нескольких электронов, является собственным состоянием наблюдаемой s , т. е. величины полного момента количества движения спина $\frac{1}{2} \sum_r \sigma_r$ измеренной в единицах \hbar ; каждому стационарному состоянию соответствует определенное собственное значение s' наблюдаемой s . При данном s' имеется $2s'$ возможных значений для слагающей полного вектора спина по любому направлению, причем каждое из этих значений соответствует одному из независимых стационарных состояний с той же энергией. Если не пренебрегать силами, связанными со спиновым и магнитным моментом, то эти $2s'$ состояний, вообще говоря, станут $2s'$ состояниями со слегка различной энергией и образуют таким образом мультиплет кратности $2s'$. Переходы, при которых меняется s' , т. е. переходы от одной кратности к другой, не могут происходить, если пренебречь спиновыми силами; если же этими силами не пренебречь, то такие переходы будут лишь весьма маловероятны.

Уровни энергии системы, состоящей из нескольких электронов, можно в первом приближении определить с помощью формулы (29). Если принимать во внимание только кулоновские силы между электронами, то энергия взаимодействия V будет суммой членов, каждый из которых относится к паре элементов, вследствие чего будут обращаться в нуль все матричные элементы V_p , за исключением тех случаев, когда P есть тождественная перестановка или только обмен двумя электронами. Таким образом формуле (29) сведется к формуле

$$V = V_1 + \sum_{r < s} V_{rs} P_{rs}^{\alpha}, \quad (37)$$

где V_{rs} - матричный элемент соответствующий обмену орбитами r и s . Так как перестановки P^{α} обладают теми же свойствами, что и перестановки P , то любая функция перестановок P^{α} будет иметь те же : собственные значения, что и соответствующая функция перестановок P , так что правая часть равенства (37) будет иметь те же собственные числа, что и

$$V_1 + \sum_{r < s} V_{rs} P_{rs}$$

или

$$V_1 - \frac{1}{2} \sum_{r < s} V_{rs} (1 + (\sigma_r \sigma_s)) \quad (38)$$

(см. формулу 35). Собственные значения (38) дадут в первом приближении поправки к уровням энергии. Вид выражения (38) показывает, что модель, в которой допускается, что

энергия взаимодействия спинов электронов на орбите r и на орбите s равна $-\frac{1}{2} V_{rs} (\sigma_r \sigma_s)$,

должна оказаться достаточно успешной. Такая энергия взаимодействия гораздо больше, чем энергия взаимодействия магнитных моментов спинов. Подобные модели атома были в ходу еще до того, как квантовая механика подтвердила их законность.

Если в невозмущенной системе две орбиты, например орбиты α_1 , и α_2 одинаковы, то мы должны брать только те собственные значения наблюдаемой (37), которые совместимы с условием $P_{12}^{\alpha} = 1$, или же те собственные значения наблюдаемой (38), которые совместимы с условием $P_{12}^{\alpha} = 1$ или $P_{12}^{\alpha} = -1$. Это значит, что нужно брать только те собственные числа наблюдаемой (38), которые соответствуют собственным функциям этой наблюдаемой, являющимся в то же время собственными функциями наблюдаемой P_{12}^{α} принадлежащими собственному числу -1; т. е. нужно брать только те собственные функции наблюдаемой (38), которые антисимметричны по отношению к σ_1 и σ_2 . Таким образом можно сказать, что два электрона на орбитах α_1 , и α_2 обладают антипараллельными спинами. Случай, когда число одинаковых орбит превышает 2, с электронами произойти не может.

ХІА. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ.

§ 1. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ.

Большинство проблем квантовой механики приводят к волновым уравнениям, которые слишком сложны для решения с помощью обычных математических средств. Это ведет к пользованию приближенными методами. В главе IX мы имели дело с одним из приближенных способов, а именно с методом возмущений; последний однако часто неприменим, так что приходится искать других путей. Различные авторы время от времени применяли специальные приближенные методы для разработки отдельных проблем. Почти все эти методы могут быть описаны следующей схемой.

Вместо того, чтобы искать точное решение волнового уравнения, мы рассматриваем только волновые функции некоторого специально упрощенного вида. Мы вычисляем далее, какие из этих функций специального вида наиболее приближаются к точной волновой функции. Или, более подробно, мы берем за основу некоторый простой вид волновой функции, заключающей произвольные параметры или произвольные функции, и определяем те значения произвольных функций или параметров, которые ведут к наиболее точному решению волнового уравнения. При выборе основной упрощенной функции следует руководствоваться как соображениями удобства, так и физическими условиями и не уклоняться слишком далеко от точного вида волновой функции. В настоящем параграфе мы примем, что упрощенная функция задана, и рассмотрим вопрос об определении значений произвольных функций и параметров, входящих в нее.

Рассмотрим сначала стационарные состояния системы. Пусть система обладает гамильтоновой функцией H , и нам требуется определить возможно более точно собственные значения и собственные функции H . Докажем сперва следующую теорему: Если ψ есть нормированная собственная функция гамильтоновой функции H и φ - ее мнимо-сопряженная, то значение $\varphi H \psi$ стационарно при всех малых вариациях ψ , сохраняющих нормировку, т. е.

$$\delta(\varphi H \psi) = 0, \quad (1)$$

если только

$$\delta(\varphi \psi) = 0. \quad (2)$$

Это вариационное условие дает нам:

$$\delta(\varphi H \psi) - E \delta(\varphi \psi) = 0 \quad (3)$$

для всех малых изменений, независимо от того, удовлетворяют они условию (2) или нет; E - некоторое число. Итак:

$$\delta[\varphi(H - E)\psi] = 0$$

или

$$\delta\varphi(H - E)\psi + \varphi(H - E)\delta\psi = 0. \quad (4)$$

Так как $\delta\varphi$ и $\delta\psi$ должны быть мнимо-сопряженными, то они не независимы, и мы не можем приравнять непосредственно коэффициенты нулю. Мы можем однако взять новую вариацию $\delta\psi$, равную прежней, помноженной на i : это даст новую $\delta\varphi$, равную старой, умноженной на $-i$, и мы получим:

$$-i\delta\varphi(H - E)\psi + i\varphi(H - E)\delta\psi = 0. \quad (5)$$

Из (4) и (5) мы заключаем, что

$$\delta\varphi(H - E)\psi = 0$$

и, так как $\delta\varphi$ произвольно, что

$$(H - E)\psi = 0; \quad (6)$$

но как раз при этом условии ψ и будет собственной функцией H , и значит наша теорема доказана. Параметр E , входящий в (3), есть соответствующее собственное число. Оно равно стационарному значению $\varphi H \psi$ в чем можно убедиться, умножив уравнение (6) слева на φ . Следует заметить, что хотя в нашем доказательстве мы варьировали φ и ψ как мнимо-сопряженные величины, можно было бы получить тот же результат (6), варьируя одну только функцию φ . Таково общее правило, применяемое во всех случаях при варьировании

выражений вида левой стороны равенства (1). В подобных случаях мы и будем варьировать одну только φ , так как это несколько сокращает работу.

Доказанная теорема служит основанием излагаемого приближенного метода в применении к стационарным состояниям. Метод заключается в нахождении нормированных волновых функций данного простого вида, обращающих вариацию выражения $\varphi_1 H \psi_1$ в нуль. Можно принять, что эти функции ψ_1 дают лучшее приближение данного простого вида к волновым функциям, представляющим стационарные состояния. В частности ψ_1 приводящая выражение $\varphi_1 H \psi_1$ к минимуму, будет давать лучшее приближение к нормальному состоянию системы.

В наших символах условие для $\delta\varphi_1$ запишется так:

$$\delta\varphi_1 E \psi_1 = \delta\varphi_1 H \psi_1 \quad (7)$$

для любой вариации $\delta\varphi_1$, которая является мнимо-сопряженной по отношению к малой вариации $\delta\psi_1$ сохраняющей данный простой вид функции. Это означает, что $\delta\psi_1$ должно получаться из малой вариации произвольных функций или параметров, входящих в ψ_1 . После того как было получено решение ψ_1 из (7), мы можем взять за соответствующее приближенное значение уровня энергии $\varphi_1 H \psi_1$.

Соответствующая теория приближенных решений существует и для нестационарных состояний. Она основана однако не на стационарном, по отношению к вариациям, характере точных решений волнового уравнения, но имеет более непосредственный фундамент. (Здесь нам удобнее рассматривать ψ как волновые функции, а не абстрактные символы в смысле главы II.)

Имеем волновое уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi \quad (8)$$

В заданный момент t_0 ψ может быть взята произвольной. Пусть ψ в этот момент имеет данный простой вид; обозначим ее через $\psi_1(t_0)$. В мало отличающийся момент времени $t_0 + dt$ ψ будет определяться уравнением (8) и не будет уже вообще заданного простого вида. Наша задача заключается в разыскании волновой функции $\psi_1(t)$, которая сохраняла бы данный простой вид и удовлетворяла бы уравнению (8) возможно точнее.

Положив

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1(t)}{\partial t} = H \psi_1(t) + \psi_2(t), \quad (9)$$

мы должны сделать поправочный член ψ_2 возможно более малым. Из уравнения (9) мы находим:

$$i\hbar [\psi_1(t_0 + dt) - \psi_1(t_0)] = H \psi_1(t_0) dt + \psi_2(t_0) dt.$$

Наша задача заключается теперь в отыскании таких $\psi_1(t_0 + dt)$ при заданном $\psi_1(t_0)$, чтобы ψ_2 было возможно более малым. Изменяя некоторым образом $\psi_1(t_0 + dt)$, мы получим соответственную вариацию ψ_2 из равенства

$$i\hbar \delta\psi_1(t_0 + dt) = \delta\psi_2(t_0) dt. \quad (10)$$

Требование малости для $\psi_2(t_0)$ равносильно условию минимума для $\varphi_2(t_0) \cdot \psi_2(t_0)$ или условию $\delta\varphi_2(t_0) \cdot \psi_2(t_0) = 0$.

При помощи (10) это дает:

$$\delta\varphi_1(t_0 + dt) \psi_2(t_0) = 0.$$

Переходя к пределу $dt \rightarrow 0$, мы получим условие для ψ_2 :

$$\delta\varphi_1(t) \psi_2(t) = 0,$$

т. е. ψ_2 должно быть ортогонально ко всякой вариации φ_1 . Мы можем исключить отсюда ψ_2 умножая уравнение (9) на $\delta\varphi_1$, и получить таким образом окончательно условие для ψ_1 .

$$i\hbar \delta\varphi_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \delta\varphi_1 H \psi_1. \quad (11)$$

До сих пор мы ничего не говорили о нормировке функции ψ_1 для нестационарного случая. Необходимо, чтобы выбор заданного простого вида для ψ_1 не накладывал каких-либо ограничений на нормировку, т. е., если ψ_1 есть функция данного простого вида, то $c\psi_1$ тоже должно иметь этот вид, где c - любое число. При этом условии легко теперь усмотреть, что если ψ_1 была вначале нормирована, то в силу уравнения (11) она всегда остается нормированной. Мы покажем это, заметив, что возможной вариацией $\delta\varphi_1$ является $\varepsilon\varphi_1$, где ε - малое число. Подставляя в (11), имеем:

$$i\hbar\varphi_1\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = \varphi_1 H\psi_1. \quad (11a)$$

Взяв мнимо-сопряженное уравнение, т. е. $-i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}\psi_1 = \varphi_1 H\psi_1$, и вычитая, мы получим:

$$0 = \varphi_1\frac{\partial\psi_1}{\partial t} + \frac{\partial\varphi_1}{\partial t}\psi_1 = \frac{d}{dt}(\varphi_1\psi_1).$$

Этот метод для нестационарных состояний можно применять и к стационарным, как к частному случаю, беря решения уравнения (11) периодическими по времени, т. е. такими, для которых

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = E\psi_1,$$

где E —число. Это даст нам $\delta\varphi_1 E\psi_1 = \delta\varphi_1 H\psi_1$ т. е. как раз условие (7) функции для ψ_1 нашей прежней теории стационарных состояний.

§ 2. МЕТОД ХАРТРИ.

Одним из наиболее важных применений изложенной теории будет случай некоторого числа взаимодействующих систем, если мы за специальный вид полной волновой функции возьмем произведение волновых функций отдельных систем. Так, если в нашем представлении диагональны динамические переменные q_1, q_2, \dots, q_n (где q_1 описывает только одну первую систему, q_2 описывает только вторую систему и т. д.), то за специальный вид полной волновой функции мы возьмем:

$$(q_1, q_2, \dots, q_n) = f_1(q_1)f_2(q_2)\dots f_n(q_n) = \prod_{\nu} f_{\nu}(q_{\nu}). \quad (12)$$

Здесь f - произвольные функции, которые следует выбрать так, чтобы полная волновая функция была наиболее точной. Возьмем сначала случай стационарных состояний, для которого имеет место уравнение (7). Для $\delta\varphi_1$ мы имеем теперь:

$$\delta\prod_{\nu} \bar{f}_{\nu}(q_{\nu}) = \sum_{\nu} \delta\bar{f}_{\nu}(q_{\nu}) \prod_{\nu \neq \nu} \bar{f}_{\nu}(q_{\nu});$$

откуда

$$\begin{aligned} \delta\varphi_1 H\psi_1 &= \\ &= \sum_{\nu} \int \int \delta\bar{f}_{\nu}(q'_{\nu}) \prod_{\nu \neq \nu} \bar{f}_{\nu}(q''_{\nu}) \prod dq'(q'_1 \dots q'_n | H | q''_1 \dots q''_n) \prod dq'' \prod_{\nu} f_{\nu}(q''_{\nu}) = \\ &= \sum_{\nu} \int \int \delta\bar{f}_{\nu}(q'_{\nu}) dq'_{\nu} (q'_{\nu} | H_{\nu} | q''_{\nu}) dq''_{\nu} f_{\nu}(q''_{\nu}), \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$(q'_{\nu} | H_{\nu} | q''_{\nu}) = \int \int \prod_{\nu \neq \nu} \{ \bar{f}_{\nu}(q''_{\nu}) dq''_{\nu} \} (q'_1 \dots q'_n | H | q''_1 \dots q''_n) \prod_{\nu \neq \nu} \{ dq''_{\nu} f_{\nu}(q''_{\nu}) \}, \quad (14)$$

что является функцией только q'_{ν} и q''_{ν} . В свою очередь

$$\begin{aligned} \delta\varphi_1 E\psi_1 &= E \sum_{\nu} \int \int \delta\bar{f}_{\nu}(q'_{\nu}) \prod_{\nu \neq \nu} \bar{f}_{\nu}(q''_{\nu}) \prod dq' \prod_{\nu} f_{\nu}(q''_{\nu}) = \\ &= E \sum_{\nu} \int \int \delta\bar{f}_{\nu}(q'_{\nu}) dq'_{\nu} f_{\nu}(q''_{\nu}), \end{aligned} \quad (15)$$

если мы допустим, что каждая функция f_{ν} нормирована, что не нарушает общности.

Выражения (13) и (15) должны быть равны для любых вариаций δf . Приравнявая коэффициенты при $\delta\bar{f}_{\nu}(q'_{\nu})$, мы получим:

$$\int (q'_s | H_s | q_s'') dq_s'' f_s(q_s'') = E f_s(q_s'). \quad (16)$$

Таким образом, каждая функция f_s должна быть собственной функцией соответственной матрицы $(q'_s | H_s | q_s'')$ и принадлежать собственному значению E . Эти условия определяют функции f с точностью до числового множителя, не играющего роли.

Наш результат, выраженный в ур-иях (14) и (16) имеет простой физический смысл. Мы можем рассматривать H_s , определенное ур-ием (14), как гамильтонову функцию для s -ой системы, полученную из точной гамильтоновой функции путем некоторого усреднения по всем остальным (т. е. исключая s -ую) системам, которые, согласно допущению, находятся в стационарных состояниях, представленных функциями $f_v(q_v)$. Тогда $f_v(q_v)$ должны быть собственными функциями соответственных H_s . Основываясь на этой физической интерпретации, Хартри¹ предложил указанные уравнения в качестве приближенного метода, который он назвал методом самосогласованного поля² и применил к взаимодействию электронов в атоме задолго до того, как Фок³ теоретически оправдал этот способ методом вариаций.

В ряде практических приложений гамильтонова функция имеет вид:

$$H = \sum_v U_v + \sum_v \sum_{s \neq v} V_{vs}, \quad (17)$$

где U_v есть собственная энергия v -ой системы и $V_{vs} = V_{sv}$ есть энергия взаимодействия v -ой и s -ой систем. Отсюда для H_s имеем:

$$(q'_s | H_s | q_s'') = (q'_s | U_s | q_s'') + \sum_{v \neq s} (v | U_v | v) \delta(q'_s - q_s'') + \sum_{v \neq s} (q'_s | \beta_{vs} | q_s'') + \sum_{v \neq s} \sum_{t < v, t \neq s} (vt | V_{vt} | vt) \delta(q'_s - q_s''), \quad (18)$$

где

$$(v | U_v | v) \text{ и } (vt | V_{vt} | vt)$$

представляют собой выражения

$$(v | U_v | v) = \int \int \bar{f}_v(q'_v) dq'_v (q'_v | U_v | q_v'') dq_v'' f_v(q_v''), \quad (19)$$

$$\stackrel{(18)}{=} \int \int \int \bar{f}_v(q'_v) \bar{f}_t(q'_t) dq'_v dq'_t (q'_v q'_t | V_{vt} | q_v'' q_t'') dq_v'' dq_t'' f_v(q_v'') f_t(q_t'') \quad (20)$$

и β_{vs} - матрица, определенная при помощи выражения

$$(q'_s | \beta_{vs} | q_s'') = \int \int \bar{f}_v(q'_v) dq'_v (q'_v q'_s | V_{vs} | q_v'' q_s'') dq_v'' f_v(q_v''). \quad (21)$$

Умножая ур-ие (16) на $\bar{f}_s(q'_s) dq'_s$ и интегрируя, получим:

$$E = \int \int \bar{f}_s(q'_s) dq'_s (q'_s | H_s | q_s'') dq_s'' f_s(q_s'')$$

или при помощи ур-ия (18)

$$E = \sum_v (v | U_v | v) + \sum_{t < v} (vt | V_{vt} | vt). \quad (22)$$

Подставляя это значение E и значение H_s из (18) в (16), окончательно получим:

$$\left\{ (s | U_s | s) + \sum_{v \neq s} (vs | V_{vs} | vs) \right\} f_s(q_s') = \int (q'_s | U_s + \sum_{v \neq s} \beta_{vs} | q_s'') dq_s'' f_s(q_s''). \quad (23)$$

Слева мы имеем просто произведение числового коэффициента на волновую функцию f_s ; оператор, стоящий справа, состоит из члена U_s , обозначающего собственную энергию s -ой системы, и членов β_{vs} , обозначающих взаимодействие с другими системами; эти последние члены получаются из энергии взаимодействия V_{vs} путем усреднения, рассмотренного выше. Перейдем теперь к нестационарным состояниям. Заметим прежде всего, что специальный выбор полной волновой функции вида (12) не нарушает нормировки, так что мы можем

¹ Hartree, Proc. Cambr. Phil. Soc., 24, pp. 89, 111, 426, 1928.

² По-английски: self-consistent field. Примечание переводчика.

³ Fock, ZS. f. Phys., 61, 126, 1930.

применять ур-ия (11), и полная волновая функция останется всегда нормированной, если она вначале была нормирована. Но сохранение нормировки каждой отдельной функции f , если она была нормирована вначале, не гарантируется уравнением. Правая сторона ур-ия (11) или, что то же, правая сторона ур-ия (7) уже была вычислена и дается выражением (13). Левая сторона (11) равна:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = i\hbar \int \sum_s \delta f_s(q_s) \Pi_{v \pm s} f_v(q_v) \Pi dq \sum_a \frac{df_a(q_a)}{dt} \Pi_{v \pm s} f_v(q_v) =$$

$$= i\hbar \sum_s \int \delta f_s(q_s) dq_s \frac{df_s(q_s)}{dt} +$$

$$+ \sum_s \sum_{a \neq s} a_s \int \delta f_s(q_s) dq_s f_s(q_s), \quad (24)$$

где

$$a_s = i\hbar \int \bar{f}_s(q_s) dq_s \frac{df_s(q_s)}{dt}, \quad (25)$$

если только каждая функция f_v нормирована в момент времени t . Приравнявая коэффициенты при $\delta \bar{f}_s$ в (13) и (24), мы получим уравнения метода самосогласованного поля для нестационарных состояний:

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_s(q_s') + \sum_{a \neq s} a_a f_s(q_s') = \int (q_s' | H_s | q_s'') dq_s'' f_s(q_s''). \quad (26)$$

Умножив (26) на $\bar{f}_s(q_s') dq_s'$ и интегрируя, получим:

$$\sum_a a_a = \int \int \bar{f}_s(q_s') dq_s' (q_s' | H_s | q_s'') dq_s'' f_s(q_s'') =$$

$$= \int \int \Pi_v \bar{f}_v(q_v') \Pi dq' (q_1' \dots q_n' | H | q_1'' \dots q_n'') \Pi dq'' \Pi_s f_s(q_s'').$$

Таким образом сумма всех a равна среднему значению полной энергии. Все a произвольны, за исключением именно этого условия, наложенного на их сумму. Мы имеем следовательно некоторую долю неопределенности в ур-иях (26), соответствующую тому, что функции f могут быть, при их изменении, помножены на произвольные коэффициенты, модуль произведения которых равен единице. Если мы хотим оставить нормированной каждую функцию f , это приведет, как легко проверить при помощи (25), к требованию вещественности для всех a .

Для гамильтоновой функции вида (17) ур-ия (26) приведется к форме

$$i\hbar \frac{d}{dt} f_s(q_s') + \left\{ (s | U_s | s) + \sum_{v \neq s} (vs | V_{vs} | vs) - a_s \right\} f_s(q_s') =$$

$$= \int (q_s' | U_s + \sum_{v \neq s} \hat{p}_{vs} | q_s'') dq_s'' f_s(q_s''). \quad (27)$$

соответственно ур-иям (23) для стационарного случая.

§ 3. МЕТОД ФОКА.

Если мы имеем дело с некоторым числом взаимодействующих электронов, метод предыдущего параграфа оказывается уже не столь хорошим, в виду того, что выражение (12) полной волновой функции противоречит принципу Паули. Лучше взять за основу антисимметрическую функцию, составив ее из линейных комбинаций функций вида (12), в которых произведены всевозможные перестановки над всеми q . Это уточнение метода самосогласованного поля, предложенное Фоком (см. выше), мы теперь и рассмотрим.

Для сокращения введем обозначение $A\{F(q)\}$ [где $F(q)$ - какая-либо функция q_1, q_2, \dots, q_n] путем следующего равенства:

$$A\{F(q)\} = n!^{-\frac{1}{2}} \sum_p \pm F(Pq),$$

где $F(Pq)$ обозначает результат применения перестановки P ко всем q_s в функции $F(q)$ и суммирование производится по всем $n!$ перестановкам, взятым со знаками $+$ или $-$, смотря потому, четная или нечетная перестановка.

Таким образом $A\{F(q)\}$ антисимметрично в q_s и нормировано, если F нормировано.

За специальный вид полной волновой функции мы возьмем теперь

$$A\{\Pi_{\sigma} f_{\sigma}(q_{\sigma})\}. \quad (28)$$

Следует отметить, что, если $F(q)$ и $G(q)$ суть две функции от величин q_s то:

$$\begin{aligned} \int A\{F(q)\} \Pi dq A\{G(q)\} &= n!^{\frac{1}{2}} \int F(q) \Pi dq A\{G(q)\} = \\ &= n!^{\frac{1}{2}} \int A\{F(q)\} \Pi dq G(q). \end{aligned} \quad (29)$$

Излагаемый метод довольно сложен в применении к произвольной гамильтоновой функции. Мы ограничимся поэтому случаем гамильтоновой функции вида (17). Так как различные взаимодействующие системы эквивалентны, то все U_{ν} , а также $V_{\nu s}$ имеют один и тот же вид, если их отнести к соответствующим переменным. Это означает, что выражение $(q'_{\nu}|U_{\nu}|q''_{\nu})$ будет для различных переменных q'_{ν} и q''_{ν} функцией одного и того же вида; мы обозначим эту функцию просто через $(q'|U|q'')$ так же каждая $(q'_{\nu}q''_{\nu}|V_{\nu s}|q'_{\nu}q''_{\nu})$ будет одной и той же функцией для различных переменных $q'_{\nu}, q''_{\nu}, q'_{\nu}, q''_{\nu}$ мы обозначим ее просто через $(q'q''|V|q''q''^{\text{IV}})$.

Дальнейшего упрощения мы достигнем, допустив, что все f_s нормированы и ортогональны друг к другу, т. е.

$$\int \bar{f}_s(q) dq f_{\sigma}(q) = \delta_{\sigma s}.$$

Эти ограничения вполне допустимы, так как, если функции f_s и не удовлетворяют сделанным допущениям, то можно найти их линейные комбинации, удовлетворяющие условиям и приводящие к той же антисимметрической волновой функции (28). На том же основании можно допустить без существенного нарушения общности, что ур-ие (30) удовлетворяется и при вариации функций f , так что

$$\int \delta \bar{f}_s(q) dq f_{\sigma}(q) = 0. \quad (31)$$

Сказанное позволяет нам при вычислении вариаций $\varphi_1 H \psi_1$ или другого подобного выражения, прежде всего упростить возможно больше это выражение при помощи соотношений (30) и потом уже производить вариацию.

Так, для вычисления $\delta \varphi_1 H \psi_1$ мы вычисляем сначала

$$\begin{aligned} \varphi_1 H \psi_1 &= \int \int A\{\Pi_{\sigma} f_{\sigma}(q_{\sigma}')\} \Pi dq' (q_1' \dots q_n' | H | q_1'' \dots q_n'') \Pi dq'' A\{\Pi_{\sigma} f_{\sigma}(q_{\sigma}'')\} = \\ &= \int A\{\int \Pi_{\sigma} \bar{f}_{\sigma}(q_{\sigma}') \Pi dq' (q_1' \dots q_n' | H | q_1'' \dots q_n'')\} \Pi dq'' A\{\Pi_{\sigma} f_{\sigma}(q_{\sigma}'')\}. \end{aligned}$$

так как H симметрично по отношению ко всем электронам. При помощи (29) последнее уравнение сведется к следующему:

$$\begin{aligned} \varphi_1 H \psi_1 &= \\ &= n!^{\frac{1}{2}} \int \int \Pi_{\sigma} \bar{f}_{\sigma}(q_{\sigma}') \Pi dq' (q_1' \dots q_n' | H | q_1'' \dots q_n'') \Pi dq'' A\{\Pi_{\sigma} f_{\sigma}(q_{\sigma}'')\} \end{aligned}$$

или, если H имеет вид (17):

$$\begin{aligned} \varphi_1 H \psi_1 &= \sum_s \int \int \bar{f}_s(q') dq' (q' | V | q'') dq'' f_s(q'') + \\ &+ \sum_{\sigma} \sum_{\nu < \sigma} \int \int \int \bar{f}_{\sigma}(q') \bar{f}_{\nu}(q'') dq' dq'' (q' q'' | V | q'' q''^{\text{IV}}) dq''^{\text{IV}} [f_{\sigma}(q') f_{\nu}(q''^{\text{IV}}) - \\ &- f_{\nu}(q''^{\text{IV}}) \bar{f}_{\sigma}(q')]. \end{aligned} \quad (32)$$

Варьируя функции f , мы получим:

$$\begin{aligned} \delta \varphi_1 H \psi_1 &= \sum_s \int \int \delta \bar{f}_s(q') dq' (q' | V | q'') dq'' f_s(q'') + \\ &+ \sum_{\sigma} \sum_{\nu < \sigma} \int \int \int \delta \bar{f}_{\sigma}(q') \bar{f}_{\nu}(q'') dq' dq'' (q' q'' | V | q'' q''^{\text{IV}}) dq''^{\text{IV}} \\ &[f_{\sigma}(q') f_{\nu}(q''^{\text{IV}}) - f_{\nu}(q''^{\text{IV}}) \bar{f}_{\sigma}(q')] = \sum_s \int \int \delta \bar{f}_s(q') dq' (q' | U + \\ &+ B - A | q'') dq'' f_s(q''), \end{aligned} \quad (33)$$

где B и A —линейные операторы, определяемые уравнениями:

$$(q' | B | q''^{\text{IV}}) = \sum_{\sigma} \int \int \bar{f}_{\sigma}(q') dq' (q' q''^{\text{IV}} | V | q'' q''^{\text{IV}}) dq'' f_{\sigma}(q''), \quad (34)$$

$$\langle q^* | A | q^* \rangle = \sum_v \int \int \bar{f}_v(q') dq' \langle q' | q^* | V | q^* q^{IV} \rangle dq^{IV} f_v(q^{IV}). \quad (35)$$

Для стационарного состояния выражение (33) для $\delta\varphi_1 H \psi_1$ должно исчезать для всех вариаций $\delta\bar{f}$, удовлетворяющих ур-ниям (31)- Для этого нужно, чтобы коэффициент при $\delta\bar{f}_s$ в (33) был некоторой линейной функцией коэффициентов $\delta\bar{f}_s$ в левой части ур-ния (31), т. е.:

$$\int (q' | U + B - A | q^n \rangle dq^n f_s(q^n) = \sum_v a_{sv} f_v(q'), \quad (36)$$

где a_{sv} , - числа.

Эти уравнения определяют различные функции f соответственно ур-ниям (23) в случае метода Хартри. Ур-ния (36) имеют более простой вид чем (23), так как на все функции f действует один и тот же оператор $(U+B-A)$. Член B , соответствующий $\sum_v \beta_{vs}$ в (23), обозначает энергию электрона в поле всех электронов, тогда как член A включает как поправку β_{ss} , учитывающую факт отсутствия взаимодействия электрона с самим собою, так и другие поправки, не входившие в (23) и учитывающие явления обмена между электронами.

Коэффициенты a_{sv} могут быть получены в явном виде, если мы умножим (36) на $\bar{f}(q')dq'$ и проинтегрируем. Это даст нам:

$$a_{sv} = \int \int \bar{f}_v(q') dq' \langle q' | U + B - A | q^n \rangle dq^n f_s(q^n) = (v | U | s) + \sum_i \{ (tv | V | ts) - (tv | V | st) \}, \quad (37)$$

где, расширяя обозначения (19) и (20), положено:

$$(v | U | s) = \int \int \bar{f}_v(q') dq' \langle q' | V | q^n \rangle dq^n f_s(q^n), \quad (38)$$

$$(vs | V | tv) = \int \int \int \bar{f}_v(q') \bar{f}_s(q^n) dq' dq^n \langle q' q^* | V | q^* q^{IV} \rangle dq^* dq^{IV} f_t(q^*) f_u(q^{IV}). \quad (39)$$

Если функции f удовлетворяют условию (36), соответственное значение энергии получится из ур-ния (32) и будет следовательно равняться:

$$E = \sum_s (s | U | s) + \sum_v \sum_{s < v} \{ (vs | V | vs) - (vs | V | sv) \} \quad (40)$$

аналогично (22) в случае Хартри.

Добавочные члены представляют энергию обмена.

Рассмотрим теперь нестационарные состояния. Для этого требуется вычислить $i\hbar \delta\varphi_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial t}$. Из (29) и (30) мы имеем:

$$\begin{aligned} i\hbar \delta\varphi_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial t} &= i\hbar \int A \{ \Pi_v \bar{f}_v(q_v) \} \Pi dq A \left\{ \sum_s \frac{\partial f_s(q_s)}{\partial t} \Pi_{u+s} f_u(q_u) \right\} = \\ &= i\hbar n!^{\frac{1}{2}} \int A \{ \Pi_v \bar{f}_v(q_v) \} \Pi dq \sum_s \frac{\partial f_s(q_s)}{\partial t} \Pi_{u+s} f_u(q_u) = \\ &= i\hbar \sum_s \int \bar{f}_s(q) dq \frac{\partial f_s(q)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (41)$$

Итак

$$i\hbar \delta\varphi_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = i\hbar \sum_s \int \bar{f}_s(q) dq \frac{\partial f_s(q)}{\partial t}$$

Это выражение должно равняться (33) для всех вариаций $\delta\bar{f}_s$, удовлетворяющих (31). Отсюда

$$i\hbar \frac{\partial f_s(q)}{\partial t} + \sum_v b_{sv} f_v(q) = \int (q' | U + B - A | q^n \rangle dq^n f_s(q^n), \quad (42)$$

где b_{sv} - численные коэффициенты. Эти уравнения определяют функции f для нестационарных состояний, соответственно ур-ниям (27) случая Хартри.

Произвольные коэффициенты b_{sv} в (42) подчинены лишь тому условию, что сумма $\sum_s b_{ss}$ имеет заданное значение. Чтобы получить значение этой суммы, умножим (42) на $\bar{f}(q')dq'$ и проинтегрируем и просуммируем по всем s . Это дает

$$i\hbar \sum_s \int \bar{f}_s(q') dq' \frac{\partial f_s(q')}{\partial t} + \sum_s b_{ss} = \sum_s (s|U|s) + \sum_v \sum_s \left\{ (vs|V|vs) - (vs|V|sv) \right\}.$$

По ур-нию (40) первая сумма слева равна $i\hbar \varphi_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial t}$, что, согласно ур-нию (11a), равняется $\varphi_1 H \psi_1$ значение же этого выражения дано ур-нием (32); оно равняется левой стороне ур-ния (40). Подставляя в написанное уравнение, получим:

$$\sum_s b_{ss} = \frac{1}{2} \sum_v \sum_s \left\{ (vs|V|vs) - (vs|V|sv) \right\}. \quad (43)$$

Если мы хотим, чтобы функции f оставались нормированными ортогональными все время, мы должны положить

$$i\hbar \int \bar{f}_v(q) dq \frac{\partial f_s(q)}{\partial t} + i\hbar \int f_s(q) dq \frac{\partial \bar{f}_v(q)}{\partial t} = 0,$$

что показывает эрмитовский характер матрицы $i\hbar \int \bar{f}_v(q) dq \frac{\partial f_s(q)}{\partial t}$. В виду этого мы и для b_{sv} имеем добавочное условие, а именно $b_{sv} = b_{vs}$ т. е. матрица b_{vs} должна быть эрмитовой, в правильности чего легко убедиться, умножая (42) на $f_v(q')dq'$ и интегрируя.

§ 4. МЕТОД ПЛОТНОСТИ.

Если в выкладках предыдущего параграфа мы введем новые волновые функции f^* , которые являются линейными комбинациями старых f и нормированы и ортогональны друг ко другу, то f^* столь же пригодны для описания распределения электронов, как и функции f , так как они приводят к той же антисимметрической волновой функции (28).

Таким образом, уравнения, определяющие функции f , т. е. (34), (35), (36) или (42), должны были бы быть инвариантны по отношению к преобразованиям функций f в f^* . Инвариантность этих уравнений сразу видна из их тензорного вида относительно значков v и s . Это свойство инвариантности уравнений можно наиболее ясно показать, переписывая их при помощи инвариантных величин. Если мы возьмем для q какие-либо два значения q' и q'' , то $\sum_s f_s(q') \bar{f}_s(q'')$ будет инвариантно. Суммы такого вида будут единственными независимыми инвариантами, которые можно составить из функций f . Эти инварианты образуют элементы матрицы ρ :

$$(q'| \rho | q'') = \sum_s f_s(q') \bar{f}_s(q'').$$

Эта матрица представляет полную плотность всех электронов. Таким образом возможно будет переписать наши уравнения при помощи величин ρ так, что отдельные функции f войдут только через ρ .

Из ур-ний (30) мы получаем:

$$\begin{aligned} (q'| \rho^2 | q'') &= \sum_v \sum_s \int f_v(q') \bar{f}_v(q'') dq'' f_s(q'') \bar{f}_s(q') = \\ &= \sum_v \sum_s f_v(q') \delta_{vs} \bar{f}_s(q') = \\ &= \sum_v f_v(q') \bar{f}_v(q') = (q'| \rho | q''). \end{aligned}$$

Итак

$$\rho^2 = \rho. \quad (44)$$

Это уравнение, показывающее, что собственные значения ρ будут равны 0 и 1, является аналитическим выражением того, что число электронов в каком угодно состоянии есть или 0 или 1.

Дальше, из (42) мы получаем:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} (q' | \rho | q'') &= \sum_s \left\{ i\hbar \frac{\partial f_s(q')}{\partial t} \bar{f}_s(q'') - f_s(q') \left(-i\hbar \frac{\partial f_s(q'')}{\partial t} \right) \right\} = \\
&= \sum_s \left\{ -\sum_{q''} b_{s,q''} f_s(q') + \int (q' | U + B - A | q'') dq'' f_s(q'') \right\} \bar{f}_s(q'') - \\
&- \sum_s f_s(q') \left\{ -\sum_{q''} \bar{b}_{s,q''} \bar{f}_s(q'') + \int (q'' | U + B - A | q') dq'' \bar{f}_s(q'') \right\} = \\
&= \int (q' | U + B - A | q'') dq'' (q'' | \rho | q') - \int (q' | \rho | q'') dq'' (q'' | U + B - A | q')
\end{aligned}$$

в виду условий эрмитовости для матриц b_{qs} и $(q' | U + B - A | q'')$. Этот результат можно символически записать так:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = (U + B - A) \rho - \rho (U + B - A). \quad (45)$$

Если мы ур-ния (36), определяющие функции f для стационарного состояния, выразим через ρ , мы снова придем к прежнему ур-нию (45), за исключением того, что слева вместо $i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t}$ будет стоять нуль. Величины B и A тоже можно выразить через ρ , так как из определений их (34) и (35) мы имеем:

$$(q'' | B | q'') = \int \int (q' q'' | V | q'' q'') dq'' (q'' | \rho | q') dq' \quad (46)$$

$$(q' | A | q'') = \int \int (q' q'' | V | q'' q'') dq'' (q' | \rho | q') dq'. \quad (47)$$

Таким путем мы совершенно исключили функции f из наших уравнений, и единственной неизвестной величиной осталась матрица ρ , удовлетворяющая ур-ниям (44), (45), (46) и (47). Если бы мы смогли решить эти уравнения, мы имели бы в руках приближенный метод для трактовки задач с некоторым числом электронов; метод этот эквивалентен способу, изложенному в предыдущем параграфе, хотя и не пользуется вовсе отдельными волновыми функциями.

В случае кулоновского закона для взаимодействия между электронами, мы имеем, обозначая через q координаты положения и отбрасывая переменные спина:

$$(q' q'' | V | q'' q'') = \frac{e^2}{r(q' q'')} \delta(q' - q'') \delta(q' - q'').$$

где $r(q' q'')$ - расстояние между точками q' и q'' . Это дает:

$$(q' | B | q'') = e^2 \delta(q' - q'') \int \frac{(q'' | \rho | q'')}{r(q' q'')} dq'',$$

$$(q' | A | q'') = \frac{e^2 (q' | \rho | q'')}{r(q' q'')}.$$

Матрица $(q' | B | q'')$ будет теперь диагональна и является функцией только пространственных координат. Эта функция координат есть потенциал, вызванный распределением зарядов плотности $(q'' | \rho | q'')$. Для A , учитывающего явления обмена, не существует такого простого физического толкования. Имея дело с большим числом электронов, мы можем сделать дальнейшие упрощения, если удовлетворимся сравнительно грубой теорией. Именно мы можем совершенно пренебречь величиной A и отбросить некоммутативность координат и моментов, рассматривая таким образом ρ , U и B как обычные классические функции коммутирующих координат и моментов. Мы можем представить себе ρ как плотность в фазовом пространстве. Уравнение $\rho^2 = \rho$ требует, чтобы ρ было везде равно нулю или единице. Приняв во внимание спин, мы будем иметь для ρ значения 0, 1 и 2. Практически мы принимаем ρ равным везде 0 или 2, так как, при обычных условиях, в фазовом пространстве не существует больших областей со значением $\rho=1$, соответствующим наличию электронов с одним только направлением спина.

Наше уравнение движения (45) нужно переписать с помощью пуассоновых скобок; пренебрегая A , получим:

$$\frac{d}{dt} \rho = [U + B, \rho]. \quad (48)$$

Это уравнение будет определять движение границы между областями $\rho=0$ и $\rho=2$. Пусть уравнение пограничной поверхности в какой-то момент времени t будет $F(pqt) = 0$; тогда, если мы рассматриваем только окрестности пограничной поверхности, F будет больше нуля с

одной стороны, например со стороны $\rho=2$, и меньше нуля с другой стороны, где $\rho=0$. Таким образом, значение ρ в какой-либо точке p, q, t определяется значением F в этой точке; и ρ есть функция одной только переменной F , т. е. $\rho = f(H)$, Отсюда:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial f}{\partial F} \frac{\partial F}{\partial t} \quad (49)$$

(если мы допустим, что функция f достаточно непрерывна, чтобы ее можно было дифференцировать, что физически сводится к некоторому сглаживанию резких скачков ρ).

Из уравнения движения (48) мы имеем:

$$\frac{d\rho}{dt} = [u + B, f(F)] = \frac{\partial f}{\partial F} [U + B, F].$$

Сравнивая с (49), получаем уравнение движения границы:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = [U + B, F].$$

Для стационарного случая $\frac{\partial F}{\partial t} = 0$, отсюда

$$[U + B, F] = 0.$$

Этот метод удобен в применении к электронам в тяжелом атоме. Наши упрощения равносильны физическому допущению, что все электроны находятся в области фазового пространства, соответствующей наименьшей энергии (считая как собственную энергию U , так и потенциальную энергию от распределения электронов, входящую в член B), и заполняют целиком эту область, причем на единицу фазового объема приходится столько электронов, сколько допускается принципом Паули. Эта физическая точка зрения и привела к открытию данного метода с его применениями еще до того, как было получено теоретическое обоснование.¹

¹ См.: Dirac, Proc. Cambr. Phil. Soc. 26, 376, 1930. Thomas, Proc. Cambr. Phil. Soc. 23, 512, 1926. Fermi, ZS. f. Phys. 48, 73, 1928.

ХІІ. ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ.

§ 67. ТЕОРИЯ БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНОВСКИХ АНСАМБЛЕЙ.

В главе X была дана теория рассеяния, поглощения и испускания частицы атомной системой. Было сделано допущение, что взаимодействие частицы и атомной системы может быть описано посредством энергии взаимодействия V , которую нужно прибавить к функции Гамильтона; эта энергия взаимодействия должна была быть малой величиной, но во всем остальном она могла быть произвольной. Если бы можно было определить энергию взаимодействия между фотоном и атомом или между фотоном и молекулой, мы могли бы непосредственно применить разработанные в главе X методы к тому случаю, когда падающей частицей является фотон. Это позволило бы нам построить теорию взаимодействия атомной системы со светом. Но мы не можем определить энергию этого взаимодействия, применяя непосредственную аналогию с классической теорией (ведь именно этим путем мы сумели построить функции Гамильтона для большинства систем, рассмотренных до сих пор), так как в классической теории нет никакого аналога явлению взаимодействия атома с фотоном. Нам придется действовать более косвенным путем. Мы знаем, что взаимодействие атома с полем лучистой энергии приближенно описывается классической электродинамикой в том случае, когда поле излучения состоит из большого количества фотонов. Поэтому наш метод будет заключаться в следующем: мы не будем задаваться специальным выражением V (энергии взаимодействия между отдельным фотоном и атомом), но попытаемся выразить через V взаимодействие между атомом и большим количеством фотонов. Сравнивая с классической электродинамикой, мы сможем получить V .

Итак мы должны получить общее выражение взаимодействия атома с большим количеством фотонов. Необходимо заметить, что эта задача есть обобщение задачи, рассмотренной в главе X, несмотря на то, что и там нам часто приходилось иметь дело с большим количеством падающих на атом частиц. Эти частицы в главе X были независимы друг от друга: каждая из них взаимодействовала со своим особым атомом. Рассмотрение большого количества падающих частиц производилось лишь для того, чтобы лучше представить себе выводы теории, относящиеся к взаимодействию одной частицы с атомной

1 См.: Dirac. Proc. Cambr. Phil. Soc. 26. 376. 1930. Thomas, Proc. Cambr. Phil. Soc. 23. 512. 1926. Fermi, ZS. f. Phys. 48. 73, 1928.

Примечание переводчика.

системой. Теперь же мы имеем дело с большим количеством фотонов, взаимодействующих с одним и тем же атомом. Но эти фотоны не могут считаться независимыми друг от друга, так как, даже если и не существует никакой энергии взаимодействия фотона с фотоном, зависимость их друг от друга выражается, как мы видели в предыдущей главе, в том, что в природе осуществляются лишь состояния, симметричные по отношению ко всем фотонам: фотоны удовлетворяют статистике Эйнштейна-Бозе.

Рассмотрим сперва задачу, состоящую в том, что n каких угодно одинаковых систем удовлетворяют статистике Эйнштейна-Бозе и находятся в одном и том же возмущающем внешнем силовом поле. Если мы возьмем такое представление, в котором системы наблюдаемых q_1, q_2, \dots, q_n , описывающие первую, вторую и т. д. систему, диагональны, то

представитель q_1, q_2, \dots, q_n |) любого состояния должен быть симметричен по отношению

к переменным q_1, q_2, \dots, q_n . Предположим, что собственные числа одного из q , например

q_r , суть $q_r^{(1)}, q_r^{(2)}, q_r^{(3)}, \dots$; для определенности предположим, что они дискретны. Эти

собственные числа должны быть одинаковыми для всех n систем, иными словами — они не должны зависеть от r . (Каждое из этих собственных чисел есть, вообще говоря, не число, а

система чисел, так как q_r есть не одна наблюдаемая, а система коммутирующих друг с

другом наблюдаемых, описывающих r -тую из n рассматриваемых физических систем.) Если дана какая-то симметрическая функция переменных q_1, q_2, \dots, q_n , то каждая точка области определения этой функции может быть охарактеризована числами n_1, n_2, n_3, \dots , где n_s есть число переменных q_s , принявших значение $q^{(s)}$. Поскольку мы имеем дело с симметрическими функциями, пользование переменными n_1, n_2, n_3, \dots ничуть не хуже пользования переменными q_1, q_2, \dots, q_n . Поэтому представители состояний всего ансамбля, подчиняющегося статистике Бозе-Эйнштейна, могут быть написаны в виде функций от переменных n_1, n_2, n_3, \dots вместо переменных q_1, q_2, \dots, q_n . Для того, чтобы перейти от одних переменных к другим, нужно произвести каноническое преобразование к новому представителю, в котором строки и столбцы матриц определяются наблюдаемыми n_1, n_2, n_3, \dots , где n_s есть число систем, у которых q приняло значение $q^{(s)}$ или, что то же самое, число систем в состоянии $q^{(s)}$. Так как новые наблюдаемые n_1, n_2, n_3, \dots суть функции старых наблюдаемых q_1, q_2, \dots, q_n (хотя и не аналитические функции), то каноническое преобразование является совершенно тривиальным: оно заключается в изменении обозначений строк и столбцов; при этом единственное изменение, которое нужно будет произвести в представителе состояния, будет изменение, связанное с изменением весов различных точек области определения функции. Для того, чтобы определить это изменение» воспользуемся условием:

$$\sum_{n_1, n_2, \dots} |(n_1, n_2, \dots)|^2 = \sum_{q_1, q_2, \dots, q_n} |(q_1, q_2, \dots, q_n)|^2,$$

откуда следует:

$$|(n_1, n_2, \dots)|^2 = \sum |(q_1, q_2, \dots, q_n)|^2, \quad (1)$$

причем суммирование в формуле (1) происходит по всем таким значениям q , что n_1 из них равно $q^{(1)}$, n_2 из них равно $q^{(2)}$ и т. д. Число членов суммы в формуле (1) поэтому равно $\frac{n!}{n_1! n_2! n_3! \dots}$, и все они равны друг другу, так как функция $(q_1, q_2, \dots, q_n |)$ симметрична.

Поэтому ясно, что следует положить

$$(n_1, n_2, \dots |) = \left(\frac{n!}{n_1! n_2! n_3! \dots} \right)^{\frac{1}{2}} (q_1, q_2, \dots, q_n |). \quad (2)$$

Интересно узнать, как выражается гамильтонова функция всего ансамбля через новые наблюдаемые n_1, n_2, n_3, \dots . Для того чтобы узнать это, следует написать представителя этой функции Гамильтона в q -представлении, а затем перейти к n -представлению. Так как само

преобразование не очень обычно, то наиболее удобным способом произвести его оказывается преобразование всего уравнения Шредингера. Уравнение Шредингера будет таково:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (q_1 q_2 \dots q_n |) = \sum_{q_1' q_2' \dots q_n'} (q_1 q_2 \dots q_n | H | q_1' q_2' \dots q_n') (q_1' q_2' \dots q_n' |). \quad (3)$$

Функция Гамильтона имеет вид:

$$H = \sum_r U_r,$$

где U_r — часть энергии, приходящаяся на долю r -ой системы; эта часть состоит из энергии самой r -ой системы плюс энергия ее взаимодействия с внешним силовым полем; U_r — функция динамических переменных r -той системы. Представителем U_r в q_r -представлении

будет $(q_r' | U_r | q_r'')$, причем эта матрица не будет зависеть от r , т. е. будет одинаковой для

всех n систем. Матричные элементы ее могут быть записаны также и в виде $(q^{(a)} | U | q^{(b)})$

или еще короче — U_{ab} . Представителем U_r в полном q -представлении будет матрица:

$$(q_1' q_2' \dots q_n' | U_r | q_1'' q_2'' \dots q_n'') = (q_r' | U_r | q_r'') \frac{\partial_{q_1' q_1''} \partial_{q_2' q_2''} \dots \partial_{q_{r-1}' q_{r-1}''} \partial_{q_{r+1}' q_{r+1}''} \dots \partial_{q_n' q_n''}}$$

Поэтому уравнение Шредингера приводится к следующему:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (q_1 q_2 \dots q_n |) = \sum_r \left[(q_r | U_r | q_r) (q_1 q_2 \dots q_n |) + \sum_{q_r' \neq q_r} (q_r | U_r | q_r') (q_1 q_2 \dots q_{r-1} q_r' q_{r+1} \dots q_n |) \right]. \quad (4)$$

Мы написали отдельно члены, соответствующие диагональным матричным элементам H , потому что в дальнейшем это окажется удобным.

Если произвести теперь преобразование к n -представлению, то с помощью ур-ия (2) можно показать, что ур-ие (4) принимает вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (n_1 n_2 \dots |) = \sum_r (q_r | U_r | q_r) (n_1 n_2 \dots |) + \sum_r \sum_{q_r' \neq q_r} \left(\frac{n_{q_r'} + 1}{n_{q_r}} \right)^{\frac{1}{2}} (q_r | U_r | q_r') (n_1 n_2 \dots n_{q_r} - 1 \dots n_{q_r'} + 1 \dots |), \quad (5)$$

если повсюду сократить на множитель $\left(\frac{n_1! n_2! n_3! \dots 1}{n!} \right)^{\frac{1}{2}}$. При этом в формуле (5)

$\sum_r (q_r | U_r | q_r)$ обозначает сумму членов типа $q^{(a)} | U | q^{(a)}$ или U_{aa} ; член U_{aa}

встречается в этой сумме столько раз, сколько имеется разных q , которые равны $q^{(a)}$ т. е. n_a

раз. Поэтому эта сумма равна $\sum_a n_a U_a$. Таким же образом двойная сумма $\sum_r \sum_{q_r' \neq q_r}$ в

формуле (5) обозначает сумму членов типа $\left(\frac{n_b + 1}{n_a}\right) \frac{1}{2} U_{ab}(n_1 n_2 \dots n_a - 1 \dots n_b + 1 \dots |)$, где

$b \neq a$; при этом член этого типа встречается в сумме столько раз, сколькими способами можно выбрать r и q_r , удовлетворяющие условию $q_r = q^{(a)}$, $q'_r = q^{(b)}$. Число таких способов равно n_a , т. е. числу способов выбрать r , удовлетворяющее условию $q_r = q^{(a)}$, так как когда r уже выбрано, имеется один и только один способ выбрать $q'_r = q^{(b)}$. Поэтому уравнение (5) приводится к следующему:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (n_1 n_2 \dots |) = \sum_a n_a U_{aa}(n_1 n_2 \dots |) + \sum_a \sum_{b \neq a} n_a^{\frac{1}{2}} (n_b + 1)^{\frac{1}{2}} U_{ab}(n_1 n_2 \dots n_a - 1 \dots n_b + 1 \dots |),$$

что может быть написано также и в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (n_1 n_2 \dots |) = \sum_{ab} n_a^{\frac{1}{2}} (n_b + 1 - \delta_{ab})^{\frac{1}{2}} U_{ab}(n_1 n_2 \dots n_a - 1 \dots n_b + 1 \dots |), \quad (6)$$

где под $n_1 n_2 \dots n_a - 1 \dots n_b + 1 \dots |$ в случае $b = a$ понимается $n_1 n_2 \dots n_a \dots |$.

Собственными значениями каждой из новых динамических переменных n_1, n_2, \dots являются целые числа 0, 1, 2, 3... Если отвлечься от множителя \hbar , то они совпадают с целыми числами переменной действия J в задаче о простом гармоническом осцилляторе, если выбрать произвольную аддитивную постоянную в выражении этой переменной так, как это сделано в уравнении (22) § 41. Поэтому каждое n_a есть динамическая переменная такого же рода, как переменная действия в случае простого гармонического осциллятора, и мы можем ввести канонически-сопряженную с ней угловую переменную w_a или, еще лучше, e^{iw_a} и e^{-iw_a} .

В согласии с уравнением (24) § 41 мы будем иметь:

$$\left. \begin{aligned} e^{iw_a} n_a &= (n_a - 1) e^{iw_a} \\ e^{-iw_a} n_a &= (n_a + 1) e^{-iw_a} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Кроме того, e^{iw_a} , e^{-iw_a} , n_a будут коммутировать с e^{iw_b} , e^{-iw_b} если $b \neq a$.

Новые наблюдаемые e^{iw_a} , e^{-iw_a} , n_b определяются своими матричными представителями в таком представлении, в котором на диагонально, таким же образом, как e^{iw} и e^{-iw} в § 41. Из вида этих матричных представителей следует, что когда e^{-iw_a}

помножается на ψ -символ с представителем $(n_1 n_2 \dots n_a \dots)$, представителем произведения является

$$(n_1 n_2 \dots n_a + 1 \dots),$$

а когда на тот же ψ -символ помножается $e^{i\omega_a}$ представителем произведения будет:

$$(n_1 n_2 \dots n_a - 1 \dots) \text{ при } n_a \geq 1$$

и

$$0 \text{ при } n_a = 0.$$

Это значит, что умножение $e^{-i\omega_a}$ и $e^{i\omega_a}$ на ψ -символ эквивалентно операции, состоящей в замене n_a на $n_a + 1$ (в случае $e^{-i\omega_a}$) и n_a на $n_a - 1$ (в случае $e^{i\omega_a}$), причем об этой последней операции предполагается, что при $n_a = 0$, она дает результат нуль.

Теперь мы можем выразить явно оператор в правой части (6) через n_a и канонически-сопряженные с ними w_a . Этот оператор есть:

$$\begin{aligned} \sum_{ab} n_a^{\frac{1}{2}} (n_b + 1 - \delta_{ab})^{\frac{1}{2}} U_{ab} e^{i\omega_a} e^{-i\omega_b} = \\ = \sum_{ab} n_a^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_a} U_{ab} (n_b + 1)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_b} \end{aligned} \quad (8)$$

(см. формулу 7). Выражение (8) и есть наша функция Гамильтона, выраженная через новые динамические переменные n_a и w_a . При этом U_{ab} являются, конечно, обыкновенными численными множителями.

Этот результат легко обобщить таким образом, чтобы он стал применим к более общему типу функции Гамильтона, а именно к такой функции Гамильтона, которая описывает возмущение нашего ансамбля систем не внешним силовым полем, а некоторой атомной системой; для краткости будем называть эту систему возмущающей; при этом следует учесть действие нашего ансамбля на возмущающую систему. Для описания возмущающей системы мы должны ввести новые динамические переменные; назовем их β . Функция Гамильтона будет иметь вид

$$H = H_p + \sum_r U_r, \quad (9)$$

где H_p , есть функция Гамильтона, описывающая возмущающую систему в отдельности, а

U_r , есть энергия, соответствующая r -той системе ансамбля и состоящая из ее внутренней

энергии и энергии ее взаимодействия с возмущающей системой. H_p будет зависеть только

от β , а U_r будет функция переменных, описывающих r -тую систему и также p . Новую сумму $\sum_r U_r$ мы можем выразить через переменные n_a, w_a таким же образом, как и прежде; при этом результат будет иметь попрежнему вид (8) с той лишь разницей, что U_{ab} будут уже не числами, а функциями от β . Определение U_{ab} будет теперь таково, что представитель U_{ab} в ζ -представлении (где ζ есть любая полная система коммутирующих друг с другом наблюдаемых β) имеет вид

$$(\zeta' | U_{ab} | \zeta'') = (\zeta' q^{(a)} | U | \zeta'' q^{(b)}). \quad (10)$$

Матрица в правой части этого равенства есть представитель Функции U_r в таком представлении, в котором диагональны q_r и ζ . Попрежнему U_{ab} будет коммутировать со всеми n и со всеми w .

Любую функцию динамических переменных, симметрическую по отношению ко всем частицам, возможно выразить через n_a и w_a . Преобразование всего удобнее произвести, рассмотрев эту функцию динамических переменных с такой точки зрения, как если бы она была функцией Гамильтона некоторой механической системы, и преобразуя соответствующее уравнение Шредингера. Общий случай был рассмотрен Иорданом.¹

§ 68. РАССМОТРЕНИЕ АНСАМБЛЕЙ ЭЙНШТЕЙНА-БОЗЕ.

В предыдущем параграфе мы видели, каким образом можно написать гамильтонову функцию ансамбля Эйнштейна-Бозе или даже любую симметрическую функцию динамических переменных всех систем ансамбля в виде функции переменных n_a и w_a , аналогичных переменным

¹ P. Jordan, ZS. F. Phys., 45,774,1927.

действия и угловым переменным простого гармонического осциллятора. Это показывает, что ансамбль Эйнштейна-Бозе динамически эквивалентен набору простых гармоничных осцилляторов; каждому состоянию из полной системы линейно независимых состояний любой, входящей в ансамбль, механической системы соответствует один осциллятор, причем квантовое число осциллятора соответствует числу систем ансамбля, находящихся в этом состоянии.

Набор простых гармонических осцилляторов можно заменить потоком волн, так как каждая составляющая в разложении Фурье динамически эквивалентна простому гармоническому осциллятору. Таким образом наш ансамбль Эйнштейна-Бозе динамически эквивалентен системе волн. Этот факт делает возможным полное примирение между корпускулярной и волновой теориями излучения. Мы можем считать излучение ансамблем фотонов, подчиняющихся статистике Эйнштейна-Бозе, или же системой волн; обе точки зрения не противоречат друг другу и математически вполне эквивалентны.

Мы получим более ясное представление о характере связи между различными системами, образующими бозе-эйнштейновский ансамбль, если рассмотрим частный случай, когда в каждом состоянии находится большое число систем, т.е. когда все n велики. Введем наблюдаемую

$$\xi_a = (n_a + 1)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_a} = e^{-i\omega_a} n_a^{\frac{1}{2}},$$

комплексно-сопряженная которой равна

$$\bar{\xi}_a = e^{i\omega_a} (n_a + 1)^{\frac{1}{2}} = n_a^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_a}.$$

Если не считать численного множителя, наблюдаемая ξ_a аналогична величине $p - iq$ в теории гармонического осциллятора. Мы имеем:

$$\begin{aligned} \xi_a \bar{\xi}_a &= n_a + 1, \\ \bar{\xi}_a \xi_a &= n_a, \end{aligned} \quad (11)$$

откуда

$$\xi_a \bar{\xi}_a - \bar{\xi}_a \xi_a = 1. \quad (12)$$

Теперь мы можем выразить через ξ_a и $\bar{\xi}_a$ функцию Гамильтона (8) соответствующую возмущению нашего ансамбля внешним силовым полем. Результат будет таков:

$$H = \sum_{ab} \bar{\xi}_a U_{ab} \xi_b.$$

Уравнения движения для ξ_a гласят:

$$i\hbar \dot{\xi}_a = \xi_a H - H \xi_a = \sum_b U_{ab} \xi_b. \quad (13)$$

[Это следует из формулы (12) и из того условия, что ξ_a коммутируют с ξ_b и $\bar{\xi}_b$ при $b \neq a$].

Если все n_a велики, то ξ_a также велики и мы можем в правой части равенства (12)

пренебречь единицей. В этом приближении наблюдаемые ξ_a и $\bar{\xi}_a$ будут все коммутировать

друг с другом, а поэтому можно будет их считать числами. Уравнения движения (13) станут обыкновенными дифференциальными уравнениями для численных функций и переменных. Эти уравнения эквивалентны уравнению Шредингера для одной механической системы,

возмущаемой внешним полем; совокупность чисел ξ_a играет роль функции Шредингера

$(q^{(a)} |)$, а U_{ab} является представителем функции Гамильтона. Если нормировать эту

функцию Шредингера к числу n , то можно, так же как это было в § 56, считать, что она относится к ансамблю n независимых систем. Обычная интерпретация функции Шредингера,

а именно та, что $|(q^{(a)} |)^2$ есть число систем в состоянии $q^{(a)}$ в точности соответствует

интерпретации: а на основании уравнения (11). Мы приходим к заключению, что ансамбль большого количества одинаковых систем описывается одними и теми же уравнениями и в том случае, когда системы независимы друг от друга, и в том случае, когда они подчиняются статистике Эйнштейна-Бозе; и в том и в другом случае решения этих уравнений получают одно и то же истолкование.

Так как между ансамблем независимых систем и ансамблем, подчиняющимся статистике Эйнштейна-Бозе, существует физическое различие, то может казаться странным,

что они описываются одинаковыми уравнениями, хотя бы это было возможно только в предельном случае ансамблей, состоящих из очень большого количества систем. Решение этого парадокса заключается в том, что, несмотря на указанные выше пункты сходства, есть существенная разница между математическими трактовками обоих ансамблей, которая уясняется из следующего рассуждения: ансамбль, состоящий из независимых систем только тогда может быть описан с наивысшей возможной в рамках квантовой механики точностью, если нам дано число систем, находящихся в каждом заданном состоянии. Это определяет для каждого состояния $q^{(a)}$ модуль функции Шредингера ($q^{(a)}$), но не ее фазу. Фаза не имеет

физического смысла. Если в результате какого-нибудь вычисления она появится, то необходимо будет усреднить этот результат по всем возможным значениям фазы. С другой стороны в случае ансамбля, подчиненного статистике Эйнштейна-Бозе, все ξ_a являются

наблюдаемыми и их фазы имеют физический смысл наряду с их модулями. Ансамбль Эйнштейна-Бозе не может быть описан с максимальной полнотой, если не даны вместе с модулями с также и их фазы.

Если мы не ограничимся предельным случаем очень больших ансамблей, то различие между бозе-эйнштейновским и независимым ансамблем станет еще более резким. Для того, чтобы получить уравнения для бозе-эйнштейновского ансамбля из уравнений независимого ансамбля, нам придется применить к функции Шредингера нечто вроде квантования, т. е. заменить числа, составляющие эту функцию, наблюдаемыми, удовлетворяющими определенным перестановочным соотношениям.

§ 69. ПРИМЕНЕНИЕ К ФОТОНАМ.

Применяя изложенную теорию к отдельным частным случаям, удобно в качестве q взять константы движения невозмущенной системы при этом $q^{(a)}$ будут соответствовать различным стационарным состояниям невозмущенной системы, а n_a будет число систем в

том или ином стационарном состоянии. В случае фотонов это значит, что в качестве q должны быть взяты три прямоугольные составляющие количества движения и переменная, определяющая поляризацию, в качестве которой можно взять направление электрического вектора линейно-поляризованного фотона. Поляризационная переменная будет все время встречаться в наших вычислениях наряду с количеством движения; однако для краткости мы будем большей частью подразумевать ее, не упоминая о ней явно. Так например, когда мы будем говорить, что такой-то фотон обладает определенным количеством движения, то под этим нужно будет понимать, что он обладает также и определенным состоянием поляризации;

когда мы будем писать p_x, p_y, p_z или— еще короче— p , то под этими буквами нужно

будет подразумевать не только три переменные, определяющие количество движения, но и четвертую переменную, определяющую направление электрического вектора. Далее, если

говорится, что произведено интегрирование по всем возможным значениям p_x, p_y, p_z , то

нужно будет под ним подразумевать также и суммирование по двум линейно-независимым состояниям поляризации.

Можно применить изложенную в конце § 67 теорию к взаимодействию ансамбля фотонов с атомом (атом является возмущающей системой). Энергия фотона U будет состоять из его собственной энергии $h\nu$ и из энергии его взаимодействия с атомом, которую мы

обозначим через V . Отсюда следует:

$$U_{ab} = h\nu_a \delta_{ab} + V_{ab},$$

где ν_a — частота фотона в стационарном состоянии a . Что касается V_{ab} , то они, как и U_{ab} , будут функциями динамических переменных атома. Вся функция Гамильтона [см. формулы (9) и (8)] может быть написана в виде:

$$H = H_p + \sum_{ab} n_a^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_a} U_{ab} (n_b + 1)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_b} = H_p + \sum_a n_a h \nu_a + \\ + \sum_{ab} n_a^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_a} V_{ab} (n_b + 1)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_b} = H_p + H_R + H_Q, \quad (14)$$

где H_R — полная энергия самого излучения, а H_Q — полная энергия взаимодействия.

Фотоны обладают тем особенным свойством, что они могут уничтожаться и появляться, что и происходит в действительности, когда один из них поглощается или испускается атомом. Мы же до сих пор допускали при построении теории бозе-эйнштейновских ансамблей, что полное количество систем, входящих в ансамбль, сохраняется.

Однако можно будет примирить нашу теорию с этой особенностью фотонов, если мы допустим, что для фотонов существует «нулевое» состояние, в котором они не обладают ни энергией ни количеством движения и не могут быть обнаружены физически. Когда фотон поглощается, мы будем говорить, что он переходит в нулевое состояние, а когда он испускается, будем говорить, что он выходит из нулевого состояния. Таким образом постоянство общего числа фотонов может быть сохранено. Так как не существует предела количеству фотонов, которые могут быть испущены, то приходится допустить, что число фотонов, находящихся в нулевом состоянии, бесконечно: $n_0 = \infty$. Вследствие этого угловая

переменная, канонически-сопряженная с n_0 , должна быть константой движения, так как

$$i\hbar \frac{d}{dt} e^{i\omega_0} = e^{i\omega_0} H - H e^{i\omega_0} = (e^{i\omega_0} n_0 - n_0 e^{i\omega_0}) (h\nu_0 + V_{00}) + \\ + [e^{i\omega_0} n_0^{\frac{1}{2}} - n_0^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_0}] \sum_{b \neq 0} e^{i\omega_b} V_{0b} (n_b + 1)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_b} + \\ + \sum_{a \neq 0} n_a^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_a} V_{a0} [e^{i\omega_0} (n_0 + 1)^{\frac{1}{2}} - (n_0 + 1)^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_0}] e^{-i\omega_0} = 0$$

(равенство нулю при $n_0 = \infty$ объясняется тем, что ν_0 и V_{00} равны нулю, а величины в

квадратных скобках при больших n_0 ведут себя как $n_0^{-\frac{1}{2}}$.)

Для того, чтобы функция Гамильтона (14) могла оставаться конечной при бесконечном n_0 , V_{a0} и V_{0a} должны быть бесконечно малы. Мы предположим, что они бесконечно малы

в такой степени, что их произведения на $n_0^{\frac{1}{2}}$ остаются конечными; при этом введем

$$\left. \begin{aligned} V_{a0} (n_0 + 1)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_0} &= V_a \\ V_{0a} n_0^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_0} &= \bar{V}_a \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

где V_a и \bar{V}_a — новые комплексно-сопряженные друг с другом динамические переменные. При этом их можно считать функциями одних динамических переменных, характеризующих атом, как V_{a0} и V_{0a} , ибо остальные множители в левых частях формул (15) являются константами движения (n_0 постоянно потому, что изменения n_0 малы по сравнению с n_0) и с физической точки зрения не важны. Энергию взаимодействия H_Q в формуле (14) можно переписать в виде:

$$H_Q = \sum_a \left\{ V_a n_a^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_a} + \bar{V}_a (n_a + 1)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_a} \right\} + \sum_{ab} V_{ab} n_a^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_a} (n_b + 1)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_b}, \quad (16)$$

где суммирование происходит по всем значениям a и b за исключением $a = 0$ и $b = 0$.

Фотон обладает непрерывным, а не дискретным, рядом стационарных состояний, так как составляющие его количества движения могут принимать какие угодно значения от $-\infty$ до $+\infty$. Поэтому в формуле (16) нужно заменить суммы интегралами. Сделать это вполне строго было бы не легко, так как это значило бы, что нужно применить квантовую механику к системе, степени свободы которой могут быть расположены лишь в непрерывный ряд; для этого понадобились бы новый способ обозначений и новый математический аппарат. Но нас интересует энергия взаимодействия (16) главным образом в одном частном случае, а именно в предельном случае больших n , когда можно применять к излучению и классическую теорию: ведь мы хотим сравнить для этого случая энергию взаимодействия с ее выражением, вычисленным из классической электромагнитной теории, и получить таким образом значения V_a и V_{ab} . В этом предельном случае переход от суммы к интегралам весьма легок.

Пусть σ_a означает число состояний фотона (с определенной поляризацией), приходящихся в p -пространстве с координатами p_x, p_y, p_z , на единицу объема, расположенного вокруг точки, соответствующей количеству движения p_a . Допустим, что σ_a — есть любая функция от p_a , ограниченная лишь тем условием, что все ее значения должны быть очень велики (16); исследуем, к какому пределу стремится (16), когда σ_a бесконечно возрастает. Число фотонов с определенной поляризацией, приходящихся на единицу объема в пространстве p_x, p_y, p_z , вокруг p_a , равно

$$\eta_a = n_a \sigma_a,$$

если только можно считать, что n_a изменяется как-то примерно непрерывно при переходе от одного состояния к соседнему. Пусть $(p' | V | p'')$ будет матрицей, ¹ представляющей энергию взаимодействия V одного фотона в обыкновенном p -представлении для этого фотона. Это обыкновенное p -представление отличается от того, которым мы до сих пор пользовались в

этой главе и в котором V_{ab} было представителем V , лишь весовым множителем. В прежнем представлении вес, приписываемый небольшой области δp_a пространства p_x, p_y, p_z , равнялся δp_a , а в новом представлении он равен числу дискретных состояний в этой области, т. е. $\sigma_a \delta p_a$. Весовую функцию поэтому придется изменить, придав ей множитель σ_a . Приведенное в конце § 24 правило показывает, что матричные элементы обоих представлений связаны соотношением

$$(p^{(a)} | V | p^{(b)}) = V_{ab} (\sigma_a \sigma_b)^{\frac{1}{2}}. \quad (17)$$

¹ В действительности матричные элементы этой матрицы являются не числами а функциями динамических переменных, описывающих атом; но это не делает изложенное доказательство неправильным. Представление является «неполным», и посредством уравнений типа (10) можно свести его представителен к другому «полному» представлению.

Таким же образом матричные элементы $(p' | V | 0)$, $(0 | V | p')$, относящиеся к переходу в нулевое состояние или из нулевого состояния, связаны с V_a и \bar{V}_a посредством формул:

$$(p^{(a)} | V | 0) = V_a \sigma_a^{\frac{1}{2}}, \quad (0 | V | p^{(a)}) = \bar{V}_a \sigma_a^{\frac{1}{2}}.$$

Теперь мы можем выразить энергию взаимодействия (16) для того случая, когда n велики и могут считаться коммутирующими с w , в следующем виде:

$$\begin{aligned} H_Q &= \sum_a \left\{ (p^{(a)} | V | 0) \eta_a^{\frac{1}{2}} e^{i w a} + (0 | V | p^{(a)}) \eta_a^{\frac{1}{2}} e^{-i w a} \right\} \sigma_a^{-1} + \\ &+ \sum_{ab} (p^{(a)} | V | p^{(b)}) \eta_a^{\frac{1}{2}} \eta_b^{\frac{1}{2}} e^{i(w_a - w_b)} \sigma_a^{-1} \sigma_b^{-1} = \\ &= \int \left\{ (p^{(a)} | V | 0) \eta_a^{\frac{1}{2}} e^{i w a} + (0 | V | p^{(a)}) \eta_a^{\frac{1}{2}} e^{-i w a} \right\} dp_a + \\ &+ \int \int (p^{(a)} | V | p^{(b)}) \eta_a^{\frac{1}{2}} \eta_b^{\frac{1}{2}} e^{i(w_a - w_b)} dp_a dp_b. \end{aligned} \quad (18)$$

Тот факт, что в окончательном результате с уже не фигурируют, оправдывает наш способ трактовки непрерывного ряда состояний в качестве предельного случая дискретного ряда.

§ 70. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ФОТОНОМ И АТОМОМ.

Теперь мы определим матричные элементы $(p^{(a)} | V | 0)$, $(0 | V | p^{(a)})$ и $(p^{(a)} | V | p^{(b)})$, сравнивая (18) с классическим выражением энергии взаимодействия между атомом и полем излучения. Предположим для простоты, что атом состоит из одного электрона, движущегося в электростатическом силовом поле. Поле излучения может быть описано с помощью четырехмерного вектор-потенциала, который в известных пределах произволен и может быть выбран так, чтобы его временная составляющая равнялась нулю. Поле при этом вполне описывается магнитным потенциалом A_x, A_y, A_z или A . Изменение, привносимое полем в гамильтонову функцию атома, как было указано в начале § 48, равно:

$$\frac{1}{2m} \left\{ \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \mathbf{p}^2 \right\} = \frac{e}{mc} (\mathbf{p}, \mathbf{A}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 = \\ = \frac{e}{c} (\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{A}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2. \quad (19)$$

Таково то классическое выражение энергии взаимодействия, которое нам надлежит сравнивать с (18). Вектор \mathbf{A} в формуле (19), строго говоря, должен быть магнитным потенциалом в той точке, в которой в данный момент находится электрон; но будет достаточно хорошим приближением, если мы допустим, что \mathbf{A} есть магнитный потенциал и некоторой определенной точке атома, например в ядре (при этом предполагается, что мы не имеем дела с излучением, длина волны которого мала по сравнению с размерами атома).

Для того, чтобы сравнить (18) и (19), необходимо сперва разложить поле излучения на плоские бегущие волны. Электрический и магнитный векторы такой волны, обладающей частотой ν и бегущей по направлению, которое характеризуется количеством движения p соответствующих фотонов, имеют вид

$$\mathbf{E}_p \cos \left[(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{1}{\hbar} + 2\pi\nu t + \gamma_p \right], \quad \mathbf{H}_p \cos \left[(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{1}{\hbar} + 2\pi\nu t + \gamma_p \right],$$

где векторы ξ_p и \mathbf{H}_p имеют одинаковую длину и при этом перпендикулярны друг ко другу и к направлению распространения волны. Суммарное электрическое и магнитное поле может быть представлено в виде следующих интегралов Фурье:

$$\mathbf{E} = \int \mathbf{E}_p \cos \left[(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{1}{\hbar} + 2\pi\nu t + \gamma_p \right] dp, \\ \mathbf{H} = \int \mathbf{H}_p \cos \left[(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \frac{1}{\hbar} + 2\pi\nu t + \gamma_p \right] dp,$$

где E_p , H_p и γ_p являются функциями количества движения p .

Нам нужно распределить энергию этого поля по различным составляющим разложения Фурье. В момент времени $t = 0$ имеем:

$$\int \mathbf{E}^2 dx = \int \int (\mathbf{E}_p, \mathbf{E}_{p'}) dp dp' \int \cos \left[\frac{(\mathbf{x}, \mathbf{p})}{\hbar} + \gamma_p \right] \cos \left[\frac{(\mathbf{x}, \mathbf{p}')}{\hbar} + \gamma_{p'} \right] dx = \\ = \int \int (\mathbf{E}_p, \mathbf{E}_{p'}) dp dp' \cdot \frac{1}{2} h^3 \left\{ \cos(\gamma_p + \gamma_{p'}) \delta(p + p') + \right. \\ \left. + \cos(\gamma_p - \gamma_{p'}) \delta(p - p') \right\}$$

(интегрирование по x совершено наподобие того интегрирования по q которое было выполнено в § 35). Таким образом:

$$\int \mathbf{E}^2 dx = \frac{1}{2} h^3 \int \{ (\mathbf{E}_p, \mathbf{E}_{-p}) \cos(\gamma_p + \gamma_{-p}) + \mathbf{E}_p^2 \} dp.$$

Аналогично этому:

$$\int \mathbf{H}^2 dx = \frac{1}{2} h^3 \int \{ (\mathbf{H}_p, \mathbf{H}_{-p}) \cos(\gamma_p + \gamma_{-p}) + \mathbf{H}_p^2 \} dp.$$

На основании упомянутого соотношения между векторами E_p и H_p , имеем

$E_p^2 = H_p^2$ и, кроме того, $(E_p, E_{-p}) = -(H_p, H_{-p})$. Поэтому полная энергия равна:

$$\frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2) dx = \frac{h^3}{8\pi} \int \mathbf{E}_p^2 dp,$$

так что на единицу объема в пространстве p_x, p_y, p_z , приходится 1 энергия в количестве

$$\frac{h^3}{8\pi p^2}. \text{ Это можно приравнять выражению } h\nu \frac{\eta_p}{p} \text{ (значение } \eta \text{ см. предыдущий}$$

параграф). Таким образом:

$$E_p^2 = \frac{8\pi}{h^2} \nu_p \eta_p.$$

Вектор-потенциал A может быть представлен в виде интеграла Фурье совершенно таким же образом, как E и H . Мы будем иметь

$$A = - \int A_p \sin \left[\frac{(\mathbf{x}, \mathbf{p})}{\hbar} + 2\pi\nu t + \gamma_p \right] dp, \quad (20)$$

где вектор A совпадает с E по направлению, а длина вектора A определяется формулой

$$A_p^2 = \left(\frac{c}{2\pi\nu_p} \right)^2 E_p^2 = \frac{2c^2}{\pi h^2 \nu_p} \eta_p. \quad (21)$$

В начале координат вектор A имеет значение:

$$A = - \int A_p \sin [2\pi\nu t + \gamma_p] dp = \int A_p \cos w_p dp,$$

где w_p есть угловая переменная такого же рода, как те, которые входят в формулу (18).

Подставляя это значение A в энергию взаимодействия (19), мы находим с помощью формулы (21)

$$\begin{aligned} \frac{e}{c} \int (\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{A}_p) \cos w_p dp + \frac{e^2}{2mc^2} \int \int (\mathbf{A}_p, \mathbf{A}_{p'}) \cos w_p \cos w_{p'} dp dp' = \\ = \frac{e}{h} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int \frac{1}{V_{\nu_p}} \dot{x}_p V_{\eta_p} \cos w_p dp + \\ + \frac{e^2}{\pi mh^2} \int \int \frac{1}{V_{\nu_p \nu_{p'}}} \cos \vartheta_{pp'} V_{\eta_p \eta_{p'}} \cos w_p \cos w_{p'} dp dp', \end{aligned} \quad (22)$$

где x_p есть проекция вектора x на направление A_p , или E_p , а $\vartheta_{pp'}$ есть 1 угол между

A_p и $A_{p'}$.

Если переписать формулу (22), подставив $\frac{1}{2}[e^{iw} + e^{-iw}]$ вместо $\cos w$, и затем сравнить с формулой (18), то получится:

$$\left. \begin{aligned} (p | V | 0) = (0 | V | p) &= \frac{e}{h} \frac{1}{\sqrt{2\pi\nu_p}} \dot{x}_p \\ (p | V | p') &= \frac{e^2}{2\pi mh^2} \frac{1}{V_{\nu_p \nu_{p'}}} \cos \vartheta_{pp'} \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

Но в формуле (22) при этом окажутся также члены, не имеющие аналогов в формуле (18): это будут те члены, которые содержат $e^{i(w_p + w_{p'})}$ и $e^{-i(w_p + w_{p'})}$. Такая неувязка

доказывает недостаточность того допущения, что взаимодействие атома с ансамблем фотонов описывается гамильтоновой функцией типа (9). Добавочные члены в формуле (22) соответствуют переходам, в которых одновременно поглощаются или испускаются сразу два фотона; возможность таких переходов требует более сложного выражения энергии взаимодействия, чем (9). Однако физические следствия существования этих добавочных членов малы и несущественны; поэтому мы можем ими пренебречь.

Уравнения (23) дадут теперь энергию взаимодействия V между атомом и отдельным фотоном. Эту энергию неудобно выразить явно через динамические переменные. Полное представление V можно получить, введя представление Гейзенберга для всех переменных, описывающих атом. Если обозначить через a' , a'' , ..., различные стационарные состояния изолированного атома, то мы будем иметь

$$\left. \begin{aligned} (p \ a' | V | 0 \ a'') &= (0 \ a' | V | p \ a'') = \frac{e}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi\nu_p}} (a' | \dot{x}_p | a'') \\ (p' \ a' | V | p'' \ a'') &= \frac{e^2}{2\pi m \hbar^2} \frac{1}{\sqrt{\nu_{p'} \nu_{p''}}} \cos \vartheta_{p'p''} \delta_{a'a''} \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

При этом, как было упомянуто выше, каждое p обозначает не только три прямоугольные составляющие количества движения фотона, но также и поляризационную переменную, определяющую направление электрической силы. Матричный элемент

$(a' | x_p | a'')$ есть проекция

вектора $(a' | x | a'')$ на направление электрической силы, определяемое вектором p ; подобно

этому также и $\vartheta_{p'p''}$ есть угол между направлениями электрической силы $E'_{p'}$ и $E''_{p''}$.

§ 71. ИСПУСКАНИЕ, ПОГЛОЩЕНИЕ И РАССЕЯНИЕ ЛУЧИСТОЙ ЭНЕРГИИ.

Подставляя в формулы главы X значения матричных элементов из формулы (24), мы можем непосредственно определить коэффициенты испускания, поглощения и рассеяния лучистой энергии. Для определения коэффициента испускания можно использовать формулу (56) главы X. Она показывает, что для атома, находящегося в состоянии a' , вероятность самопроизвольно испустить фотон в течение единицы времени на единицу телесного угла и перейти в то же время в состояние a'' с меньшей энергией, равна

$$\frac{4\pi^2}{\hbar} \frac{WP}{c^2} \left| \frac{e}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi\nu}} (a' | \dot{x}_p | a'') \right|^2. \quad (25)$$

Энергия W и количество движения P фотона с частотой ν определяются формулами:

$$W = h\nu, \quad P = \frac{h\nu}{c}.$$

Далее, из формулы Гейзенберга (48) в главе VI следует:

$$(a' | \dot{x}_p | a'') = 2\pi i\nu (a' | x_p | a''),$$

где $\nu(a'a'')$ есть частота, соответствующая переходу из состояния a' в состояние a'' ; в нашем случае эта частота как раз равна частоте ν испускаемого излучения. Подставляя все это в (25), мы получим для коэффициента испускания выражение

$$\frac{(2\pi\nu)^3}{hc^3} |(a' | e x_p | a'')|^2. \quad (26)$$

Для того, чтобы получить количество энергии, испускаемой на единицу телесного угла в течение единицы времени, мы должны помножить (26) на $h\nu$. Интегрируя по всем телесным углам, мы получим для испускаемого в единицу времени количества энергии выражение

$$\frac{4}{3} \frac{(2\pi\nu)^4}{c^3} |(a' | e \mathbf{x} | a'')|^2. \quad (27)$$

Это совпадает с выражением (50) в главе VI и служит оправданием гипотезы Гейзенберга о физическом смысле его матричных элементов.

Таким же образом коэффициент поглощения, определяемый из формулы (59) главы X, дает в частном случае фотонов

$$\frac{4\pi^2 h^2 W}{c^2 P} \left| \frac{e}{h} \frac{1}{\sqrt{2\pi\nu}} (\alpha' | x_p | \alpha'') \right|^2 = \frac{8\pi^3 \nu}{c} |(\alpha' | e x_p | \alpha'')|^2.$$

Этот коэффициент поглощения относится к падающему пучку, в котором через единицу времени проходит один фотон на спектральный промежуток, соответствующий по своей длине единице энергии. Если, как это принято делать в задачах, относящихся к излучению, мы возьмем спектральный промежуток, соответствующий по своей длине единице частоты, то коэффициент поглощения примет вид

$$\frac{8\pi^3 \nu}{hc} |(\alpha' | e x_p | \alpha'')|^2.$$

Этот результат совпадает с формулой (24) § 53, если только в эту формулу подставить вместо E энергию фотона $h\nu$. Таким образом элементарная теория § 53, рассматривавшая поле лучистой энергии как внешнее возмущение, приводит к правильному значению коэффициента поглощения. Среднее поглощение по всем возможным направлениям и состояниям поляризации падающего пучка будет:

$$\frac{8\pi^3 \nu}{3 ch} |(\alpha' | e \mathbf{x} | \alpha'')|^2,$$

а это в точности равно коэффициенту испускания (27), деленному $\frac{8\pi h^3}{c}$

Такое отношение коэффициента поглощения к коэффициенту испускания, легко может быть выведено также и из элементарных статистических соображений.

Рассмотрим теперь рассеяние. Истинный коэффициент рассеяния определяется формулой (38) главы X. Такое рассеяние фотонов не будет сопровождаться изменениями состояния атома, что объясняется присутствием множителя $\delta_{a'a''}$ в выражении (24) матричного элемента $(p'a' | V | p''a'')$. Итак конечная энергия фотона W' будет равна его начальной энергии W^0 . Коэффициент рассеяния принимает вид:

$$\frac{e^4}{m^2 c^4} \cos^2 \theta_{p'p''}$$

Такую же формулу дает классическая теория для рассеяния лучистой энергии свободным электроном. Мы видим, что истинное рассеяние лучистой энергии электроном атома не зависит от самого атома и правильно определяется классической теорией. Следует помнить, что этот результат верен только в том случае, когда длина волны излучения велика по сравнению с размерами атома.

Истинное рассеяние является чисто математическим понятием и не может быть экспериментально отделено от полного рассеяния, определенного формулой (44) главы X. Посмотрим, во что превращается это полное рассеяние в случае фотонов. Применяя формулу

(44) главы X, нужно произвести в ней небольшое изменение. Суммирование \sum_R в этой

формуле может считаться относящимся к двойным переходам, состоящим из переходов из начального состояния в некоторое состояние k и затем снова из состояния k в конечное состояние. Первый переход может быть поглощением падающего фотона, а второй испусканием соответствующего «рассеянного» фотона; но может случиться также, что

первый переход есть испускание, а второй поглощение. При выводе, данном в главе X, принимались во внимание только двойные переходы первого типа, но из общего смысла примененного в X главе метода ясно, что когда речь идет о фотонах, то в суммирование Σ_R следует включить двойные переходы и того и другого типа.

Для двойного перехода, состоящего из поглощения с последующим испусканием, мы должны положить:

$$(k | V | p^0 \alpha^0) = (0 \alpha'' | V | p^0 \alpha^0), \quad (p' \alpha' | V | k) = (p' \alpha' | V | 0 \alpha''),$$

$$E - E_k = h \nu^0 + H_p(\alpha^0) - H_p(\alpha'') = h [\nu^0 - \nu(\alpha'' \alpha^0)],$$

где нулем отмечено начальное состояние, одним штрихом — конечное, а двумя — промежуточное состояние k . При этом ν_0 обозначает частоту падающего фотона и

$$h \nu(\alpha'' \alpha^0) = H_p(\alpha'') - H_p(\alpha^0).$$

Таким же образом для двойных переходов, состоящих из испускания и следующего за ним поглощения, нужно положить

$$(k | V | p^0 \alpha^0) = (p' \alpha' | V | 0 \alpha^0), \quad (p' \alpha' | V | k) = (0 \alpha' | V | p^0 \alpha''),$$

$$E - E_k = h \nu^0 + H_p(\alpha^0) - H_p(\alpha') - h \nu' = -h [\nu' + \nu(\alpha' \alpha^0)],$$

где ν' — частота рассеянного фотона (в промежуточном состоянии k существуют два фотона — с частотами ν_0 и ν'). Выражение коэффициента рассеяния теперь приводится к:

$$\frac{e^4}{h^2 c^4} \frac{\nu'}{\nu^0} \left| \frac{\hbar}{m} \cos \theta_{01} \delta_{\alpha' \alpha''} + \sum_{\alpha''} \left\{ \frac{(\alpha' | x_1 | \alpha'') (\alpha'' | x_0 | \alpha^0)}{\nu^0 - \nu(\alpha'' \alpha^0)} - \frac{(\alpha' | x_0 | \alpha'') (\alpha'' | x_1 | \alpha^0)}{\nu' + \nu(\alpha'' \alpha^0)} \right\} \right|^2,$$

где x_p^0 и $x_{p'}$ (т. е. составляющие вектора x по направлениям электрических векторов

падающего и рассеянного фотона) обозначены через x_0 и x_1 , и таким же образом θ_{01}

написано вместо $\theta_{p' p^0}$ (угол между этими электрическими векторами). Если в (28)

выразить x через x , то получится:

$$\frac{(2\pi e)^4 \nu'}{h^2 c^4 \nu^0} \left| \frac{\hbar}{2\pi m} \cos \theta_{01} \delta_{\alpha' \alpha''} - \sum_{\alpha''} \nu(\alpha' \alpha'') \nu(\alpha'' \alpha^0) \left\{ \frac{(\alpha' | x_1 | \alpha'') (\alpha'' | x_0 | \alpha^0)}{\nu^0 - \nu(\alpha'' \alpha^0)} - \frac{(\alpha' | x_0 | \alpha'') (\alpha'' | x_1 | \alpha^0)}{\nu' + \nu(\alpha'' \alpha^0)} \right\} \right|^2. \quad (29)$$

Формулу (29) можно упростить с помощью квантовых условий. Мы имеем:

$$x_1 x_0 - x_0 x_1 = 0,$$

откуда следует:

$$\sum_{\alpha''} \{ (\alpha' | x_1 | \alpha'') (\alpha'' | x_0 | \alpha^0) - (\alpha' | x_0 | \alpha'') (\alpha'' | x_1 | \alpha^0) \} = 0. \quad (30)$$

Кроме того

$$x_1 \dot{x}_0 - \dot{x}_0 x_1 = \frac{x_1 p_0 - p_0 x_1}{m} = \frac{i\hbar}{m} \cos \vartheta_{01}.$$

откуда:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha''} \{ (\alpha' | x_1 | \alpha'') v(\alpha'' \alpha^0) (\alpha'' | x_0 | \alpha^0) - v(\alpha' \alpha'') (\alpha' | x_0 | \alpha'') (\alpha'' | x_1 | \alpha^0) \} = \\ = \frac{1}{2\pi i} \frac{i\hbar}{m} \cos \vartheta_{01} \delta_{\alpha'' \alpha'} = \frac{\hbar}{2\pi m} \cos \vartheta_{01} \delta_{\alpha'' \alpha'}. \end{aligned} \quad (31)$$

Помножая формулу (30) на v' и складывая с (31), мы получим:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha''} \{ (\alpha' | x_1 | \alpha'') (\alpha'' | x_0 | \alpha^0) [v' + v(\alpha'' \alpha^0)] - (\alpha' | x_0 | \alpha'') (\alpha'' | x_1 | \alpha^0) [v' + v(\alpha'' \alpha^0)] \} = \\ = \frac{\hbar}{2\pi m} \cos \vartheta_{01} \delta_{\alpha'' \alpha'}. \end{aligned}$$

Подставляя в (29) это выражение $\frac{\hbar}{2\pi m} \cos \vartheta_{01} \delta_{\alpha'' \alpha'}$, и производя сокращения, основанные

на тождественном соотношении между частотами ν , мы получим выражение:

$$\frac{(2\pi e)^4}{\hbar^2 c^4} \nu^0 \nu'^3 \left| \sum_{\alpha''} \left\{ \frac{(\alpha' | x_1 | \alpha'') (\alpha'' | x_0 | \alpha^0)}{\nu^0 - \nu(\alpha'' \alpha^0)} - \frac{(\alpha' | x_0 | \alpha'') (\alpha'' | x_1 | \alpha^0)}{\nu' + \nu(\alpha'' \alpha^0)} \right\} \right|^2,$$

дающее коэффициент рассеяния в виде эффективной площади, предоставленной фотону на единицу телесного угла рассеяния. Выражение (32) известно под названием формулы дисперсии Крамерса и Гейзенберга, так как ее впервые получили названные авторы на основании аналогий с классической теорией дисперсии.

Тот факт, что отдельные члены формулы (29) могут быть скомбинированы так, чтобы получилась формула (32), оправдывает сделанное в главе X при выводе формулы (44) допущение о том, что матричные элементы $(p'a' | V | p''a'')$ энергии взаимодействия представляют величины второго порядка малости по сравнению с $(p'a' | V | k)$. Это допущение следует считать оправдавшимся по крайней мере в том случае, когда рассеиваемыми частицами являются фотоны.

§ 72. ЗАКОНЫ ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЙНШТЕЙНА.

В предыдущем параграфе мы определили коэффициенты вероятности поглощения, испускания и рассеяния фотона атомом. При этом мы имели дело только с одним или в крайнем случае с двумя фотонами, взаимодействующими с атомом; энергия взаимодействия определялась формулой (24). Для того, чтобы сделать нашу теорию излучения полной, необходимо узнать законы взаимодействия большого количества фотонов с атомом. Пусть атом находится в падающем пучке лучистой энергии, содержащем много фотонов; как зависит вероятность поглощения, испускания и рассеяния от интенсивности пучка?

На этот вопрос, разумеется, нельзя ответить на основании одной только формулы (24), определяющей энергию взаимодействия в случае одного фотона. Необходимо снова рассмотреть общее выражение энергии взаимодействия (16) в случае многих фотонов, а это значит, что нам придется от сумм перейти вновь к интегралам. Мы воспользуемся общим результатом (28) в § 54, согласно которому вероятность перехода пропорциональна квадрату абсолютной величины относящегося к этому переходу матричного элемента возмущающей энергии.

Рассмотрим акт поглощения, в котором число фотонов в состоянии a уменьшается от n_a до $n_a - 1$ и в то же время атом переходит из состояния a^0 в состояние a' . Вероятность такого процесса будет пропорциональна квадрату абсолютной величины матричного элемента

$$(n_1 n_2 \dots n_a \dots \alpha^0 | H_Q | n_1 n_2 \dots n_a - 1 \dots \alpha')$$

полной энергии взаимодействия H_Q . Единственный член в выражении (16) энергии H_Q ,

способный войти в этот матричный элемент, есть $V_a n_a \frac{1}{2} e^{i\omega} f$. Отсюда следует, что этот

матричный элемент пропорционален $n_a \frac{1}{2}$, а значит вероятность перехода пропорциональна

n_a . Переход от сумм к интегралам становится совершенно тривиальным; окончательный результат гласит, что вероятность поглощения пропорциональна интенсивности падающего пучка.

Аналогично этому, желая рассмотреть акт испускания, в котором (текст отсутствует) фотонов в состоянии a увеличивается от n_a до $n_a + 1$, мы (текст отсутствует) иметь дело с матричным элементом

$$(n_1 n_2 \dots n_a \dots \alpha^0 | H_Q | n_1 n_2 \dots n_a + 1 \dots \alpha').$$

(текст отсутствует) Единственный член в выражении (16), входящий в этот матричный элемент, есть $V_a (n_a + 1) \frac{1}{2} e^{-i\omega} a$. Поэтому матричный элемент пропорционален $(n_a + 1) \frac{1}{2}$,

а вероятность перехода пропорциональна $n_a + 1$. Таким же точно образом акт рассеяния, в

котором число фотонов в состоянии a уменьшается от n_a до $n_a - 1$ и в то же время число

фотонов в состоянии b увеличивается от n_b до $n_b + 1$, зависит от члена

$V_{ab} n_a \frac{1}{2} e^{i\omega} a (n_b + 1) \frac{1}{2} e^{-i\omega} b$, если речь идет об истинном рассеянии, в противном же

случае от произведения двух членов $V_a n_a \frac{1}{2} e^{i\omega} a$ и $\bar{V}_b (n_b + 1) \frac{1}{2} e^{-i\omega} b$. И в том и в другом

случае вероятность рассеяния пропорциональна $n_a (n_b + 1)$. Для истолкования этих

результатов необходимо внимательно совершить переход от дискретной совокупности стационарных состояний фотонов к непрерывным.

Предположим, что дано распределение n_a фотонов по дискретным состояниям a . Для того, чтобы получить плотность этих фотонов в обыкновенном пространстве, нужно предположить, что они представлены функцией Шредингера $(p^{(a)} |) = n_a \frac{1}{2}$, и затем

преобразовать эту функцию к (x, y, z) - представлению посредством функции преобразования $(x|p^{(a)})$. Эта функция преобразования должна иметь вид

$$(x|p^{(a)}) = h^{-\frac{3}{2}} \exp i \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{p}^a)}{\hbar} \sigma_a^{-\frac{1}{2}}.$$

От значения, данного формулой (36) главы VI, она отличается множителем $\sigma_a^{-\frac{1}{2}}$, так как весовая функция нашего p - представления отличается от обычной весовой функции p - представления множителем σ_a , что мы видели при выводе ур-ия (17). Итак:

$$(x|) = \sum_a (x|p^{(a)}) (p^{(a)}|) = h^{-\frac{3}{2}} \sum_a \exp i \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{p}^a)}{\hbar} n_a \frac{1}{2} \sigma_a^{-\frac{1}{2}}.$$

Предположим, что n_a равно единице в определенном состоянии p и равно нулю во всех прочих. Тогда:

$$(x|) = h^{-\frac{3}{2}} \exp i \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{p})}{\hbar} \sigma^{-\frac{1}{2}},$$

и плотность фотонов будет:

$$|(x|)|^2 = h^{-3} \sigma^{-1}.$$

В случае произвольного распределения n_a плотность фотонов получится в результате сложения плотностей, относящихся (текст отсутствует) состояниям; поэтому она будет равна

$$h^{-3} \sum_a n_a \sigma_a^{-1} = h^{-3} \int n_a dp_a.$$

Итак число фотонов в единице объема обыкновенного пространства на единицу объема p -пространства равно $h^{-3} n_a$, а соответствующая энергия равна $h^{-2} \nu n_a$. Интенсивность в спектральном промежутке, длина которого соответствует единице частоты, в с больше, чем плотность энергии на единицу телесного угла в том промежутке; поэтому эта интенсивность равна

$$I_a = \frac{h \nu_a^3}{c^2} n_a.$$

Вероятность испускания, пропорциональная, как мы видели, $n_a + 1$, должна быть,

$$h \nu_a^3$$

следовательно, пропорциональна $I_a + \frac{h \nu_a^3}{c^2}$. Это значит, что когда падающего излучения

нет, все же существует некоторое испускание (которого требует и формула 26), но испускание должно увеличиваться при наличии падающего в том же направлении излучения, обладающего той же частотой и состоянием поляризации, что и рассматриваемое испускаемое излучение. Таким образом рассмотренная здесь теория излучения дополняет несовершенную теорию, данную в § 53, и дает значение отношения индуцированного испускания к

спонтанному в полном согласии с рассмотренными в конце § 33 законами излучения Эйнштейна.

Таким же образом можно показать, что вероятность рассеяния из состояния a в состояние b , которая, как мы видели, пропорциональна $n_a (n_b + 1)$, должна быть

пропорциональна $I_a \left(I_b + \frac{h\nu_b^3}{c} \right)$. Отсюда видно, что и рассеяние излучения обладает

свойством усиливаться под влиянием излучения, падающего в том же направлении и обладающего той же частотой, что и рассеянное излучение. Действительно, эта способность к усилению под влиянием излучения имеет очень общее значение, как показали Эйнштейн и Эренфест¹ из общих статистических соображений.

¹ A. Einstein und P. Ehrenfest, ZS. i. Phys. 19, 301, 1923 См. также W. Pauli, Z.S. f. Phys. 18, 272, 1923.

ХІІІ. РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОНА.

§ 73. РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТРАКТОВКА ЗАДАЧИ ОБ ОДНОЙ ЧАСТИЦЕ:

Теория специальных механических систем, изложенная в главе VI и дальше, не имела ничего общего с теорией относительности Мы все время имели дело с одной определенной лоренцовой системой отсчета и не предъявляли к теории того существенного требования что результаты этой теории не должны зависеть от выбора системы отсчета. Посмотрим теперь, какого рода изменениям может подвергнуться теория, если применить к ней требования теории относительности.

С большой достоверностью можно утверждать, что общая теория состояний и наблюдаемых величин, изложенная в главах II-V останется верной и в релятивистской трактовке механических систем. Но нам с самого начала приходится решить, с какими наблюдаемыми нам придется иметь дело. Очень невыгодно взять в качестве таких наблюдаемых значения ξ_t динамической переменной ξ в момент времени t . Если в нашей теории будут встречаться наблюдаемые ξ_t , то они должны входить на равных правах с наблюдаемыми ξ_τ ; где ξ_τ представляют значения динамической переменной ξ ; в момент времени τ , отсчитанный в какой-то другой лоренцовой системе отсчета. Поэтому нам придется ввести соотношения между ξ_t и ξ_τ , а эти соотношения будут, вообще говоря, очень сложными и искусственными, так как в них придется связывать между собою отдаленные части пространства-времени. Во всяком случае величины ξ_t не принадлежат к числу таких, которые легко поддаются наблюдению; трудно было бы ожидать, что эти величины могут играть основную роль в теории. Возможным выходом из затруднения явилось бы построение теории, имеющей дело только с полем, т. е. такой теории, в которой наблюдаемыми являются величины, характеризующие поле в различных точках пространства-времени. Повидимому это наиболее непосредственный способ релятивистской трактовки механических систем, но для этого требуется сложный математический аппарат, вследствие чего теория становится слишком трудной для практических применений.¹

Трудности релятивистской трактовки оказываются гораздо менее жестокими в том случае, когда речь идет о движении одной частицы в заданном силовом поле. Если взять такое представление, в котором наблюдаемые x_t, y_t, z_t , определяющие положение частицы в момент времени t , диагональны, то волновой функцией, изображающей состояние системы, будет функция (x_t, y_t, z_t) трех переменных x, y, z , зависящих от параметра t , а это то же самое, что функция $(xyz|t)$ четырех переменных x, y, z, t . Областью определения нашей волновой функции оказывается таким образом обыкновенная пространственно-временная протяженность, что дает нам возможность подойти к задаче элементарно и применить соображения, которые не могут быть обобщены на случай более сложных механических систем. Так например мы можем ожидать, что все физические условия в любой точке пространства-времени будут зависеть только от значения волновой функции в этой точке и" в соседних точках, вследствие чего волновая функция должна быть или инвариантной по отношению к преобразованиям Лоренца, или по крайней мере преобразовываться по очень простым законам.

Посмотрим, каким образом следует ввести в нашу теорию количество движения частицы. Значение слагающей количества движения по некоторому определенному направлению в определенный момент времени представляет довольно искусственно построенную величину даже в том случае, когда система состоит только из одной частицы; трудно ожидать, чтобы эта величина играла в теории важную роль. В § 36 мы видели, что эта наблюдаемая связана с некоторым оператором пространственного смещения, действие которого на волновую функцию заключается в том, что в данный определенный момент времени он заменяет волновую функцию ее градиентом по данному направлению, значения же новой волновой функции в другие моменты времени определяются уже из волнового уравнения. В релятивистской теории естественнее всего ввести такой оператор, который

¹ См. Hesenberg und Pauli, ZS. f. Phys. 56, 1. 1929, 59, 168, 1929

приводится к одному и тому же смещению для всех моментов времени, т. е. представляет дифференцирование типа $\frac{\partial}{\partial x}$ волновой функции $(xyz|t)$, содержащей четыре переменные. В результате действия такого оператора на волновую функцию появляется новая волновая функция, которая, вообще говоря, не удовлетворяет волновому уравнению, а потому не изображает ни одного возможного состояния системы. Поэтому такой оператор не есть наблюдаемая. Тем не менее мы можем ожидать, что оператор $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ будет играть в теории роль количества движения несмотря на то обстоятельство, что он относится не к одному определенному моменту времени, а ко всем моментам времени сразу, вследствие чего наблюдение этой величины не имеет определенного смысла.

Поэтому мы вводим операторы:

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \quad (1)$$

играющие роль слагающих количества движения, а также и оператор

$$W = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (2)$$

относящийся к смещению во времени и играющий роль энергии. Все эти операторы могут действовать на волновую функцию, но так как результат их действия на волновую функцию может не удовлетворять волновому уравнению и следовательно не изображать возможного состояния системы, то они не являются наблюдаемыми. Тем не менее к ним можно применять ту же самую алгебру, которая применяется к наблюдаемым: они удовлетворяют всем аксиомам обыкновенной алгебры, за исключением коммутативного закона умножения. Однако не вся алгебраическая схема главы II будет здесь применима, так как $\alpha\psi$ не есть число, если α такой оператор, который не является в то же время наблюдаемой. В настоящей главе окажется более удобным рассматривать символы ψ , p и т.д. не в отвлеченном смысле главы II, а считать их волновыми функциями и линейными операциями в представлении x, y, z, t .

§ 74. ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНА.

Рассмотрим сперва движение электрона в отсутствии электромагнитного поля, такая задача о свободно движущейся частице была рассмотрена в § 39. Гамильтонова функция системы, состоящей из одной частицы, определяется в классической механике формулой (1) § 39, что приводит к написанному в том же параграфе волновому ур-ию (5). Это волновое уравнение можно представить в виде

$$\left\{ \frac{W}{c} - (m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2} \right\} \psi = 0, \quad (3)$$

где W и p должны считаться операторами, определенными посредством уравнений (1) и (2). Хотя ур-ие (3) правильно учитывает зависимость массы частицы от ее скорости, все же с точки зрения теории относительности оно не может считаться удовлетворительным, так как оно очень несимметрично по отношению к W и p и потому не поддается согласному с теорией относительности обобщению на тот случай, когда имеется электромагнитное поле. Поэтому нужно поискать другое волновое уравнение для свободно движущейся частицы.

Если обе части волнового ур-ия (3) помножить слева на оператор

$$\left\{ \frac{W}{c} + (m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2} \right\},$$

то получится уравнение:

$$\left\{ \frac{W^2}{c^2} - m^2c^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 \right\} \psi = 0, \quad (4)$$

релятивистски инвариантное и представляющее поэтому более удобное основание для построения релятивистской теории. Ур-ие (4) не вполне эквивалентно ур-ию (3); хотя всякое решение ур-ия (3) будет удовлетворять ур-ию (4), обратное не всегда будет верным. Только те решения ур-ия (4), которым соответствует положительное W , будут в то же время решениями и ур-ия (3).

Волновое ур-ие (4) противоречит общим законам квантовой теории так как оно содержит квадрат W . В § 37 мы вывели из очень общих соображений, что волновое уравнение должно быть линейным по отношению к оператору $\frac{\partial}{\partial x}$ или W наподобие ур-ия (43) в этом параграфе. Поэтому нам нужно найти волновое уравнение, линейное в W , которое было бы примерно эквивалентно ур-ию (4). Для того, чтобы к этому волновому уравнению можно было достаточно просто применять преобразование Лоренца, постараемся написать его таким образом, чтобы оно было рационально и линейно по отношению к p_x, p_y и p_z , как и по отношению к W , т.е. имело вид:

$$\left\{ \frac{W}{c} + \alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z + \beta \right\} \psi = 0, \quad (5)$$

где β и все α не зависят от W и p . Так как мы рассматриваем тот случай, когда электромагнитное поле отсутствует, то все точки пространства-времени должны быть равноправны: оператор в волновом уравнении не должен содержать ни x, y, z ни t . Следовательно β и все α не должны зависеть от x, y, z, t . Поэтому они должны обозначать какие-то совершенно новые динамические переменные, о которых можно сказать, что они описывают какое-то внутреннее движение электрона. В дальнейшем мы увидим, что они действительно описывают электронный спин («вращение» электрона). Ясно, что α и β должны коммутировать с W и p , а также с x, y, z и t .

Помножая (5) слева на оператор

$$\left\{ \frac{W}{c} - \alpha_x p_x - \alpha_y p_y - \alpha_z p_z - \beta \right\},$$

мы получим:

$$\left\{ \frac{W^2}{c^2} - \sum_{xyz} [\alpha_x^2 p_x^2 + (\alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x) p_x p_y + (\alpha_x \beta + \beta \alpha_x) p_x] - \beta^2 \right\} \psi = 0.$$

Это совпадает с (4) в том случае, если верны соотношения

$$\begin{aligned} \alpha_x^2 &= 1, & \alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x &= 0, \\ \beta^2 &= m^2 c^2, & \alpha_x \beta + \beta \alpha_x &= 0, \end{aligned}$$

а также и все другие соотношения, которые получаются и» эти* путем круговых подстановок значков x, y, z . Если написать $\beta = \alpha_m m c$, то все эти соотношения смогут быть заменены одним:

$$\alpha_\nu \alpha_\nu + \alpha_\nu \alpha_\nu = 2 \delta_{\nu\nu}; \quad (\nu, \nu = x, y, z, m). \quad (6)$$

Все четыре α антикоммутируют друг с другом; квадрат каждой из них равен единице.

Мы видим, что, приписав надлежащие свойства величинам α и β можно сделать ур-ие (5) эквивалентным ур-ию (4), поскольку рассматривается движение электрона как целого. Мы сделаем предположение, что ур-ие (5) является правильным релятивистским Уравнением в случае движения электрона в отсутствии поля. При этом возникает затруднение, а именно то, что ур-ие (5), равно как и (4), не вполне эквивалентно ур-ию (3), но имеет решения соответствующие и отрицательным и положительным значениям W . Решения с отрицательными значениями W , разумеется, не соответствуют действительно наблюдаемым движениям электрона. Покамест мы уклонимся от рассмотрения этой трудности тем, что будем игнорировать существование решений с отрицательной энергией. Физическое истолкование таких решений будет дано в § 79.

Можно очень легко получить представление четырех величин α . Их алгебраические свойства аналогичны свойствам величин σ , введенных в § 43 для описания электронного спина, каковые σ могут быть представлены в виде матриц с двумя строчками и двумя столбцами. Покуда мы имеем дело с матрицами с двумя строчками и столбцами, мы не можем получить представление более чем трех антикоммутирующих величин; для представления четырех антикоммутирующих величин обратимся к матрицам с четырьмя строчками и столбцами. Удобно выразить сперва все α посредством σ , а также других трех антикоммутирующих величин, квадраты которых равны единице и которые при этом независимы от величин s и коммутируют с ними. Обозначим эти новые величины через ρ_1, ρ_2, ρ_3 . Мы можем например взять:

$$\alpha_x = \rho_1 \sigma_x, \quad \alpha_y = \rho_1 \sigma_y, \quad \alpha_z = \rho_1 \sigma_z, \quad \alpha_m = \rho_3. \quad (7)$$

Легко проверить, что величины α будут при этом удовлетворять условиям (6). Если мы возьмем такое представление, в котором ρ_3 , и σ_z диагональны, то получим следующие матрицы:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

В соответствии с числом строк и столбцов волновая функция должна иметь четыре слагающие. В § 43 мы видели, что наличие электронного спина требует, чтобы волновая функция имела две слагающие. Тот факт, что из нашей теории вытекает необходимость четырех слагающих, связан с тем, что волновое уравнение (5) имеет вдвое больше решений, чем следует (половина общего числа решений соответствует состояниям электрона с отрицательной энергией).

С помощью соотношений (7) волновое уравнение (5) может быть записано в векторной форме

$$\left\{ \frac{W}{c} + \rho_1 (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) + \rho_3 mc \right\} \psi = 0.$$

Для того, чтобы обобщить это уравнение на тот случай, когда присутствует электромагнитное поле, мы, следуя классическому правилу, введем $W + eA_0$ и $\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$ вместо W и \mathbf{p} (A_0 и \mathbf{A} обозначают скалярный и векторный потенциалы поля в той точке пространства времени, в которой находится электрон). Это даст нам уравнение:

$$\left\{ \frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 + \rho_1 (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}) + \rho_3 mc \right\} \psi = 0, \quad (8)$$

которое является основным волновым уравнением релятивистской теории электрона. Мнимосопряженным уравнением является:

$$\psi \left\{ \frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 + \rho_1 (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}) + \rho_3 mc \right\} = 0, \quad (9)$$

которое должно быть совершенно равноправным с уравнением (8). При этом, в согласии с §§ 36 и 37, действие операторов W и \mathbf{p} на волновую функцию, стоящую слева от них, следует понимать в таком же смысле, как в формулах (1) и (2), но только с обратным знаком

§ 75. ИНВАРИАНТНОСТЬ ПО ОТНОШЕНИЮ К ПРЕОБРАЗОВАНИЯМ ЛОРЕНЦА.

Прежде чем рассматривать физические следствия волнового уравнения (8) или (9), проверим сперва, действительно ли наша теория инвариантна по отношению к преобразованиям Лоренца, или, точнее говоря, действительно ли физические следствия, вытекающие из теории, не зависят от того, какую лоренцову систему отсчета мы выберем. Из вида волнового уравнения (8) это далеко не очевидно. Необходимо доказать, что если переписать волновое уравнение в новой лоренцовой системе координат, то решения нового волнового уравнения могут быть приведены в одно-однозначное соответствие с решениями старого уравнения, вследствие чего можно считать, что новые решения описывают то же самое состояние механической системы. В любой лоренцовой системе сумма квадратов абсолютных величин всех четырех слагающих волновой функции должна давать вероятность нахождения электрона в единице объема в данном месте пространства. Эта вероятность обладает свойствами плотности электрического заряда (для краткости мы и будем называть ее плотностью заряда), а поэтому ее значения для одного и того же состояния механической системы в различных лоренцовых системах отсчета должны относиться друг ко другу совершенно так же, как относятся друг ко другу в этих координатных системах проекции некоторого четырехмерного вектора на направление оси времен. Кроме того четырехмерная расходимость этого четырехмерного вектора должна обращаться в нуль, что представляет математическое выражение закона сохранения заряда

(электрон не может появиться в каком-нибудь объеме или выйти из него, не пересекая поверхности, ограничивающий этот объем).

Для удобства рассмотрения преобразований Лоренца внесем небольшое изменение в наши обозначения. Вместо значков x, y, z мы будем употреблять 1, 2, 3, вместо $\frac{W}{c}$ будем писать p_0 и кроме того условимся, что если в каком-нибудь одночлене один и тот же значок повторяется дважды, то это значит, что по этому значку происходит суммирование от 0 до 3. Ур-ие (8) мы должны будем переписать в виде

$$\left\{ \alpha_\mu^* (p_\mu^* + \frac{e}{c} A_\mu^*) + \alpha_m mc \right\} \psi = 0, \quad (10)$$

где α_0 есть единичная матрица. Таким же образом уравнение (9) переписывается в виде

$$\varphi \left\{ \alpha_\mu (p_\mu + \frac{e}{c} A_\mu) + \alpha_m mc \right\} = 0.$$

Применяя преобразование Лоренца, будем отмечать звездочкой все величины, относящиеся к новой координатной системе. Слагающие четырехмерных векторов p и A преобразуются по линейному закону

$$p_\mu = \alpha_{\mu\nu}^* p_\nu^*, \quad A_\mu = \alpha_{\mu\nu} A_\nu^*. \quad (12)$$

Подставляя эти выражения в ур-ия (10) и (11), мы получим

$$\left\{ \alpha_\mu \alpha_{\mu\nu}^* (p_\nu^* + \frac{e}{c} A_\nu^*) + \alpha_m mc \right\} \psi = 0 \quad (13)$$

и

$$\varphi \left\{ \alpha_\mu \alpha_{\mu\nu}^* (p_\nu^* + \frac{e}{c} A_\nu^*) + \alpha_m mc \right\} = 0. \quad (14)$$

Попробуем придать этим уравнениям прежний вид (10) и (11), введя новую волновую функцию ψ^* , слагающие которой являются линейными комбинациями слагающих прежней волновой функции ψ с постоянными коэффициентами. Это означает, что ψ^* связано с ψ уравнением типа

$$\psi^* = \gamma \psi, \quad (15)$$

где γ есть оператор такого же рода, как α , т. е. оператор, который может быть представлен матрицей с четырьмя строчками и столбцами. Уравнением, мнимо-сопряженным по отношению к (15), будет

$$\varphi^* = \varphi \bar{\gamma}.$$

Ур-ия (13) и (14) перейдут в

$$\bar{\gamma} \left\{ \alpha_\mu (p_\mu^* + \frac{e}{c} A_\mu^*) + \alpha_m mc \right\} \psi^* = 0, \quad (16)$$

$$\varphi^* \left\{ \alpha_\mu (p_\mu^* + \frac{e}{c} A_\mu^*) + \alpha_m mc \right\} \bar{\gamma} = 0, \quad (17.)$$

если только мы сумеем найти такое γ , чтобы было

$$\bar{\gamma} \alpha_\mu \bar{\gamma} = \alpha_\mu \alpha_{\mu\nu}^*, \quad \bar{\gamma} \alpha_m \bar{\gamma} = \alpha_m. \quad (18)$$

Если мы разделим на излишние множители $\bar{\gamma}$ и γ то ур-ия (16) и (17) примут такой же вид, как (10) и (11), что и требовалось.

Для того, чтобы доказать, что всегда можно выбрать такое γ , которое удовлетворяло бы ур-иям (18), рассмотрим сперва тот частный случай, когда преобразование координатной системы заключается в гиперболическом повороте на угол ϑ в плоскости xt , так что формулы преобразования величин p имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} p_0 &= p_0^* \cosh \vartheta + p_1^* \sinh \vartheta \\ p_1 &= p_0^* \sinh \vartheta + p_1^* \cosh \vartheta \\ p_2 &= p_2^*, \quad \dots \quad p_3 = p_3^* \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Коэффициенты $\alpha_{\mu\nu}$, могут быть написаны сразу из сравнения этих уравнений с ур-иями (12). Легко видеть, что при этих значениях $\alpha_{\mu\nu}$, равенство (18) имеет место, если мы положим

$$\gamma = e^{-\frac{1}{2} \alpha_1 \eta} = \gamma_0 \quad (20)$$

В самом деле:

$$\begin{aligned} \gamma \alpha_0 \gamma &= \gamma \gamma = e^{0 \alpha_1} = \\ &= 1 + 0 \alpha_1 + \frac{0^2 \alpha_1^2}{2!} + \frac{0^3 \alpha_1^3}{3!} + \dots + \end{aligned}$$

Но ввиду равенства $\alpha_1^2 = 1$ можно писать

$$\begin{aligned} \gamma \alpha_0 \gamma &= \left\{ 1 + \frac{0^2}{2!} + \dots \right\} + \alpha_1 \left\{ 0 + \frac{0^3}{3!} + \dots \right\} = \\ &= \cosh 0 + \alpha_1 \sinh 0 = \\ &= \alpha_0 \cosh 0 + \alpha_1 \sinh 0. \end{aligned}$$

Таким же образом

$$\gamma \alpha_1 \gamma = \alpha_1 \gamma \gamma = \alpha_0 \sinh 0 + \alpha_1 \cosh 0.$$

Далее:

$$\gamma \alpha_2 \gamma = e^{-\frac{1}{2} \alpha_1 \eta} \alpha_2 e^{\frac{1}{2} \alpha_1 \eta} = e^{-\frac{1}{2} \alpha_1 \eta} e^{-\frac{1}{2} \alpha_1 \eta} \alpha_2 = \alpha_2,$$

так как из того обстоятельства, что антикоммутирует, следует равенство $\alpha_2 f(\alpha_1) = f(-\alpha_1) \alpha_2$ для любой функции $f(\alpha_1)$.

Аналогично этому должно быть

$$\gamma \alpha_3 \gamma = \alpha_3, \quad \gamma \alpha_m \gamma = \alpha_m.$$

Таким образом пять ур-ий (18) действительно оказываются верными, если γ задается формулой (20), а коэффициент $\alpha_{\mu\nu}$ формулами (19).

В качестве другого типичного преобразования координат рассмотрим поворот вокруг оси x_0 -ов на угол θ в обыкновенном пространстве. Формулы преобразования теперь имеют вид:

$$\begin{aligned} p_0 &= p_0^*, \quad p_1 = p_1^*, \\ p_2 &= p_2^* \cos \theta + p_3^* \sin \theta, \\ p_3 &= -p_2^* \sin \theta + p_3^* \cos \theta. \end{aligned}$$

Применяя новые значения коэффициентов $\alpha_{\mu\nu}$, мы легко проверим с помощью рассуждений, совершенно аналогичных предыдущим, что ур-ия (18) могут быть удовлетворены, если положить:

$$\gamma = e^{-\frac{1}{2} \theta \alpha_2 \alpha_3}, \quad \bar{\gamma} = e^{-\frac{1}{2} \theta \alpha_2 \alpha_3} = e^{\frac{1}{2} \theta \alpha_2 \alpha_3}.$$

Если два преобразования координат совершаются одно за другим, то для получения оператора γ , соответствующего совокупности этих двух преобразований, нужно перемножить операторы соответствующие обоим преобразованиям в отдельности. Так как любое преобразование координат может быть осуществлено посредством повторного применения вращений двух рассмотренных типов, то всегда можно построить оператор γ , удовлетворяющий ур-ию (18).

Таким образом мы видим, что решения ур-ия (16), т. е. волнового уравнения в новой лоренцовой системе отсчета, могут быть вполне естественно приведены в одно-однозначное соответствие с решениями первоначального волнового ур-ия (10), причем соответствующие друг другу решения связаны равенством (15). Поэтому можно допустить, что они описывают одно и то же состояние. Остается проверить, что плотность заряда преобразуется как проекция на ось времен некоторого четырехмерного вектора и что расходимость этого вектора, исчезает.

Введем символ $\varphi_r \cdot \psi_s$ для обозначения суммы произведений всех четырех слагающих волновой функции φ_r на соответственные слагающие волновой функции ψ_s . Таким же образом $\varphi \xi \cdot \eta \psi$, где ξ и η , любые линейные операторы, действующие на волновые

функции, будет означать сумму произведений всех четырех слагающих φ^ξ на соответственные слагающие $\eta\psi$. Новые символы вида $\psi^\xi \cdot \eta\psi$ являются функциями от x, y, z, t ; их не следует смешивать с произведениями $\varphi^\xi \cdot \eta\psi$ введенными в главе II (эти последние произведения, вообще говоря, как мы видели, могут и не иметь смысла для того более широкого класса линейных операторов, с которым мы имеем дело сейчас). Заметим, что

$$\varphi \cdot \alpha \psi = \varphi \alpha \cdot \psi, \quad (21)$$

если α есть одна из матриц α в волновом уравнении или любой линейный оператор, преобразующий четыре слагающие волновой функции в четыре линейные комбинации этих слагающих с коэффициентами, представляющими постоянные числа или функции от x, y, z, t .

Мы можем теперь выразить плотность заряда в виде $\varphi \cdot \psi$ или, что то же самое, $\varphi \cdot \alpha_0 \psi$ или $\varphi \alpha_0 \cdot \psi$ (ведь $\alpha_0 = 1$). Посмотрим, как преобразуются при преобразовании Лоренца четыре величины $\varphi \cdot \alpha_\mu \psi$, где $\mu = 0, 1, 2, 3$. Из (15) и (18) следует:

$$\varphi^\mu \cdot \alpha_\mu \psi^\mu = \varphi^\mu \cdot \alpha_\mu \cdot \eta^\mu \psi^\mu = \varphi^\mu \cdot \eta^\mu \alpha_\mu \psi^\mu = \varphi^\mu \cdot \alpha_\mu \cdot \eta^\mu \psi^\mu = (\varphi^\mu \cdot \alpha_\mu \cdot \eta^\mu) \psi^\mu$$

Сравнивая с формулой (12), мы убеждаемся в том, что четыре величины $\varphi \cdot \alpha_\mu \psi$ преобразуются как ковариантные слагающие четырехмерного вектора. Контравариантными слагающими будут:

$$-\varphi \cdot \alpha_1 \psi, \quad -\varphi \cdot \alpha_2 \psi, \quad -\varphi \cdot \alpha_3 \psi.$$

Таким образом мы убедились в том, что плотность заряда $\varphi \cdot \psi$ действительно является временной слагающей четырехмерного вектора, пространственными слагающими которого являются $-\varphi \cdot \alpha_r \psi$, (где $r=1,2,3$). Эти пространственные слагающие составляют электрический ток, или, точнее говоря, вероятность того, что электрон пересечет единицу площади в единицу времени.

Расходимость нашего четырехмерного вектора есть

$$\sum_\mu \pm \frac{\partial}{\partial x_\mu} (\varphi \cdot \alpha_\mu \psi),$$

где x_0 обозначает ct и при суммировании ставится знак $+$ перед членом с $\mu = 0$ и знак $-$ перед членом с $\mu = 1, 2, 3$. Для того, чтобы доказать, что расходимость исчезает помножим ур-ие (10) на φ и ур-ие (11) на ψ , взяв и в том и в другом случае сумму по всем четырем слагающим, и результаты умножения вычтем. Мы получим:

$$\varphi \cdot \alpha_\mu p_\mu \psi - \varphi p_\mu \cdot \alpha_\mu \psi = 0,$$

так как на основании равенства (21) все прочие члены сокращаются. С помощью (1) и (2) мы находим:¹

$$\sum_\mu \pm \left(\varphi \cdot \alpha_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} + \frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} \alpha_\mu \cdot \psi \right) = 0,$$

а это и обозначает, что выражение (22) исчезает. Итак доказательство того, что наша теория удовлетворяет необходимым условиям в любой системе отсчета, закончено.

§ 76 СУЩЕСТВОВАНИЕ СПИНА.

В § 74 мы видели, что правильное волновое уравнение для электрона в отсутствии электромагнитного поля, а именно ур-ие (5), эквивалентно волновому ур-ию (4), которое получается на основании аналогии с классической теорией. Эквивалентность прекращается в том случае, когда имеется поле. Поступая с ур-ием (8), которое является правильным волновым уравнением в случае поля, совершенно таким же образом, как мы поступали с уравнением (5), и сравнивая его с уравнением

$$\left\{ \left(\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right)^2 - \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - m^2 c^2 \right\} \psi = 0, \quad (23)$$

¹ Не следует забывать, что если $p_\mu \psi = \pm i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu}$, то $\psi p_\mu = \pm i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu}$ (обратный знак!)

справедливость которого можно было бы предположить на основании аналогии с классической теорией (оператор, стоящий в фигурных скобках, есть гамильтонова функция классической теории относительности), можно надеяться получить некоторое указание на новые физические особенности развиваемой здесь теории.

Помножим ур-ие (8) слева на некоторый множитель, который мы выберем с тем расчетом, чтобы получилось уравнение как можно более похожее на (23). Взяв в качестве такого множителя

$$\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 - i\rho_1 \left(\sigma, p + \frac{e}{c} A \right) - mc,$$

мы получим:

$$\left\{ \left(\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right)^2 - \left(\sigma, p + \frac{e}{c} A \right)^2 - m^2 c^2 + \right. \\ \left. + i\rho_1 \left[\left(\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right) \left(\sigma, p + \frac{e}{c} A \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - \left(\sigma, p + \frac{e}{c} A \right) \left(\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right) \right] \right\} \psi = 0. \quad (24)$$

Применим теперь общую формулу, которая гласит, что если B и C суть любые два вектора, коммутирующие с σ , то

$$(\sigma, B)(\sigma, C) = \sum_{xyz} \{ \sigma_x^2 B_x C_x + \sigma_x \sigma_y B_x C_y + \sigma_y \sigma_x B_y C_x \} = \\ = (B, C) + i \sum_{xyz} \sigma_z (B_x C_y - B_y C_x) = (B, C) + i(\sigma, B \times C). \quad (25)$$

Положив $B = C = p + \frac{e}{c} A$ и пользуясь формулой

$$\left(p + \frac{e}{c} A \right) \times \left(p + \frac{e}{c} A \right) = \frac{e}{c} (p \times A + A \times p) = \\ = -\frac{i\hbar e}{c} \text{curl } A = -\frac{i\hbar e}{c} H,$$

где H - магнитное поле, мы найдем, что

$$\left(\sigma, p + \frac{e}{c} A \right)^2 = \left(p + \frac{e}{c} A \right)^2 + \frac{\hbar e}{c} (\sigma, H).$$

Таким же образом

$$\left(\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right) \left(\sigma, p + \frac{e}{c} A \right) - \left(\sigma, p + \frac{e}{c} A \right) \left(\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right) = \\ = \frac{e}{c} \left(\sigma, \frac{W}{c} A - A \frac{W}{c} + A_0 p - p A_0 \right) = \\ = \frac{i\hbar e}{c} \left(\sigma, \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t} + \text{grad } A_0 \right) = -i \frac{\hbar e}{c} (\sigma, E),$$

где E - электрическое поле. Ур-ие (24) принимает вид:

$$\left\{ \left(\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right)^2 - \left(p + \frac{e}{c} A \right)^2 - m^2 c^2 - \frac{\hbar e}{c} (\sigma, H) - \right. \\ \left. - i\rho_1 \frac{\hbar e}{c} (\sigma, E) \right\} \psi = 0.$$

Это уравнение отличается от (23) тем, что в операторе стоят два добавочные члена. Согласно развиваемой здесь теории электрон аналогичен механической системе с классической гамильтоновой функцией:

$$\left(\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right)^2 - \left(p + \frac{e}{c} A \right)^2 - m^2 c^2 - \frac{\hbar e}{c} (\sigma, H) - i\rho_1 \frac{\hbar e}{c} (\sigma, E)$$

Если пренебречь релятивистскими поправками, для чего следует положить $W = mc^2 + W_1$, и считать W_1 малой величиной по сравнению с mc^2 , то функция Гамильтона после деления на $2m$ сведется к следующей:

$$W_1 - \left\{ -eA_0 + \frac{1}{2m} \left(p + \frac{e}{c} A \right)^2 + \frac{\hbar e}{2mc} (\sigma, H) + i\rho_1 \frac{\hbar e}{2mc} (\sigma, E) \right\}.$$

Можно приближенно считать, что два добавочные члена происходят оттого, что электрон обладает добавочной потенциальной энергией

$$\frac{\hbar e}{2mc} (\sigma, H) + i\rho_1 \frac{\hbar e}{2mc} (\sigma, E).$$

Мы можем истолковать это в том смысле, что эта потенциальная энергия возникает благодаря наличию у электрона магнитного момента $-\frac{\hbar e}{2mc}\sigma$ и электрического момента $-i\rho_1\frac{\hbar e}{2mc}\sigma$. Наличие магнитного момента находится в согласии с допущениями, сделанными

в § 43, и с тем, что дает опыт. С другой стороны электрический момент есть чисто мнимое количество и потому не может считаться имеющим физический смысл. Гамильтонов оператор первоначального волнового уравнения (8) является вещественным; мнимый член появился только вследствие той проделанной нами довольно искусственной операции, которая имела целью привести гамильтонову функцию к виду, удобному для сравнения с классической теорией.

Момент количества движения электрона, соответствующий спину, не дает добавочного члена потенциальной энергии и потому не сказывается на результатах предыдущего вычисления. Простейшим способом доказательства существования этого момента количества движения является определение интегралов площадей в случае движения электрона в центральном поле сил. Поэтому мы положим $A=0$ и будем считать A_0 функцией радиус-вектора r , вследствие чего волновое уравнение (8) примет вид:

$$(W - H)\psi = 0,$$

где

$$H = -eA_0(r) - c\rho_1(\sigma, p) - \rho_3 mc^2. \quad (26)$$

Этот гамильтонов оператор и должен входить в уравнения движения. Проекция орбитального момента количества движения на ось x -ов равна $m_x = yp_z - zp_y$; с помощью перестановочных соотношений, доказанных в §§ 44 и 45, мы находим для быстроты изменения этой величины выражение:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{m}_x &= m_x H - H m_x = -c\rho_1 \{m_x(\sigma, p) - (\sigma, p)m_x\} = \\ &= -c\rho_1(\sigma, m_x p - p m_x) = -i\hbar c\rho_1(\sigma_y p_z - \sigma_z p_y). \end{aligned}$$

Итак $m_x \neq 0$, т.е. орбитальный момент количества движения не является константой движения. Далее мы имеем [см. уравнения (42) в § 43]:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\sigma}_x &= \sigma_x H - H \sigma_x = -c\rho_1 \{\sigma_x(\sigma, p) - (\sigma, p)\sigma_x\} = \\ &= -c\rho_1(\sigma_x \sigma - \sigma \sigma_x, p) = -2ic\rho_1(\sigma_z p_y - \sigma_y p_z). \end{aligned}$$

Поэтому

$$i\hbar(\dot{m}_x + \frac{1}{2}\hbar\dot{\sigma}_x) = 0.$$

Отсюда следует, что вектор $m + \frac{1}{2}\hbar\sigma$ есть константа движения. Этот результат может быть истолкован в том смысле, что электрон обладает моментом количества движения спина $\frac{1}{2}\hbar\sigma$, который нужно прибавить к орбитальному моменту количества движения m для того, чтобы получилась константа движения.

§ 77. ПЕРЕХОД К ПОЛЯРНЫМ КООРДИНАТАМ.

Для дальнейшего изучения движения электрона в центральном поле сил оказывается удобным перейти к полярным координатам, подобно тому, как это было сделано в § 45 для нерелятивистского случая. Мы можем ввести как и прежде r и p_r , но вместо k , т.е. вместо величины орбитального момента количества движения m , который больше не является константой движения, мы должны ввести величину всего момента количества движения

$M = m + \frac{1}{2}\hbar\sigma$. Если обозначить через j эту величину, измеренную в единицах \hbar , то мы получим

$$j^2 \hbar^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 + \frac{1}{4} \hbar^2. \quad (27)$$

Собственные значения величины m_z равны целому кратному \hbar , собственные значения $\frac{1}{2}\hbar\sigma_z$ равны $\pm\frac{1}{2}\hbar$, поэтому собственные значения M_z , составляют полуторное число постоянных \hbar . Из общего результата § 30 следует, что собственные значения j являются целыми положительными числами.

Если в формуле (25) положить $B=C=m$, то получается:

$$(\sigma, m)^2 = m^2 + i(\sigma, m \times m) = m^2 - \hbar(\sigma, m) = \left(m + \frac{1}{2}\hbar\sigma\right)^2 - \frac{3}{4}\hbar^2.$$

Отсюда следует

$$\{(\sigma, m) + \hbar\}^2 = M^2 + \frac{1}{4}\hbar^2.$$

Итак квадрат величины $(\sigma, m) + \hbar$ равен $M^2 + \frac{1}{4}\hbar^2$, и мы могли бы, в согласии с уравнением

(27), определить $j\hbar$ как $(\sigma, m) + \hbar$, а не как положительный квадратный корень из $M^2 + \frac{1}{4}\hbar^2$.

Однако это было бы неудобно, так как нам нужно, чтобы j было константой движения между тем как $(\sigma, m) + \hbar$ не есть константа. В самом деле, применяя (25), мы получим:

$$\begin{aligned}(\sigma, m)(\sigma, p) &= i(\sigma, m \times p), \\ (\sigma, p)(\sigma, m) &= i(\sigma, p \times m),\end{aligned}$$

откуда

$$\begin{aligned}(\sigma, m)(\sigma, p) + (\sigma, p)(\sigma, m) &= i \sum_{xyz} \sigma_x (m_y p_z - m_z p_y + p_y m_z - p_z m_y), \\ &= i \sum_{xyz} \sigma_x \cdot 2i\hbar p_x = -2\hbar(\sigma, p)\end{aligned}$$

или

$$\{(\sigma, m) + \hbar\}(\sigma, p) + (\sigma, p)\{(\sigma, m) + \hbar\} = 0.$$

Мы видим, что $(\sigma, m) + \hbar$ антикоммутирует с одним из членов гамильтонова оператора (26), а именно $c - c\rho_1(\sigma, p)$, и коммутирует с остальными двумя. Отсюда следует, что $\rho_3\{(\sigma, m) + \hbar\}$ коммутирует со всеми тремя членами H и является константой движения. Но квадрат величины $\rho_3\{(\sigma, m) + \hbar\}$ тоже равен $M^2 + \frac{1}{4}\hbar^2$. Мы можем поэтому положить

$$j\hbar = \rho_3\{(\sigma, m) + \hbar\}, \quad (28)$$

и это будет вполне удобным определением j , находящимся в согласии с (27) и делающим величину j константой движения. Совокупность собственных значений такой величины j совпадает с совокупностью всех целых значений кроме нуля.

Применяя (25) еще раз, мы получим с помощью формулы (28) и формулы (13) главы VIII:

$$(\sigma, x)(\sigma, p) = (x, p) + i(\sigma, m) = rp_r + i\rho_3 j\hbar. \quad (29)$$

Введем наблюдаемую ε по определению

$$r\varepsilon = \rho_1(\sigma, x). \quad (30)$$

Вследствие того, что r коммутирует с ρ_1 , и $c(\sigma, X)$, он должен коммутировать также и с ε . Поэтому

$$r^2\varepsilon^2 = [\rho_1(\sigma, x)]^2 = (\sigma, x)^2 = x^2 = r^2\varepsilon^2,$$

откуда

$$\varepsilon^2 = 1.$$

Так как x и p совершенно равноправны (поскольку речь идет о моменте количества движения), то $\rho_1(\sigma, X)$, так же как и $\rho_1(\sigma, p)$, должно коммутировать с M и j . Поэтому и ε коммутирует с M и j . Кроме того ε коммутирует и с p_r , так как мы имеем:

$$(\sigma, x)(x, p) - (x, p)(\sigma, x) = [\sigma, x(x, p) - (x, p)x] = i\hbar(\sigma, x),$$

откуда следует:

$$r\varepsilon(rp_r + i\hbar) - (rp_r + i\hbar)r\varepsilon = i\hbar r\varepsilon$$

или

$$r\varepsilon(p_r + 2i\hbar) - (rp_r + i\hbar)r\varepsilon = i\hbar r\varepsilon$$

или окончательно

$$\varepsilon p_r - p_r \varepsilon = 0.$$

Из (29) и (30) вытекает:

$$r\varepsilon\rho_3(\sigma, p) = rp_r + i\rho_3 j\hbar \quad \text{или} \quad \rho_3(\sigma, p) = \varepsilon p_r + i\varepsilon\rho_3 \frac{j\hbar}{r}.$$

Таким образом

$$\frac{H}{c} = -\frac{e}{c} A_0 - \varepsilon p_r - i\varepsilon\rho_3 \frac{j\hbar}{r} - \rho_3 mc.$$

Это и есть выражение оператора Гамильтона в полярных координатах. Следует заметить, что ε и ρ_3 коммутируют со всеми прочими переменными, входящими в это выражение гамильтоновой функции, и антикоммутируют между собою. Это значит, что мы можем выбрать представление, в котором ε и ρ_3 представлены матрицами

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{и соответственно} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (31)$$

и в котором например r диагонально, волновая же функция $(r|)$ будет при этом иметь две слагающие [соответственно числу строчек и столбцов матриц (31)]; эти две слагающие мы можем обозначить например $(r|)_a$ и $(r|)_b$.

§ 78 ТОНКАЯ СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ ПОДОРОДА

Рассмотрим случай водородного атома, в котором, как известно, $A_0 = \frac{c}{r}$, и вычислим его энергетические уровни, совпадающие с собственными значениями H' оператора H . Уравнение $(H' - H)\psi = 0$, определяющее эти собственные значения, будучи написано в том представлении, которое было рассмотрено выше и в котором представителями ε и ρ_3 являются матрицы (31), сводится к двум уравнениям:

$$\begin{cases} \left(\frac{H'}{c} + \frac{e^2}{cr}\right)(r|)_a - \hbar \frac{\partial}{\partial r}(r|)_b - \frac{j\hbar}{r}(r|)_b + mc(r|)_a = 0 \\ \left(\frac{H'}{c} + \frac{e^2}{cr}\right)(r|)_b + \hbar \frac{\partial}{\partial r}(r|)_a - \frac{j\hbar}{r}(r|)_a - mc(r|)_b = 0 \end{cases}$$

Положим для краткости

$$\frac{\hbar}{mc + \frac{H'}{c}} = a_1, \quad \frac{\hbar}{mc - \frac{H'}{c}} = a_2. \quad (32)$$

Преыдущие уравнения смогут быть написаны в виде:

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{a_1} + \frac{\alpha}{r}\right)(r|)_a - \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{j}{r}\right)(r|)_b = 0 \\ \left(-\frac{1}{a_2} + \frac{\alpha}{r}\right)(r|)_b + \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{j}{r}\right)(r|)_a = 0 \end{cases} \quad (33)$$

где $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$, что является маленькой величиной.¹ Мы будем решать ур-ие (33) способом, напоминающим тот, который мы применили к ур-ию (20) в § 46.

Введем две новые функции $f(r)$ и $g(r)$ с помощью равенств:

$$(r|)_a = e^{-\frac{r}{a}} f, \quad (r|)_b = e^{-\frac{r}{a}} g,$$

где

$$a = (a_1 a_2)^{\frac{1}{2}} = \hbar \left(m^2 c^2 - \frac{H'^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (34)$$

Ур-ия (33) принимают вид:

¹ $\alpha = \frac{1}{137,3}$. Примечание переводчика

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{1}{a_1} + \frac{\alpha}{r}\right)f - \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{a} + \frac{j}{r}\right)g &= 0 \\ \left(-\frac{1}{a_2} + \frac{\alpha}{r}\right)g + \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{a} - \frac{j}{r}\right)f &= 0 \end{aligned} \right\} (35)$$

Поискем решение, и котором f и g имеют вид степенных рядов:

$$f = \sum_s c_s r^s, \quad g = \sum_s c'_s r^s, \quad (36)$$

где следующие друг за другом значения s отличаются на единицу хотя сами по себе эти значения не обязаны быть целыми числами. Подставляя в (35) эти выражения f и g приравнивая нулю коэффициенты при r^{s-1} в левых частях уравнений, мы получим:

$$\left. \begin{aligned} \frac{c_{s-1}}{a_1} + \alpha c_s - (s+j)c'_s + \frac{c'_{s-1}}{a} &= 0 \\ -\frac{c'_{s-1}}{a_2} + \alpha c'_s + (s-j)c_s - \frac{c_{s-1}}{a} &= 0 \end{aligned} \right\} (37)$$

Помножая первое из этих уравнений на a , второе на a_2 и складывая, мы можем исключить c_{s-1} и c'_{s-1} так как из (34) следует $\frac{a}{a_1} = \frac{a_2}{a}$. Получается равенство:

$$c_s [a\alpha + a_2(s-j)] + c'_s [a_2\alpha - a(s+j)] = 0, \quad (38)$$

дающее соотношение между коэффициентами c' и c .

Граничное условие при $r=0$ приводит к требованию, что ряды (36) должны обрываться со стороны малых s . Если s_0 есть наименьшее значение s , при котором c_s и c'_s не обращаются оба в нуль, условия (37) дадут при $s = s_0$ и $c_{s-1} = c'_{s-1} = 0$:

$$\begin{aligned} \alpha c_{s_0} - (s_0 + j)c'_{s_0} &= 0 \\ \alpha c'_{s_0} + (s_0 - j)c_{s_0} &= 0, \end{aligned}$$

откуда

$$\alpha^2 = -s_0^2 + j^2.$$

Так как из того же граничного условия вытекает, что наименьшее значение s не должно быть отрицательным, мы должны положить

$$s_0 = +\sqrt{j^2 - \alpha^2}.$$

Желая исследовать сходимость рядов (36), определим значение отношения $\frac{c_s}{c_{s-1}}$ при больших s . Ур-ие (38) и второе ур-ие (37) дают приближенно при больших значениях s :

$$c_s a_2 = c'_s a \quad \text{и} \quad s c_s = \frac{c_{s-1}}{a} + \frac{c'_{s-1}}{a_2}.$$

Отсюда следует:

$$\frac{c_s}{c_{s-1}} = \frac{2}{as}.$$

Поэтому ряды (36) будут сходиться как ряд

$$\sum_s \frac{1}{s!} \left(\frac{2r}{a}\right)^s,$$

т. е. степенной ряд для $e^{\frac{2r}{a}}$. Этот результат похож на результат, полученный в § 46, а это позволяет нам заключить, как и раньше, что все значения H' , соответствующие чистому a , т. е. те значения, при которых $H' > mc^2$ (см. формулу 34), позволены, но из всех значений H' , дающих вещественное a , дозволяются лишь те, при которых ряды (36) обрываются со стороны больших s .

Если ряды (36) оканчиваются членами c_s и c'_s , т. е. если $c_{s-1} = c'_{s-1} = 0$, то из формул (37), куда нужно вместо s подставить $s+1$, мы получим:

$$\frac{c_s}{a_1} + \frac{c'_s}{a} = 0, \quad -\frac{c'_s}{a_2} - \frac{c_s}{a} = 0.$$

Благодаря соотношению (34) эти равенства эквивалентны друг другу. Комбинируя их с (38), находим:

$$a_1 [a_2 + a_2(s-j)] = a [a_2 a - a(s+j)],$$

откуда следует:

$$2a_1 a_2 s = a(a_2 - a_1)a \quad \text{или} \quad \frac{s}{a} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{a_1} - \frac{1}{a_2} \right) a = \frac{H'}{c\hbar} a$$

(см. формулы 32). Возводя в квадрат и используя равенство (34), получаем:

$$s^2 \left(m^2 c^2 - \frac{H'^2}{c^2} \right) = a^2 \frac{H'^2}{c^2}.$$

Отсюда

$$\frac{H'}{mc^2} = \left(1 + \frac{\alpha^2}{s^2} \right)^{-\frac{1}{2}}.$$

Число s , которое здесь обозначает значок при последнем коэффициенте ряда, должно превосходить s_0 некоторое неотрицательное целое число. Обозначая это неотрицательное целое число буквой n , получаем:

$$s = n + \sqrt{j^2 - \alpha^2},$$

откуда

$$\frac{H'}{mc^2} = \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{(n + \sqrt{j^2 - \alpha^2})^2} \right\}^{-\frac{1}{2}}.$$

Эта формула, дающая дискретные энергетические уровни водородного спектра, была впервые выведена Зоммерфельдом на основе атомной теории Бора. В формулу входят два квантовые числа n и j , но так как α^2 очень малая величина, то энергия зависит почти исключительно от суммы $n + |j|$. Значения n и $|j|$, дающие ту же самую сумму $n + |j|$, приводят к целой системе близких друг ко другу энергетических уровней, которая может быть приближенно заменена одним уровнем, вычисленным в § 46 по нерелятивистской формуле (27) (нужно положить $s = n + |j|$)

Вообще говоря, j может принимать любые целые значения кроме нуля. Исключением является случай, когда $n=0$ и когда вследствие этого левая часть уравнения (38) исчезает тождественно. Более тщательное исследование показывает, что в этом случае j может принимать только отрицательные значения.¹

§ 79. ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ РЕШЕНИЙ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ЭНЕРГИЕЙ

Мы упоминали выше, что волновое уравнение для электрона допускает вдвое большее количество решений, чем следовало бы, причем половина всех этих решений относится к состояниям с отрицательным значением кинетической энергии $W + eA_0$. Эта трудность появилась в тот момент, когда от ур-ия (3) мы перешли к ур-ию (4) и она неизбежно возникает во всякой релятивистской теории. В классической теории относительности это затруднение также существует но там оно не является серьезным, так как классические динамические переменные должны изменяться непрерывно, и если кинетическая энергия $W + eA_0$, сначала была положительной (причем она должна была превосходить или по крайней мере равняться mc^2) то она уже не сможет стать отрицательной, так как для этого она должна стать меньше, чем $-mc^2$, или по крайней мере равной $-mc^2$.

Но в квантовой теории могут происходить и прерывные переходы, и если электрон первоначально находился в состоянии с положительной кинетической энергией, то он может перескочить в состояние с отрицательной кинетической энергией. Поэтому уже нельзя игнорировать существование состояний с отрицательной энергией, как можно было поступать в классической теории.

Рассмотрим несколько подробнее решения уравнения

$$\left\{ \left(\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right) + \alpha_x \left(p_x + \frac{e}{c} A_x \right) + \alpha_y \left(p_y + \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_z \left(p_z + \frac{e}{c} A_z \right) + \alpha_m mc \right\} \psi = 0, \quad (39)$$

¹ См. W. Gordon, ZS. f. Phys., 48, 11, 1928

соответствующие отрицательной кинетической энергии. Для этой цели удобно употребить такое представление величин α , в котором все элементы матриц, представляющих α_x , α_y и α_z вещественны, а все элементы матрицы, представляющей α_m чисто-мнимые числа. Такое представление можно получить например из того представления, которое дано в § 74, переставив α_y и α_m в формулах (7). С помощью этого представления, заменив i на $-i$ в операторе ур-ия (39), мы получим, учтя формулы (1) и (2):

$$\left\{ \left(-\frac{W}{c} + \frac{e}{c} A_0 \right) + \alpha_x \left(-p_x + \frac{e}{c} A_x \right) + \right. \\ \left. + \alpha_y \left(-p_y + \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_z \left(-p_z + \frac{e}{c} A_z \right) - \right. \\ \left. - \alpha_m mc \right\} \psi = 0. \quad (40)$$

Таким образом всякая волновая функция, комплексно сопряженная по отношению к решению уравнения (39), должна быть решением ур-ия (40). Далее, если решение ур-ия (39) соответствует отрицательному значению $W + eA_0$, комплексно-сопряженное с ним решение ур-ия (40) будет соответствовать положительному значению $W - eA_0$. Но ур-ие (40) имеет такой же вид, как если бы мы в ур-ии (39) заменили e на $-e$. Поэтому всякая волновая функция, комплексно-сопряженная по отношению к решению ур-ия (39), соответствующему отрицательной величине $W + eA_0$, есть решение, соответствующее положительному значению $W - eA_0$ волнового уравнения, получающегося из (39) заменой e на $-e$; следовательно это решение представляет электрон заряда $+e$, вместо $-e$, движущийся в данном электромагнитном поле. Таким образом ненужные решения ур-ия (39) связаны с движением электрона, обладающего зарядом $+e$. [Невозможно, конечно, при произвольном электромагнитном поле разделить решения уравнения (39) определенным образом на решения, относящиеся к положительным и к отрицательным значениям $W + eA_0$, так как такое разделение обозначало бы, что переходы от одного рода решений к другому в действительности не происходят. Предыдущее рассуждение является грубым и приближенным и относится к тому случаю, когда такое разделение приблизительно возможно.]

Таким путем мы вынуждены заключить, что решения уравнения (39), соответствующие отрицательным энергиям, относятся к движению протонов или водородных ядер, хотя и при этом сохраняется затруднение, связанное с большим различием в массе. Мы не можем однако просто утверждать, что решения с отрицательной энергией представляют протоны, так как все механические законы при этом стали бы неверными. Так например безусловно неверно, что протоны обладают отрицательной кинетической энергией. Поэтому мы должны трактовать протоны несколько иначе. Мы допускаем, что почти все состояния с отрицательной энергией заняты, причем в каждом состоянии находится только один электрон в согласии с правилом запрета Паули. Незаполненное состояние с отрицательной энергией представится нам как нечто с положительной энергией, потому что для того, чтобы оно исчезло, т. е. заполнилось, необходимо внести туда один электрон с отрицательной энергией. Мы предполагаем, что эти незанятые состояния с отрицательной энергией суть протоны.

Из этих допущений вытекает, что электроны распределены по всему миру с бесконечной плотностью в каждой точке. Совершенная пустота есть та область, где все состояния с положительной энергией не заняты, а все состояния с отрицательной энергией заняты. Уравнение Максвелла $\text{div}E=0$ в совершенной пустоте, разумеется, должно быть верным. Это значит, что бесконечная плотность электронов с отрицательной энергией ничего не прибавляет к электрическому полю. Только отступления от того распределения, которое имеет место в пустоте, составляют плотность ρ в уравнении Максвелла $\text{div}E = -4\pi\rho$. Каждое занятое состояние с положительной энергией прибавляет к этому ρ член $-e$, а каждое незанятое состояние с отрицательной энергией член $+e$.

Запрет Паули будет большей частью приводить к тому, что электрон с положительной энергией не сможет переходить в состояния с отрицательной энергией. Такой электрон может

однако упасть в незанятое состояние с отрицательной энергией. В этом случае электрон и протон одновременно исчезнут, и их энергия будет испущена в виде излучения. Вероятно такие процессы действительно происходят в природе.

Развиваемая здесь теория очень симметрична по отношению к электронам и протонам. Легко проверить однако, что эта симметрия перестает быть математически совершенной, если принять во внимание взаимодействие между электронами. Однако, в согласии с теперешними взглядами, эта причина кажется едва ли достаточной для того, чтобы объяснить наблюдаемое очень большое различие между электронами и протонами и в частности их различную массу. Возможно, что устранить это затруднение удастся тогда, когда мы будем лучше понимать природу взаимодействия.

WWW.NIX.RU

ДОПОЛНЕНИЯ РЕДАКТОРА К § 74. XIII.
ГЕОМЕТРИЗАЦИЯ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА.

Нам придется пользоваться основной метрической формой квадрата линейного элемента мира Пуанкаре - Минковского:

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx_1^2 - dx_2^2 - dx_3^2, \quad (1)$$

где

$$x_1, x_2, x_3 = x, y, z.$$

Это мероопределение будет частным случаем общего элемента мира Римана, где

$$ds^2 = g_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta, \quad (2)$$

($\alpha, \beta = 0, 1, 2, 3$) и $g_{\alpha\beta}$, функции всех четырех координат, суть ковариантные составляющие основного тензора. Для мира специальной теории относительности, как видно из сравнения (1) и (2):

$$g_{00} = +1; g_{\alpha\beta} = -1, \text{ где } \alpha = \beta = 1, 2, 3 \text{ и } g_{\alpha\beta} = 0 \text{ при } \alpha \neq \beta.$$

Контравариантные составляющие $g^{\alpha\beta}$ нашего частного случая равны соответственным ковариантным по определению: $g^{\alpha\beta} = \frac{D^{\alpha\beta}}{g}$, где $D^{\alpha\beta}$ миноры определителя, составленного из $g_{\alpha\beta}$,

а g - значение определителя. Для векторов же временные ковариантные составляющие равны временным контравариантным, а пространственные составляющие получаются путем перемены знака, например:

$$x^0 = \sum_{\alpha=0}^3 x_\alpha g^{\alpha 0} = x_0$$

$$x^1 = \sum_{\alpha=0}^3 x_\alpha g^{\alpha 1} = -x_1$$

[Поэтому ковариантные составляющие тока (§ 75) будут все со знаком плюс. Формула (22) § 75 запишется для любой метрики в виде четырехмерной расходимости:

$$\operatorname{div} A^\alpha = \sum_0^3 \frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{\partial}{\partial x^\alpha} A^\alpha \sqrt{-g}$$

и знак членов в сумме определится знаками составляющих вектора, так как $\sqrt{-g} = 1$].

Ур-ие (4) § 74 есть перевод на операторный язык классического релятивистского соотношения между энергией и количеством движения:

$$\left(\frac{W}{c}\right)^2 - m^2 c^2 - p^2 = 0, \quad (3)$$

Подстановка $p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ и $w = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ обращает (3) в

тождество. Вводя указанные значения $g^{\alpha\beta}$ перепишем (4) § 74 в виде:

$$\left\{ \left(\frac{W}{c}\right)^2 - m^2 c^2 - p^2 \right\} \psi = \left\{ \sum_0^3 g^{\alpha\beta} p_\alpha p_\beta - m^2 c^2 \right\} \psi = 0, \quad (4)$$

где

$$p_0 = \frac{W}{c}, p_1, p_2, p_3 = p_x, p_y, p_z.$$

Это уравнение можно считать ковариантным и по отношению к группе преобразований общей теории относительности, т. е. к группе всех точечных преобразований, если под подразумевать не их специальные значения мира Пуанкаре - Минковского, но общие $g^{\alpha\beta}$ мира Римана

Разделив обе части (2) на $d\tau^2$, $d\tau = \frac{ds}{c}$ есть собственное время,

$$\frac{ds^2}{d\tau^2} = c^2 = g^{\alpha\beta} v_\alpha v_\beta$$

получим:

(опуская знак Σ), где

$$v_a = \frac{dx_a}{d\tau},$$

составляющие четырехмерной скорости (косинусы мировой линии); так как $p_a = mv_a$, то ур-ие (4) по разделению на m^2 примет вид:

$$\left\{ \frac{ds^2}{d\tau^2} - c^2 \right\} \psi = \left\{ \sum_0^3 g^{i5} v_i v_5 - c^2 \right\} \psi = 0. \quad (5)$$

Мы видим, что оператор квантового „волнового“ уравнения тесно связан с видом линейного элемента данного мероопределения.

Нарушение симметрии ур - ия (4) членом $m^2 c^2$ привело к попыткам записать эти экстра-члены в виде второй производной по новой пятой координате, т. е. положить $m^2 c^2 \approx \frac{\partial^2}{\partial x^2_5}$ Следует признать,

что с помощью пятой координаты Калюца и др. сумели в симметричной и сжатой форме записать уравнение Эйнштейна для тяготения и уравнения Максвелла. О. Клейн как раз воспользовался пятой координатой для первого вывода релятивистского волнового уравнения второго порядка. Лишь после было замечено, что это уравнение непосредственно получается из классической гамильтоновой функции. Однако не только найти правильное линейное уравнение вида Дирака, но и переписать его уже post factum с помощью пятой координаты оказалось весьма затруднительным. Следует помнить, что в ds^2 вошли потенциалы, которые были явно введены в пятимерную метрику вместе с мировыми постоянными ϵ и τ , что вряд ли представляется естественным. Кроме того, физический смысл пятой координаты совершенно неясен, так что всю пятимерную теорию приходится рассматривать как формальную математическую схему.

Весьма естественно ввести вместо квадратичного ds^2 - линейное выражение:

$$ds = \sum_0^3 \gamma_a dx^a \quad (6)$$

и с его помощью так же представить оператор линейного уравнения Дирака, как с помощью ds^2 было записано уравнение второго порядка (4). Записав уравнение Дирака в виде:

$$\left\{ \sum_0^3 \gamma_a \frac{p_a}{m} - c \right\} \psi = 0, \quad (7)$$

можем наглядно толковать его как операторный перевод классической формулы:

$$\frac{ds}{d\tau} = \sum_0^3 \gamma_a \frac{p_a}{m} = \pm c; \quad \left(\frac{ds}{d\tau} \right)^2 = c^2.$$

С этой точки зрения некоторых успехов можно ожидать от введения новой улучшенной метрики, специально приспособленной к квантовым явлениям.

ОБЩАЯ ТЕОРИЯ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ. ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС ПОЛУВЕКТОРА.

От постоянных матриц Дирака, удовлетворяющих соотношениям $\gamma_\alpha \gamma_\beta + \gamma_\beta \gamma_\alpha = 2\delta_{\alpha\beta}$, перейдем к матрицам γ_{ν} таким, чтобы:

$$\gamma_\nu \gamma_\mu + \gamma_\mu \gamma_\nu = 2g_{\mu\nu}. \quad (8)$$

Для этого введем параметры h_a^ν (см. напр. превосходное изложение в книге Levi-Civita, Der absolute Differentialkalkül), и положим:

$$\gamma_a^\nu = \sum_0^3 e_a^\nu h_a^\nu \gamma_{a^\nu} \quad (9)$$

у •

где $e_0^\nu = +1$ и $e_{1,2,3}^\nu = -1$ суть коэффициенты, введенные в соответствии с различными знаками у отдельных членов основной квадратичной формы ds^2 . Параметры h_a^ν и соответственные им ковариантные $h_{\nu a}$ были введены Риччи и Леви-Чивита. Через каждую точку четырехмерного пространства можно провести четыре кривые, пересекающиеся в ней под прямым углом, — так называемая сетка ортогональных конгруенций (Vierbein). При твердо заданном ν , h_a^ν являются параметрами направлений этих кривых:

$$h_a^\nu = \frac{dx^\nu}{ds_a},$$

где ds_a — элемент дуги a -той кривой; при твердо заданном a , h_a^ν суть четыре составляющие вектора. Формула (9) переводит компоненты по конгруенциям в составляющие по координатам. Очевидно, для любого вектора:

$$A_a = \sum_0^3 e_k A_k h_{ka},$$

где, как и везде в этом параграфе, латинские буквы относятся к конгруенциям, греческие к координатам. Наиболее важной геометрической операцией является ковариантное дифференцирование и параллельный перенос. Выражение для изменения координатных составляющих вектора при параллельном переносе запишется так:

$$\delta A_a = \Gamma_{\alpha\sigma}^\beta A_\beta dx^\sigma, \quad (10)$$

где $\Gamma_{\alpha\sigma}^\beta$ — символы Кристоффеля

$$\Gamma_{\alpha\sigma}^\beta = \frac{1}{2} g^{\beta\gamma} \left(\frac{\partial g_{\alpha\gamma}}{\partial x^\sigma} + \frac{\partial g_{\sigma\gamma}}{\partial x^\alpha} - \frac{\partial g_{\alpha\sigma}}{\partial x^\gamma} \right).$$

Параллельный перенос в любом пространстве обобщает, как известно, обычное параллельное перемещение в плоском евклидовом пространстве так же, как геодезическая линия обобщает для случая кривого пространства прямую линию. При движении точки по геодезической линии и происходит, в частности, параллельный перенос вектора скорости. Ковариантное дифференцирование обобщает на случай любых криволинейных координат обычное дифференцирование $\frac{\partial}{\partial x}$

Введем коэффициенты вращения Риччи: $\gamma_{ikl} = (\nabla_a h^{\beta i}) h_{k\beta} h_l^\alpha$ где Δ_a , означает ковариантное дифференцирование по x_α обозначим через ds_k составляющие бесконечно малого перемещения по линиям ортогональной сетки. Мы получим для изменения составляющих вектора по линиям конгруэнции при его параллельном перемещении вдоль координатных линий:

$$\delta A_i = \sum_{ke} e_k e_e \gamma_{ike} A_k ds_e, \quad (11)$$

Найдем аналогично закон параллельного переноса полувектора Попробуем задать его в виде:

$$\delta \psi = \sum e_k C_k ds_k \psi \quad (12)$$

где C_k — четыре матрицы и $C_k \psi$, как обычно, 4 функции. Сопряженное уравнение будет:

$$\delta \varphi = \varphi \sum_k e_k C_k^+ ds_k,$$

где C_k^+ адьюнгированная, т. е. комплексно-сопряженная и транспонированная матрица. Тем самым определится закон переноса для вектора

$$A_i = \varphi \alpha_i \psi; \quad \delta A_i = \delta \varphi \cdot \alpha_i \psi + \varphi \cdot \alpha_i \delta \psi = \varphi \sum e_k (C_k^+ \alpha_i + \alpha_i C_k) ds_k \psi. \quad (13)$$

Сравнивая (13) с (11), получаем:

$$C_k^+ \alpha_i + \alpha_i C_k = \sum_e e_e \alpha_e \gamma_{iek}, \quad (14)$$

где α_i — одна из четырех матриц Дирака.

Непосредственно можно проверить, что

$$C_k = \frac{1}{4} \sum_m \alpha_m \alpha_e e_k \gamma_{mek} + i \Phi_k \quad (15)$$

будет решением уравнения (14) при условии, что Φ_k — вещественные эрмитовы матрицы, коммутирующие со всеми α_e , в виду чего их можно, по существу, положить просто равными числам Φ_k Ковариантная производная напишется, следовательно, так

$$\nabla_e \psi = \frac{\partial \psi}{\partial s_e} - C_e \psi. \quad (16)$$

Ковариантная же производная полувектора по координате равна,

$$\nabla_\sigma \psi = \frac{\partial \psi}{\partial x^\sigma} - C_\sigma \psi \quad (17)$$

(по общему правилу связи ковариантной производной и коэффициента параллельного переноса). Приняв γ_{jke} равными нулю, что соответствует

плоскому пространству (т. е. отсутствию гравитации в смысле Эйнштейна), получим:

$$\nabla_e \psi = \frac{\partial \psi}{\partial s_e} - i \Phi_e \psi. \quad (18)$$

В уравнение Дирака как раз входят члены

$$p_e + \frac{e}{c} A_e = \left(\frac{\partial}{\partial s_e} + \frac{ie}{\hbar c} A_e \right).$$

откуда видно, что четыре величины Φ_e , неизбежно появляющиеся при параллельном переносе ψ , можно толковать как слагающие векторного и скалярного потенциала с точностью до числового множителя $-\frac{e}{\hbar c}$. Таким образом, обычный оператор дифференцирования p в

применении к ψ обращается в общем случае в $p + \frac{e}{c} A$ — весьма важный результат, который

мы получили здесь без помощи классических аналогий. Замечательно, что электромагнетизм появляется в параллельном переносе полувектора в противоположность всем теориям, пытавшимся построить параллельный перенос вектора, в который вошли бы электромагнитные потенциалы или поле. В изложенной теории потенциалы не равняются нулю даже в плоском пространстве. В этом случае:

$$\partial \psi = \frac{ie}{\hbar c} \sum \Phi_e ds_e \psi, \quad (19)$$

где $\sum \Phi_e ds_e$ - линейная форма Вейля, играющая таким образом роль в переносе полувектора, а не вектора, как предполагал сначала Вейль в своей попытке построения единой теории поля, т. е. получения гравитации и электромагнетизма из одних и тех же ур-ий, имеющих геометрический смысл. После сказанного, непосредственно запишем уравнение Дирака в форме, требуемой общей теорией относительности* или в форме, пригодной для переписки в любых криволинейных координатах:

$$\sum_k e_k \alpha_k \nabla_k - \frac{imc \alpha_4}{\hbar}, \psi = 0$$

Или

$$\sum_{\gamma} \gamma^{\sigma} \nabla_{\sigma} \psi - \frac{i}{\hbar} mc \alpha_4 \psi = 0.$$

Изложенные результаты позволяют надеяться получить существенные указания при построении единой теории поля, исходящей, как мы видим из ур-ий электрона, а не пытающейся, как обычно, наоборот, получить квантовые ур-ия из макроскопических.

ЛИТЕРАТУРА

O. Klein. ZS. f. Phys. 46, 188. 1926.

V. Fock ebenda 1926.

H. Tetrode. ZS. f. Phys. 50, 336, 1928.

V. Fock und D. Iwanenko. ZS. (. Phys. 54, 798. 1929.

» *C. R., Paris.* /88,1470. 1929. *V. Fock.* ZS. f. Phys. 57, 261. 1929.

H. Weyl. Naturwiss. № 3, 1931. ZS. f. Phys. 56, 330. 1929.

V. Ambarzumian und D. Iwanenko. C. R. Leningrad A. 45, 1930.

E. Schrödinger. Ber. Ber. 1932.

ДОПОЛНЕНИЯ К ФОРМУЛАМ (5-4-7-8 § 74, XIII.

ЛИНЕАРИЗАЦИЯ И МАТРИЦЫ ДИРАКА.

Переход от ур-ия (4) $\left\{ \left(\frac{W}{c} \right)^2 \right\} - m^2 c^2 - p^2 \psi = 0$ к ур-ию (5) текста представляет пример

линеаризации, т. е. перехода к уравнению первого порядка, или факторизации, т. е. расчленения на два множителя. Так как требуемое линейное в операторах p_k уравнение есть сумма пяти членов вида $\gamma_k p_k$

то необходимо, очевидно, найти пять (пентаду) антикоммутирующих величин, в частности матриц, квадраты которых равнялись бы единице: $\gamma_k^2 = 1$; $\gamma_k \gamma_e + \gamma_e \gamma_k = 2\delta_{ke}$ Умножив

уравнение $\sum \gamma_k p_k \psi = 0$ мы считаем формально mc за p_4) на одну из матриц, например на мы получим уравнение, содержащее только четыре матрицы: $\left\{ p_0 + \sum_{k=1}^3 \gamma_0 \gamma_k p_k + \gamma_0 \gamma_4 mc \right\} \psi = 0$, так

как $\gamma_0^2 = 1$

$I^* = i$)

[см. формулу (5) текста].

Проблема линеаризации уравнения второго порядка вида (4) очевидно есть частный случай задачи о факторизации суммы n квадратов. Гурвиц показал, что матрицы, решающие задачу, должны быть, во-первых, четного ранга, во-вторых, ранг этот, при заданном числе матриц

$k = 2r + 1$, $n = 2r$, не может быть меньше $2r$. Так как для линеаризации пятичленного уравнения (4) нужно не меньше пяти матриц, то их ранг не может быть меньше четырех, на что и указывает в тексте Дирак. При $k = 3$ получим ранг два, что выполнено в трех антикоммутирующих матрицах Паули, см. § 43. Тем самым, фиксируется число компонент и у функции ψ , которое должно равняться четырем. Возникает вопрос о конкретном нахождении матриц пентады и о единственности решения. Для ясности, рассмотрим простейший случай линеаризации двумерного уравнения Лапласа:

$$\Delta \varphi = \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right\} \varphi = 0;$$

этому уравнению удовлетворяют обе составляющие φ_1 и φ_2 комплексного переменного $\omega = \varphi_1 + i\varphi_2$

так что можем написать:

$$\Delta \varphi_1 = \Delta \varphi_2 = 0 \text{ или } \Delta \varphi = 0, \text{ где } \varphi = \begin{vmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{vmatrix}$$

так же в случае отсутствия поля уравнению (4) § 74 удовлетворяют каждая из четырех

компонент $\psi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{vmatrix}$

Для линеаризации уравнения Лапласа нужно найти систему из двух (диаду) антикоммутирующих матриц. Ранг их будет, очевидно, равен двум. Нам известна система антикоммутирующих матриц Паули α , имеющих как раз ранг 2. Взяв две из них, например и получим символически квадратный корень из уравнения Лапласа в виде:

$$\sqrt{\Delta} \varphi = \left(\sigma_1 \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_3 \frac{\partial}{\partial y} \right) \varphi = 0;$$

или, умножая, справа на α_1 :

Или в виде двух уравнений, имея в виду, что φ тоже матрица:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + \sigma_3 \sigma_1 \frac{\partial}{\partial y} \right) \varphi = \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \sigma_2 \frac{\partial}{\partial y} \right) \varphi = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y} \right\} \varphi,$$

Это не что иное, как уравнения Коши-Римана для составляющих комплексной переменной. Простейшие гиперкомплексные числа, т. е.

обычные комплексные 1 и $i = \sqrt{-1}$, входящие в выражения переменной w , соответствуют матрицам: $1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ и $I = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$, которые позволяют

сокращенно записать два обычных уравнения в виде одного матричного. Можно показать, что процессы линеаризации весьма общи. Можно линеаризовать трехмерное уравнение Лапласа, четырехмерное уравнение Даламбера и т. д. Каждый раз мы будем встречаться с новой системой матриц или сопоставленных им гиперкомплексных чисел. Известно, что всякой системе матриц α можно сопоставить систему гиперкомплексных чисел по формуле: $\alpha \varphi_i = e_i U$, где φ есть матрица-колонка из составляющих φ_i ; e_i гиперкомплексные единицы и U - общий вид гиперкомплексного числа:

$$U = \sum e_i \varphi_i.$$

Так как в двумерном случае:

$$\begin{aligned} \alpha_1 \varphi &= e_1 \varphi_1 + e_3 \varphi_2 \\ \alpha_2 \varphi &= e_2 \varphi_1 - e_1 \varphi_2, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} e_1 &= 1 \\ e_2 &= i = \sqrt{-1}, \end{aligned}$$

то, как и следовало ожидать:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1 \\ \alpha_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i. \end{aligned}$$

Отметим, что кватернионам соответствуют матрицы Паули α или p . Действительно и кватернионы α и p^* суть системы из 4-х единиц (включая обычную единицу), определенные одними и теми же правилами умножения (см. § 43) с той только разницей, что кватернионы нормированы на -1 ($j_i^2 = j_i'^2 = j_i''^2 = -1$), а α или p на $+1$. Таким образом, точнее, кватернионам должны быть сопоставлены величины i_α и i_p . Конкретное представление этих матриц можно получить по общему правилу, приведенному выше. Еще Кэйли установил, каким образом кватерниону можно сопоставить матрицы. Матрица (43) в § 43 получается, по правилу Кэйли из кватерниона с составляющими по осям $1, m, n$.

Таким образом, вопрос об отыскании системы матриц, пригодной для линейаризации уравнений второго порядка указанного вида, эквивалентен вопросу об отыскании соответствующей системы гиперкомплексных чисел. Нам необходимо всегда брать полную систему гиперкомплексных чисел и из нее составлять диады, триады, пентады и т. д. антикоммутирующих матриц.

Поставив вопрос о линейаризации пятичленного уравнения:

$$\{ (W/c)^2 - m^2 c^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 \} \psi = 0,$$

мы, по-предыдущему, можем выбирать из нескольких систем гиперкомплексных чисел. Простейшей после кватернионов и содержащей не менее пяти единиц будет система квадрикватернионов, т. е. произведение двух систем независимых кватернионов, составленное так, что $j_i j_i''$ (один и два штриха отмечают единицы первого и второго кватернионов), но внутри системы $j_1 j_2' = j_3$ и $j_1'' j_2'' = j_2'' j_1''$ и т.д.

Система эта будет иметь 16 независимых единиц, которым будут соответствовать 16 независимых матриц; составляя последние по указанному выше правилу, можно убедиться, что эти 16 матриц суть не что иное, как все возможные 16 дираковских матриц. Вопросом о факторизации суммы p квадратов при помощи гиперкомплексных чисел занимался Липшиц. Непосредственной проверкой легко убедиться, что из 16-ти квадрикватернионных единиц можно образовать 6 пятерок (пентад) таких, что все 5 матриц одной пентады антикоммутируют между собой, $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ соответствуют одному кватерниону; p_1, p_2, p_3 - другому.

Специализируя общий вид гиперкомплексного ψ , колонки с 16 членами, требованием $U_k = U_{16-k}$, где U_k - вещественные части дираковских 16 функций ψ , получим 8 вещественных или 4 комплексных величины ψ

В виду того, что ур-ия Коши-Римана, так же как и ур-ие Дирака, получаются путем некоторой линейаризации, интересно было бы развить теорию функций гиперкомплексных величин.

Произведя умножение на $p_1 \alpha_i$ на $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$, выпишем ур-ие Дирака в виде четырех

уравнений:

$$\begin{aligned} (p_0 + mc) \psi_1 + (p_1 - i p_2) \psi_4 + p_3 \psi_3 &= 0 \\ (p_0 + mc) \psi_2 + (p_1 - i p_2) \psi_3 - p_3 \psi_4 &= 0 \\ (p_0 - mc) \psi_3 + (p_1 - i p_2) \psi_2 + p_3 \psi_1 &= 0 \\ (p_0 - mc) \psi_4 + (p_1 - i p_2) \psi_1 - p_3 \psi_2 &= 0. \end{aligned}$$

Мы видим, что без введения матриц оперирование с такими, не слишком симметричными,

Ур-ми было бы крайне затруднено. В отсутствие поля для каждого из четырех ψ_i получается, как указывалось, ур-ие второго порядка, вида (4) § 74.

Так как квадраты всех α, ρ и $\alpha \rho$ равны единице, то сами $\alpha_i p_k$ имеют собственные значения ± 1 . Поэтому $i\rho_1^{\delta}$ например, имеет чисто мнимые собственные значения.

В литературе нет общепризнанного названия для четырех дираковских функций ψ . Были предложены термины: спинор (Эренфест), полувектор или тензор половинного ранга (Ландау), последнее - так как вектор (но впрочем, и тензора высшего ранга) составлен билинейно из ψ и φ .

ЛИТЕРАТУРА

A. Hurwitz. Math. Ann. US, 1, 1922

H Rothe Enzyklopiidlc der math.

W Issensch. III AB 11.

E. Guth, Wiener Ber. December 1928.

I Schouten, Amsterdam. Proc. 32, 105, 1929.

Al.Proca. Journ.de Phys.VII, 1, 235, 1930.

A.S. Eddington, Proc. Roy.Soc. (A) 121, 524, 1928 и 122, 358, 1929.

F. Sauter, ZS. f. Phys. 63, 803. 1930 64. 295, 1930.

C. Lanczos, ZS. f. Phys.54, 447, 1929.

D.Iwanenko und K. Nikohky, ZS. f. Phys. 63, 129, 1930.

K. Nikohky C. R.. Leningrad. 701, 1930 и 667, 1930.

ДОПОЛНЕНИЯ К § 75, XIII.

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ПОЛУВЕКТОРА.

Формулы преобразования прямоугольных координат, т. е. составляющих вектора, при повороте на угол φ (от x к y) в плоскости (xy) гласят:

$$x' = x \cos \varphi + y \sin \varphi; \quad y' = -x \sin \varphi + y \cos \varphi. \quad (1)$$

Известно, что переход к частному преобразованию Лоренца означает поворот на угол φ в плоскости (x_1, x_0), где $x_0 = ict, x_1 = x_3$,

$$\cos \varphi = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad \sin \varphi = \frac{iv/c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad v - \text{ скорость частицы, } c - \text{ скорость света.}$$

Оба эти поворота можно назвать круговыми, так как при этом

остается инвариантным выражение: $x_1^2 + x_0^2$ или $x^2 + y^2 = x'^2 + y'^2$

Вместо мнимой координаты можно ввести, - что везде и проделано в тексте,- вещественную $x_0 = ct$, но вращение произвести на мнимый угол $i\varphi$ Действительно, вспоминая, что

$$\cosh \varphi = \frac{e^\varphi + e^{-\varphi}}{2} = \cos i\varphi \quad \text{и} \quad \sin i\varphi = -i \sinh \varphi$$

получим:

$$\left. \begin{aligned} x'_1 &= x_1 \cos i\varphi + ict \sin i\varphi = x_1 \cos h\varphi + x_0 \sin h\varphi, \\ ict' &= -x_1 \sin i\varphi + ict \cos i\varphi = x_1 \sin h\varphi + ict \cos h\varphi, \end{aligned} \right\} (2)$$

или

$$x'_0 = x_1 \sin h\varphi + x_0 \cos h\varphi$$

Такое преобразование и называется гиперболическим поворотом. Оно заключается в переходе от гипербол $x^2 - ct^2 = \text{const}$ к гиперболам $x_1^2 - c^2 t^2 = \text{const}$. Три поворота Лоренца в плоскостях (xt), (yt), (zt) вместе с тремя обычными пространственными вращениями составляют группу шести поворотов в четырехмерном мире.

Обращаясь к преобразованиям полувектора, покажем происхождение характерных половинных углов [см. формулы текста (20) и ниже].

Девять величин косинусов $a_{\mu\nu}$, формулы (12) сводятся к трем независимым, в виду шести соотношений между косинусами вида:

$$a_{\mu 1}^2 + a_{\mu 2}^2 + a_{\mu 3}^2 = 1 \quad \text{и т. д.}$$

Нам нужно найти три независимых параметра (мы ограничиваемся группой пространственных, в обычном смысле, вращений), в которых косинусы $a_{\mu\nu}$ выражались бы билинейно.

Для этого можно взять или кватернионные параметры:

$$\xi, \eta, \zeta, \chi; Q = j_1 \xi + j_2 \eta + j_3 \zeta + \chi; j_1^2 = j_2^2 = j_3^2 = -1; j_1 j_2 = -j_2 j_1 = j_3 \quad (3)$$

или параметры Кэйли-Клейна $\alpha, \beta, \gamma, \delta$:

$$\xi = \frac{\beta - \gamma}{2}, \eta = \frac{\beta + \gamma}{2i}, \zeta = \frac{\alpha - \delta}{2i}, \chi = \frac{\alpha + \delta}{2}. \quad (4)$$

Действительно, нормируя кватернион Q условием $\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2 + \chi^2 = 1$ и параметры Кэйли-Клейна соотношением $\alpha\delta - \beta\gamma = 1$, будем в обоих случаях иметь не четыре, а три независимых параметра.

Поворот в плоскости (xy) на угол $\varphi = -\omega$ можно записать, вводя комплексные величины, в виде:

$$r' = x' + iy' = e^{-i\omega/2} r e^{i\omega/2} = TrT, \quad (5)$$

где T —оператор вращения на половинный угол, $T = \cos \frac{\omega}{2} + \sin \frac{\omega}{2} * i$ и $r = x + iy$.

Аналогично плоскому случаю, введем трехмерный вектор r с компонентами x, y, z и запишем его в виде кватерниона $r = j_1 x + j_2 y + j_3 z$, тогда переход к преобразованному вращением на угол ω вектору $r = j_1 x' + j_2 y' + j_3 z'$ запишется с помощью операторов вращения—кватернионов Q в следующем виде:

$$r' = QrQ^{-1} \quad (6)$$

где $Q^{-1} Q = 1$, т. е. Q^{-1} есть кватернион, у которого векторные компоненты взяты с обратным знаком.

Обобщая операцию плоского случая $T = e^{i\alpha/2}$, см. (5), кватернион Q имеет вид:

.. 0> 0>

$$Q = \cos \frac{\omega}{2} + \sin \frac{\omega}{2} (j_1 \cos \alpha + j_2 \cos \beta + j_3 \cos \gamma), \quad (7)$$

где ω — угол вращения вокруг оси, направляющие косинусы которой равны: $\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma$ символически:

$$Q = e^{\frac{\omega}{2} \sum_{k=1}^3 j_k \cos \alpha_k}$$

На простом примере, скажем, вращения вокруг оси z в плоскости (xy) (когда $\cos \alpha = \cos \beta = 0, \cos \gamma = 1$) на угол ω в направлении от y к x , убеждаемся в справедливости формулы (6); так как в этом случае $\xi = \eta = 0, \zeta = \sin \frac{1}{2} \omega, \chi = \cos \frac{1}{2} \omega$, то:

$$Q = \cos \frac{1}{2} \omega + j_3 \sin \frac{1}{2} \omega, \quad Q^{-1} = \cos \frac{1}{2} \omega - j_3 \sin \frac{1}{2} \omega.$$

Перемножая QrQ^{-1} по правилу кватернионного умножения, получим обычную формулу поворота вектора в плоскости xy с добавочным условием: $z' = z$. Для этого частного случая параметры Кэйли-Клейна

равны: $\beta = \gamma = 0; \alpha = \cos \frac{\omega}{2} + i \sin \frac{\omega}{2}; \delta = \cos \frac{\omega}{2} - i \sin \frac{\omega}{2}$. Известно далее, что удобно сопоставить

кватерниону Q матрицу $S = \begin{vmatrix} \chi + i\zeta & \xi + i\eta \\ \xi + i\eta & \chi - i\zeta \end{vmatrix}$ и умножение кватернионов заменить умножением

матриц. Заменив кватернионные параметры ξ, η, ζ, χ через параметры Кэйли-Клейна, получим — вместо кватерниона Q — оператора вращения

на половинный угол — матрицу $S = \begin{vmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{vmatrix}$

Вспоминая, что матрицы Паули α_k (§ 43) соответствуют кватернионам, можем закон преобразования записать с помощью матриц α_k :

$$Q = \cos \frac{\omega}{2} + i (\sigma_1 \cos \alpha + \sigma_2 \cos \beta + \sigma_3 \cos \gamma) \sin \frac{\omega}{2}; \quad (8)$$

так как α_k действует на четыре компоненты ψ , т. е. на матрицу, состоящую из одной колонки с

четырьмя элементами $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$, то и α_k нужно считать четырехколонной матрицей (см. § 74).

Отсюда и получаем формулу текста книги для частного случая вращения в плоскости (z,y) вокруг оси x на угол θ :

$$Q = e^{-\frac{i\theta\sigma_1}{2}} = e^{\frac{\theta}{2}\sigma_3\sigma_2} = e^{-\frac{\theta}{2}\sigma_2\sigma_3} = e^{+\frac{\theta}{2}\sigma_2\sigma_3}.$$

Последнее равенство имеет место в виду:

$$\alpha_2 = \rho_1\sigma_2; \quad \alpha_2\alpha_3 = \sigma_2\sigma_3 \\ \alpha_3 = \rho_1\sigma_3;$$

Из сравнения кватернионных формул преобразования с формулой текста, написанной после (21), видно, что

$$Q = \bar{\gamma} \text{ и } Q^{-1} = \gamma.$$

Заметим, что каждая ось x_k имеет в операторе преобразования „свою“ матрицу α_k . Прделав общее преобразование вращения в четырехмерном мире с помощью кватернионов или параметров Кэйли-Клейна (очевидно, кроме α_k придется ввести и кватернионы ρ_k , ибо три независимых параметра α_k уже использованы на трехмерный поворот), убедимся, что и в общем случае полуекторы ψ и φ преобразуются с помощью половинных углов. При пользовании кватернионами наиболее ясно выступает происхождение половинных углов.

ЛИТЕРАТУРА.

P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc. A. 117, 351, 118, 610. 1928.

C. G. Darwin. Proc. Roy. Soc. A. 118, 654. 1928.

F. Möglich. ZS. f. Phys. 48, 852. 1928.

J. V. Neumann. ZS. f. Phys. 48, 868. 1928.

F. Klein und A. Sommerfeld. Über die Theorie des Kreisels, Heft 1.

L. Silberstein. The theory of relativity.

Van der Waerden. Göttinger Nachrichten, 1929.

ДОПОЛНЕНИЕ К § 75 и § 79, XIII.

СКОРОСТЬ ЭЛЕКТРОНА И ПЛЮС-МИНУС ТРУДНОСТЬ.

Кроме величин $\alpha_i c$ точно до числового множителя равных составляющим магнитного момента электрона, непосредственный физический смысл имеют также матрицы $\rho_1 \alpha_i$ входящие в уравнение Дирака. Применяя правило § 33, VI для получения производной по времени, найдем составляющие трехмерной скорости x, y, z с помощью гамильтоновой функции ур-ия Дирака

$$H = eA_0 + c\rho_1 \left(\sigma, p + \frac{e}{c} A \right) + c\rho_3 mc. \quad (1)$$

Вывод этот будет вполне аналогичен рассуждениям § 39 с формулами (2), (3), (4), и мы получим:

$$\dot{x} = \frac{i}{\hbar} (Hx - xH) = c\rho_1 \sigma_1, \quad (2)$$

ибо с x антикоммутирует только член, содержащий ρ_1

„ и т. д. Непосредственно получить значение $\rho_1 \alpha_r$ можно еще взяв производную от выражения (1) по p_r

Так как собственные значения операторов $\rho_1 \alpha_i$, равны ± 1 , то собственные значения составляющих трехмерной скорости равны $\pm c$; c - скорость света. Прделав то же с приближенной гамильтоновой функцией $H = \frac{1}{2m} p^2$ (в отсутствии поля),

мы получим обычный результат $x = \frac{p}{m}$ (с. § 12). Выражение $c \rho_1 \alpha_k$

есть, очевидно, групповая скорость. Скорость фронта волн Де Бройля тоже равняется всегда скорости света, что видно из ур-ия (4) § 74: $\nabla \psi - m^2 c^2 \psi = 0$, так как скорость фронта определяется главными членами уравнения, т. е. выражением $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$.

Заметим, что три составляющие скорости одновременно не наблюдаемы, т. е. возможно измерить в данный момент только одну составляющую скорости по какому-либо направлению. Операторы $\rho \alpha_i$ замещают классическую скорость v в целом ряде квантовых формул. Например, обозначая через

$$p_1 = \frac{mx}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad p_2 = \frac{my}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad p_3 = \frac{mz}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}},$$

$$p_0 = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

составляющие четырехмерного импульса получим квантовое уравнение движения электрона по формуле (15) VI.

$$\frac{d}{dt} \frac{mx}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = -e \mathcal{E}_x - e (\alpha_2 \mathcal{H}_z - \alpha_3 \mathcal{H}_y) \quad (3)$$

и аналогичные ур-ия для p_2 , p_3 и p_4 , в полной параллели с уравнениями движения специальной теории относительности:

$$\frac{dp_1}{dt} = -e \mathcal{E}_x - e [v \mathcal{H}]_x \text{ и т. д.}$$

т. д.

Квантовые символические уравнения движения (3) имеют, очевидно, тот же смысл, как и гамильтоновы уравнения §32 и §33.

Аналогично имеем для вектор-потенциала: $A_i = \frac{\rho_1 \alpha_i}{r} A_i$, как перевод

классической формулы: $A_i = \int \frac{\rho v_i}{r} d\tau$. Беря за ρ плотность вероятности

$\varphi \psi$; непосредственно толкуем интеграл $\int \frac{\varphi v_i \psi d\tau}{r}$ как математическое

ожидание оператора $\frac{\rho_i \alpha_i}{r}$. Далее, в классическом выражении энергии взаимодействия двух электронов, движущихся со скоростями $v' u v''$

входят члены вида: $\frac{e^2}{r} v' v''$. Этот типичный член перепишем, согласно

предыдущему, заменяя v' на $\rho_1 \alpha$, как:

$$\frac{e^2}{r} \rho_1' \alpha_i' \rho_1'' \alpha_i'',$$

где дважды штрихованные величины относятся ко второй частице.

Указанные выражения для вектор-потенциала и энергии взаимодействия применялись при вычислении триплетов гелия Гонтом, Брейтом и др.

Заметив, что, после исключения времени, p_0 заменяется через $\frac{E + eA_0}{c}$, разделим ψ на

большие и малые компоненты. Так как ψ_1 стоит при очень большой величине $\approx 2mc$, то оно мало, так же как и ψ_2 . Действуя с матричным ур-ем (8) §74, произведем умножение на ρ_1 , заменяющее две большие компоненты двумя малыми; мы получим

$$\psi_{1,2} = -\frac{1}{2mc} (\sigma, p) \psi_{3,4}.$$

Перейдя от четырех функций ψ к двум, т. е. положив,

$$\psi_{1,2} = -\frac{1}{2mc} (\alpha \rho) \psi_{3,4} \text{ и } \varphi_{1,2} = -\frac{1}{2mc} \varphi_{3,4} (\alpha \rho)$$

мы получим соответственно

приближенное выражение для тока и вектор потенциала. Например x -овая составляющая вектор - потенциала запишется так:

$$\varphi \frac{\rho_1 \sigma_1}{r} \psi = \varphi_1 \frac{\sigma}{r} \psi_3 + \varphi_2 \frac{\sigma}{r} \psi_4 + \varphi_3 \frac{\sigma}{r} \psi_1 + \varphi_4 \frac{\sigma}{r} \psi_2 \approx -\frac{1}{2mc} \varphi \left\{ (\sigma p) \frac{\sigma^*}{r} + \right. \\ \left. + \frac{\sigma}{r} (\sigma p) \right\} = -\frac{1}{2mc} \left\{ p \frac{1}{r} + \frac{1}{r} p \right\} - \frac{e\hbar}{2mc} \left[\sigma, \nabla \frac{1}{r} \right], \quad (5)$$

при помощи формулы (25) § 76. Таким образом, $\rho_1 \sigma$

расщепляется на часть, соответствующую конвекционному току $\frac{p}{m}$, и часть, представляющую спин.

Чрезвычайно неожиданным во всем этом оказывается ограничение спектра возможных значений составляющих скорости электрона (то же относится и к протону, так как масса частицы не входит в формулу) двумя значениями: \pm скорость света!

Для случая свободного движения Шредингер проинтегрировал уравнение

$$\ddot{x}_k = c \dot{\alpha}_k \quad (\alpha_1 = \rho_1 \sigma_1).$$

Вводя

$$\eta = \alpha - cH^{-1}p,$$

имеем:

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{d\alpha}{dt} = \frac{2iH\eta}{\hbar} = -\frac{2i\eta H}{\hbar}. \quad (6)$$

откуда

$$\eta = \eta_0 e^{-2i\eta H t / \hbar} = \eta_0 e^{+2i\eta H t / \hbar} \quad \text{и}$$

$$\alpha = cH^{-1}p + \eta_0 e^{-2iHt/\hbar};$$

$$x = x_0 + c^2 H^{-1} p t + \frac{i\hbar}{2} \eta_0 H^{-1} e^{-2iHt/\hbar}$$

($c^2 H^{-1} p$ есть групповая скорость, тогда как \square - фазовая скорость).

Движение электрона складывается, таким образом, из трансляции со скоростью

$$c^2 H^{-1} p \left(\approx \frac{c^2 m v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \cdot \frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{mc^2} = v \right)$$

и наложенного на нее движения с большой частотой ν

$$\nu = \frac{2H}{\hbar} = \frac{2mc^2}{\hbar \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Усредняя по времени, пока что с целью получить более наглядный квазиклассический результат, получим:

$$\bar{x} = c \alpha_1 = c^2 p H^{-1} \approx \pm \frac{p}{m} \quad (8)$$

т. е. усредненная скорость электрона равна групповой скорости приписанных ему волн. Оба знака взяты в виду двузначности энергии.

Точное измерение составляющей скорости влечет полную неопределенность для значений энергии (так как $\rho_1 \sigma$ не коммутирует с энергией даже при отсутствии поля). В частности будут вероятны также и все значения отрицательной энергии. То же относится и к измерению магнитного момента.

Замечательно, что теория Дирака вводит такое своеобразное понятие скорости даже для свободного электрона. Связь новой скорости с вопросом о допустимых значениях энергии формально можем видеть в том обстоятельстве, что для составления скорости, кроме величин σ , описывающих спин, первую внутреннюю степень свободы электрона, входит еще матрица ρ_1 — представительница тройки величин ρ_i описывающих другую внутреннюю степень свободы электрона, тесно связанную с наличием отрицательных уровней энергии; ибо, вводя одни лишь σ_i мы имели бы только две слагающих ψ и не имели бы лишних отрицательных уровней.

Оказывается, что подобно операторам скорости координаты спина или магнитного момента электрона и все другие операторы расщепляются на части: „обычную“ и „колебательную“ (дающую переходы на отрицательные уровни). Таким образом, усредняя по времени, мы отбрасываем движение, связанное с переходами на отрицательные состояния. Вместе с тем мы совершаем некоторую ошибку, порядка амплитуды отбрасываемой части.

Например, для координаты отбрасывается величина $\Delta x = \frac{i\hbar}{2} \eta_0 H^{-1} e^{\frac{iHt}{\hbar}}$ с амплитудой порядка $\frac{c\hbar}{H}$, или, подставляя вместо H приближенно $m_0 c^2$, $\Delta x \approx \frac{h}{m_0 c}$. Этот весьма замечательный

результат показывает нам, что «улучшенная» теория Дирака (с запретом отрицательных состояний) не позволяет вообще измерять величины сколь угодно точно, но лишь с некоторой «индивидуальной» ошибкой. Мы говорим здесь об «индивидуальной» ошибке в противоположность «парным» ошибкам в принципе Гейзенберга, где всякую величину отдельно можно мерять сколь угодно точно.

Больше того, оказывается, что совершенно независимо от теории Дирака с его гамильтоновой функцией, зараженной плюс - минус трудностью, ряд простых соображений, обобщающих принцип Гейзенберга на релятивистский случай, приводит к тем же «индивидуальным» ошибкам. Например, по формуле $\Delta p \Delta x \approx h$ для возможно точного измерения координаты - малое Δx - нужно пожертвовать точностью в импульсе, взяв большое Δp , скажем, осветить очень короткими волнами. Но в релятивистском случае здесь выступают на сцену следствия преобразования Лоренца, говорящие нам, что тело, получившее большой импульс от света, сильно сократится и эта погрешность испортит нам выгодность измерения координаты при совсем неточно заданном импульсе. Таким образом, ошибка в измерении координаты будет складываться из двух частей: обычная ошибка порядка длины волны света λ плюс поправка на релятивистское сокращение

$$\Delta x \approx \lambda + x \left(\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - 1 \right),$$

где x - неизвестная измеряемая длина или значение координаты. Скорость v найдется из соотношения:

$$\frac{m v}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = h/\lambda.$$

При некотором λ ошибка Δx будет минимальной, но никогда не равной нулю. Взяв случай медленного движения, т. е. малых v , убедимся, что $\Delta x_{\min} \approx \frac{h}{m_0 c}$.

Аналогично получим индивидуальную ошибку для измерения времени: $\Delta t_{\min} \approx \frac{h}{m_0 c}$.

Факт существования нижней границы для измерения времени говорит нам, что всякое измерение принципиально имеет некоторую длительность. Отсюда вытекает в частности необходимость усреднения, указанного выше, а также недопустимость говорить о повторяемых наблюдениях (см. I главу книги) в релятивистской теории.

Были указаны индивидуальные ошибки для ряда величин (импульс, электрическое и магнитное поле); как мы видели, имея конкретную гамильтонову функцию, например диракову, весьма просто найти нижние границы для любой величины.

Интересно, что простейший пример движения электрона в постоянном поле потенциала U может уже служить, как указал Клейн, иллюстрацией появления отрицательных значений энергии.

Ограничимся одномерным случаем и положим $U=0$ при отрицательных x и $U=\text{const}$ при $x>0$, и рассмотрим задачу отражения и проникновения волн де Бройля за такой потенциальный барьер.

Падающую волну возьмем в виде:

$$\psi = \alpha e^{\frac{i}{\hbar}(px - Wt)}; \quad (1)$$

подставляя в уравнение Дирака, имеем:

$$\left(\frac{W}{c} + \rho_3 mc + \frac{\hbar}{i} \rho_1 \sigma_1 \frac{\partial}{\partial x}\right) a e^{i p x} = \left(\frac{W}{c} + \rho_3 mc + \rho_1 \sigma_1 p\right) a = 0,$$

что ведет к релятивистскому соотношению, имеющему место вне барьера:

$$\left(\frac{W}{c}\right)^2 = m^2 c^2 + p^2, \quad (2)$$

выполненному в виде $a \neq 0$.

Мы не будем производить подсчета по уравнению Дирака, так как суть дела лежит в соотношении (2). почему «+ - трудность» присуща и уравнению второго порядка (4) § 74.

Внутри барьера будем иметь соотношение:

$$\left(\frac{W - eU}{c}\right)^2 = m^2 c^2 + p^2; \quad p_1 = \pm \sqrt{\left(\frac{W - eU}{c}\right)^2 - m^2 c^2}, \quad (3)$$

где p_1 - импульс прошедших волн.

При увеличении высоты потенциальной стенки U , p_1 будет сперва уменьшаться и при $U = W - mc^2$ обратится в нуль. Все электроны будут отражаться от стенки при этом значении

U . При последующем увеличении $eU \left(\frac{W - eU}{c}\right)^2$ будет меньше нуля, и мы перейдем в область

мнимых количеств движения, что в классической механике являлось возможным. Физически процесс будет вполне аналогичен полному внутреннему отражению в оптике: волны вида

$e^{\frac{i}{\hbar}(ip')x} = e^{-\frac{ip'x}{\hbar}}$ хотя и проникают за границу $x=0$, но затухают с расстоянием. Но парадоксальным являясь появление незатухающих колебаний справа от потенциальной стенки при еще большем увеличении ее высоты. При $eU > W + mc^2$ количество движения p''

прошедших волн будет опять вещественно. Волны будут иметь вид $\psi = e^{\frac{i}{\hbar}p''x}$, что указывает

на прохождение электронов через барьер. Групповая скорость $v = \frac{c^2 p''}{W - eU}$ при отрицательном

$W - eU$ будет направлена против импульса p'' и будет по абсолютной величине равна:

$$|v| = \frac{c^2}{eU - W} \sqrt{\left(\frac{W - eU}{c}\right)^2 - m^2 c^2} = c \sqrt{1 - \left(\frac{m^2 c^2}{W - eU}\right)^2}, \quad (4)$$

при критической величине $eU = W + mc^2$ групповая скорость v равна нулю, электроны за барьер не проникают. Групповая скорость растет вместе с увеличением U и при $U = \infty$ достигает скорости света. Заметим, что, так как координата не коммутирует с энергией, то нельзя, например, говорить о точном значении энергии справа от $x=0$, т.е. в точно определенной области пространства.

Проникновение электрона за барьер не зависит от его формы. Для барьера вида $U = \frac{1}{2} m v_0^2 x^2$, т.е. для задачи осциллятора, расчет Никольского непосредственно подтверждает это. Оказывается, что осциллятор по теории относительности имеет непрерывный спектр. Перейдя же от релятивистского уравнения при $c \rightarrow \infty$ со к уравнению Шредингера, получим обычное решение.

Ряд авторов вычисляли вероятность перехода электрона на отрицательный незанятый уровень, т. е. вероятность его соединения с прогоном по гипотезе Дирака, оставленной впрочем, им ныне. Для числа таких переходов в секунду получается примерно величина

$Z = \frac{d^2 c N}{V}$, [где $d = \frac{e^2}{mc^2}$, величина порядка радиуса электрона по классической теории, V -

объем, N — число частиц, c — скорость света], равная, таким образом газ-кинетическому выражению числа столкновений между двумя шариками с радиусами электронов, двигающихся с относительной скоростью c . Величина эта равна примерно 10^6 , если подставить радиус электрона 10^{-13} и принять число протонов в куб. сантиметре за 10^{22} , что

соответствует малой плотности материи. Отсюда для времени жизни: $T = \frac{1}{Z} = 10^{-6}$ сек. Этот

явно абсурдный результат показывает, что, если вообще гипотеза Дирака о возможности перехода с положительных уровней на отрицательные была бы справедлива, то для подсчета вероятности следует точнее учесть природу действующих между электроном и протоном сил. Порядок результата не изменится, если мы возьмем не радиус электрона, а радиус протона; вся материя должна была бы весьма быстро уничтожиться, т. е. перейти в излучение.

Н. Бор полагает, что решение вопроса о различии масс протона и электрона лежит вне пределов настоящей теории, что формально и выражается в наличии m_0 и c как коэффициентов в уравнении Дирака. Относясь скептически к теории Дирака, изложенной в последнем параграфе книги, Бор полагал, в частности, возможным устранить парадокс Клейна с переходом электронов через барьер другим путем. Потенциальный барьер высоты V реально можно осуществить, скажем, путем создания двойного слоя положительного и отрицательного электричества. В виду существования конечного радиуса у электронов и протонов по классической теории, возможно, поместить частицы не ближе некоторого минимального расстояния друг к другу, т. е. создать потенциал слоя не больше некоторого определенного V_{\max} . Взяв за радиус электрона и толщину слоя классическую величину

$r_0 = \frac{e^2}{mc^2}$, мы из формулы для скачка потенциала двойного слоя $\varphi_2 - \varphi_1 = 2\pi e^2 N l$, где l -

толщина слоя, а N - число частиц на единицу площади $N = \frac{2}{r_0^2}$, получим:

$$\varphi_2 - \varphi_1 \cong \frac{2\pi e^2 \cdot 2 \cdot mc^2}{r_0^2 \cdot e^2} \cong m_0 c^2$$

(в одной точке две частицы с противоположными спинами), т. е. как раз критическую высоту барьера Клейна. Таким образом, возможно, что потенциалы больше критических реально вообще неосуществимы. Кроме придания смысла классическому радиусу электрона (понятию, не нашедшему до сего времени эквивалента в квантовой механике), в этом примере интересно стремление Бора возможно более конкретно подойти к поставленной задаче. Мы не можем касаться здесь астрофизических аргументов в пользу необходимости так называемого уничтожения материи (перехода электронов и протонов в фотоны), а также опытов Милликена над проникающей радиацией, частота которой равна примерно частоте фотонов, получающихся в результате уничтожения материи.

Так как в теорию введены минимальные значения для координат и времени, то естественно пытаться строить такую геометрию, в которой были бы учтены эти моменты. С другой стороны, заманчиво устранить плюс-минус трудность, введя существенную неинвариантность относительно перемены направления времени, так как знак энергии тесно связан со знаком времени. Возможно, что для этого придется ввести в теорию основное асимметричное понятие «до» («Früher als»), взятое из топологии.

Отметим, в заключение, что понятие о минимальном значении координаты может оказаться полезным для решения второй фундаментальной трудности вопроса о бесконечной собственной энергии электрона, чего мы здесь не касались. В настоящее время (весна 1931 г.) среди теоретиков господствует убеждение, однако, что обе основные трудности будут преодолены значительно более радикальной теорией, которая вместе с тем даст нам возможность овладеть закономерностями процессов в ядре, процессов столь отличных от обычных атомных, что приходится говорить о потере электроном ядра своей индивидуальности.

ЛИТЕРАТУРА О СКОРОСТИ ЭЛЕКТРОНА

- G. Breit, Proc. Nat. Ac. c14,553, 1923,17,70,1931.
V. Fock, ZS. f. Phys.55, 127, 1929/
E. Schrödinger, Berliner Ber. 418, 1930.
J. A. Gaunt, Proc. Roy. Soc. (A) 122, 513, 1929.
G. Breit, Phys. Rev. 34, 553, 1929.
W. Gordon, ZS. f. Phys. 59, 630, 1928.
D. Iwanenko, ZS. f. Phys. 55, 141, 1929; 72, 621, 1931.
W. Elsasser, ZS. f. Phys; 1932.

ЛИТЕРАТУРА О ПЛЮС-МИНУС ТРУДНОСТИ И РАДИУСЕ ЭЛЕКТРОНА

- P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc. (A) 126, 360, 1930.
Nature CXXVI, 605, 1930.
Proc. Cambr. Phil. Soc. XXVI, 362, 1930.
O. Klein. ZS. f. Phys. 53, 157, 1928.
K. Nikolsky. . ZS. f. Phys. 62, 667, 1930.
F. Sauter. ZS. f. Phys. 69, 142, 1930.
Ig. Tamm. ZS. f. Phys. 62, 545, 1930
G. R. Oppenheimer. Phys. Rev. 35, 939, 1930.
R. Millican. Phys. Rev. 36, 1595, 1930.
W. Heinsberg. . ZS. f. Phys. 65, 4, 1930.
V. Ambarzumian und D. Iwanenko. ZS. f. Phys. 64, 563, 1930.
E. Schrödinger. Berl. Ber. S. 66, S. 238, 1931.
L. Landau und R.Pierls. ZS. f. Phys 69, 56, 1931.
L. Rosenfeld. La theorie quantique des champs. Лекции читанные в Институте Анри Пуанкаре в 1931 г.)
A. Markoff. Phys ZS. d. Sowjetunion 1, 387, 1932.
W. Pauli. Helvetica Phys. Acta. 1932.
N. Bohr. Journ. Chem. Soc. February, 1932.

ИМЕННОЙ И ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- А – коэффициент Эйнштейна 272.
Амплитуда вероятности 94.
Антисимметрические состояния 222
Б- коэффициент Эйнштейна 191.
Бозе-эйнштейновская статистика 226, 263
Бор 162, 169
– об индетерминизме 12.
Бройля (де) волны 138.
Варьяционный принцип 243.
Вектор тока 286.
Вероятность результата 55.
Вероятность согласования 31
Весовая функция 13, 32, 80
Водородный атом 167, 293.
Возмущений теория 180.
Возмущения вековые 184.
Волновая функция 128.
Волновое управление релятивистское 282.
— — в общей теории относительности (дополнения) 301.
Волновое управление Шредингера 128.
Гейзенберг 129, 142, 275.
Геометризация волнового уравнения (дополнения) 298
b-функция 72.
Движения уравнения 109.
Действия переменные 144.
Дисперсионное рассеяние 214.
Дуализм корпускулярно-волновой 9
Запрет Паули 227.
Зеемана эффект для водорода 174.
— — аномальный 195.
Значения собственные 42.
Зоммерфельда формула тонкой структуры 295.
Иордан 95, 262.
Излучения величина 131.
Излучения теория 257.
Изолированные состояния 232.
Импульс как оператор 118.
— в релятивистской теории 279.
Инвариативность волнового уравнения 283.
Индетерминизм 14.
Отбора правила 170.
Отрицательные уровни энергии 281, 296.
Пакет волновой 137.
Параллельный перенос полувектора (дополнение) 301.
Паули матрицы 156.
— принцип 227.
Перестановки. 223
Перестановочные соотношения 109
Планка постоянная 109
Плюс- минус трудность 281, 313.
Индивидуальные ошибки (дополнения) 314
Испускания коэффициент 220, 271.
Канонические преобразования 88.
Касательные преобразования 60.
Квантовые условия 109.
Количество движения 118.
Коммутирующие наблюдаемые 53.
Комплексно-сопряженные величины 27,35.
Корень из наблюдаемой 50.
Крамерса-Гейзенберга формула Дисперсии 275.
Ланде формула 198.
Линеаризация (Дополнение) 304.
Лоренца преобразование для волновых функций 283, 307.
Магнитный момент электрона 289.
Максимальное наблюдение 21.
Матрицы Гейзенберга 129.
Мнимо-сопряженные величины 27.
Много электронная задача 237.
Момент количества движения 101, 158.
Моментов количества движения сложение 176
Мультиплет 195, 241.
Наблюдаемая 32.
Наблюдение 16.
Наблюдаемой значение 37.
Наложение (суперпозиция) 10, 23.
Некоммутативность 33.
Неопределенности принцип 141.
Непрерывные матрицы 77.
Нормирования правила 30, 81.
Обратная величина как наблюдаемая 50.
Оператор дифференцирования 113.
— пространственного смещения 122.
— смещения во времени 125.
Ортогональные представления 69.
Ортогональные состояния 17, 43.
Осцилятор гармонический одномерный 142.
плоский 149.
Осциляторов статистика 263.Отбора
Собственные состояния 42.
Совместные наблюдения 18.
Собственные состояния 42.81.
Состояние 16.
Спин 154, 238, 287.
Среднее значение наблюдаемой 40
Столкновения 199.
Суперпозиция (наложение 10,23.)
Тонкая структура водородного спектра 293

Представление состояний и наблюдаемых 63.
Поглощения коэффициент 271.
Поляризации правила 170
Поляризация фотона 10.
Преобразований теория 84.
Приближенные методы в задаче многих Тел 243.
Пространственное квантование 162
Пуассона скобки 106.
Рассеяния коэффициент 202.
— света коэффициент 271.
Резонансное рассеяние 217.
Релятивистская теория одной частицы 278
Самосогласованное поле 247.
Свободная частица 134.
Симметрические состояния 222.
Скорость электрона в релятивистской теории (дополнения) 310.
Сложение состояний 24.
Смешанное представление 92.
Собственные значения (числа) 42.
Угловые переменные 144
Умножение матриц 66.
Умножение состояний 28
Условия квантовые 109.
Фаза волновой функции 139.
Фока приближенный метод 250.
Фотонов статистика 257.
Фотоны 10, 22, 257.
Фотонов число 261.
Функции наблюдаемых 46
Функция преобразования 89.
Характер группы 231.
Хартри метод 246.
Ширина линии поглощения 220.
Шредингера уравнение 118,128.
— «колебательное» движение (дополнение) 312.
Электрический момент электрона 289.
— — системы 131, 191.
Энергия взаимодействия фотонов 268.
— — между спинами 242.
Эйнштейна законы излучения 275.

ОГЛАВЛЕНИЕ	
От издательства	3
Предисловие к русскому изданию	—
Предисловие автора к английскому изданию	5
I. Принцип суперпозиции	9
§ 1. Частицы и волны (9). § 2. Поляризация фотонов (10). § 3. Суперпозиция и индетерминизм (14). § 4. Совместимые наблюдения (18).	
§ 5. Еще о фотонах (22) § 6. Определение суперпозиции [изложения] (23)	
II. Символическая алгебра состояний и наблюдаемых величин	24
§ 7. Сложение состояний (24). § 8. Перемножение состояний (28).	
§ 9. Алгебра наблюдаемых величин (32) § 10. Комплексно-сопряженные наблюдаемые (35).	
§ 11. Физическая интерпретация алгебры наблюдаемых (35) § 12. Пример из алгебры наблюдаемых (40).	
III. Собственные значения и собственные состояния	42
§ 13. Определения и основные свойства (42). § 14. Теорема о разложении (44). § 15. Функции наблюдаемых (50) § 17. Совместные собственные состояния (52).	
§ 18. Некоторые теоремы о вероятностях (55). § 19. Касательные преобразования (60).	
IV. Представления состояний и наблюдаемых	63
§ 20. Общие свойства (63). § 21. Ортогональные представления (69).	
§ 22. Функция ϵ (72). § 23. Случай непрерывного ряда основных состояний (77). § 24. Весовая функция (80) § 25. Общий случай представления (81).	
V. Теория преобразований	84
§ 26. Собственные состояния в качестве основных состояний представления (84).	
§ 27. Канонические преобразования (83) § 28. Амплитуды вероятности (94). § 29. Пример I (99). § 30. Пример II (101).	
VI. Уравнения движения и квантовые условия	104
§ 31. Общие соображения (104). § 32. Скобки Пуассона (106). § 33. Построение уравнений движения и квантовых условий по аналогии с классической механикой (109). § 34. Квантовые условия в Шредингеровой форме (112). § 35. Функция преобразования (q/p) (119). § 36. Оператор пространственного смещения (122). § 38. Матрицы Гейзенберга (129).	
VII. Простейшие применения	134
§ 39. Свободная частица (134). § 40. Волновые пакеты (137). § 41. Линейный гармонический осциллятор (142) § 43. Спин электрона (154).	
VIII. Движение в центральном силовом поле	158
§ 44. Свойства момента количества движения (158) § 45. Переход к полярным координатам (162). § 46. Уровни энергии водородного атома (167) § 47. Правила отбора (170). § 48. Эффект Зеемана в случае водородного атома (174). § 49. Сложение моментов количества движения (176).	
IX. Теория возмущений	180
§ 50. Общие замечания (180). § 51. Изменение уровней энергии, вызванное возмущением (181). § 52. Возмущение как причина переходов (185). § 53. Применение к излучению (190). § 54. Переходы, вызываемые возмущением, не зависящим от времени. (192). § 55. Аномальный эффект Зеемана (195).	
X. Задачи о столкновениях	199
§ 56. Общие замечания (199). § 57. Коэффициент рассеяния (202).	
§ 58. Решение той же задачи в p -представлении (207). § 59. Дисперсионное рассеяние (214). § 60. Резонансное рассеяние (217). § 61. Испускание и поглощение (219).	
XI. Системы, состоящие из одинаковых частиц	222
§ 62. Симметрические и антисимметрические состояния (222). § 63. Перестановки как наблюдаемые (227). § 64. Перестановки как константы движения (230) § 65. Вычисление уровней энергии (233). § 66. Применение к электронам (237).	

XI-a. Приближенные методы. Дополнения автора к русскому переводу § 1. Общая теория (243). §2. Метод Хартри (246). § 3 Метод Фока (250). § 4. Метод плотности (254).	243
XII Теория излучения § 67. Теория Бозе-эйнштейновских ансамблей (257). § 68. Рассмотрение ансамблей Эйнштейна-Бозе (262). § 69. Применение к фотонам (265). § 70. Определение энергии взаимодействия между фотоном и атомом (268). § 71. Испускание, поглощение и рассеяние лучистой энергии (271). § 72. Законы излучения Эйнштейна (275).	257
XII. Релятивистская теория электрона § 73. Релятивистская трактовка задачи об одной частице (278). § 74. Волновое уравнение для электрона (280). § 75. Инвариативность по отношению к преобразованиям Лоренца (283). § 76 Существование спина (287).§ 77. Переход к полярным координатам (290).§ 78. Тонкая структура энергетических уровней водорода 293. § 79. Физический смысл решений с отрицательной энергией (296).	278
Дополнения редактора к главе XIII § 74. Геометризация уравнения Дирака (298). Общая теория относительности. Параллельный перенос полувектора (301). К § 74 (формулы 5, 4, 7, 8). Линеаризация и матрицы Дирака (304). К § 75 и § 79. Скорость электрона и плюс- минус трудность (310).	298
Именной и предметный указатель	319
Ответств. Редактор С. М. Вечеслов Сдано в набор 22/XI 1931 г. Формат 62*93, Ленгорлит №42506.	Техн. Редактор М. А. Фишман Подписано к печати 22/VIII 1932 г. Тип. Зн. В 1 п. Л. 54272. Заказ № 1675.

WWW.NIIP.RU

ГОСУДАРСТВЕННОЕ
ТЕХНИКО – ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ
ИЗДАТЕЛЬСТВО

В. ГЕЙЗЕНБЕРГ.

ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

(Перевод с немецкого А. Н. Арсеньевой
под редакцией проф. Д. Д. Иванненко

Стр. 145.

Цена 5 р. 75 коп.

СОДЕРЖАНИЕ:

I. Введение. II. Критика физических понятий корпускулярной картины. III. Критика физических понятий волновой картины. IV. Статистическое толкование квантовой теории.

V. Обсуждение важнейших опытов. VI. Математический аппарат квантовой теории. VII. Дополнение редактора к русскому переводу.

ГОТОВИТСЯ К ПЕЧАТИ:

ТЕОРИЯ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ

ЭЙНШТЕЙНА.

WWW.NIX.RU