

В. Ланги

ОБЩИЕ
ПРИНЦИПЫ
ВОЛНОВОЙ
МЕХАНИКИ

ОГИЗ
Гостехиздат
1947

В. ПАУЛИ

ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ

ПЕРЕВОД С НЕМЕЦКОГО
ПОД РЕДАКЦИЕЙ К. В. НИКОЛЬСКОГО

ОГИЗ

**ГОСУДАРСТВЕННОЕ ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТЕХНИКО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ**

МОСКВА 1947 ЛЕНИНГРАД

ОГЛАВЛЕНИЕ.

От редакции	5
-----------------------	---

ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ.

Часть I. Нерелятивистская теория	7
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>1. Принцип неопределённости и дополнительность</div> </div>	7
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>2. Измерение положения и импульса</div> </div>	18
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>3. Волновая функция свободной частицы</div> </div>	26
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>4. Волновая функция в случае частицы, находящейся в силовом поле</div> </div>	42
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>5. Взаимодействие нескольких частиц. Операторное исчисление</div> </div>	54
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>6. Стационарные состояния как решения проблемы собственных значений</div> </div>	70
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>7. Общие преобразования операторов и матриц</div> </div>	87
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>8. Общая форма закона движения</div> </div>	100
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>9. Определение стационарных состояний системы с помощью измерений. Общее исследование понятия измерения</div> </div>	109
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>10. Общий аппарат теории возмущений</div> </div>	128
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>11. Адиабатические и внезапные возмущения системы. Наиболее общие статистические суждения квантовой механики</div> </div>	139
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>12. Предельный переход к классической механике. Связь со старой квантовой теорией</div> </div>	147
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>13. Функция Гамильтона, допускающая группу преобразований. Момент количества движения и спин</div> </div>	165
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>14. Собственные функции многих одинаковых частиц. Перестановки. Принцип Паули</div> </div>	186
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>15. Рассмотрение процессов излучения с помощью принципа соответствия</div> </div>	208
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>16. Применение к свойствам когерентности излучения</div> </div>	225
Часть II. Релятивистские теории	233
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>1. Принципиальные замечания о современном состоянии релятивистской квантовой механики</div> </div>	233
<div style="display: flex; align-items: flex-start;"> <div style="margin-right: 10px;">§</div> <div>2. Волновое уравнение Дирака для электрона</div> </div>	235

§ 3.	Нерелятивистская волновая механика спина как первое приближение	271
§ 4.	Предельный переход к классической релятивистской механике частицы	276
§ 5.	Переходы в состояния с отрицательной энергией. Граница применимости теории Дирака	281
§ 6.	Квантование свободного излучения	289
§ 7.	Взаимодействие излучения и материи	311
§ 8.	Собственная энергия электрона. Границы современной теории	325
Предметный указатель		331

ОТ РЕДАКЦИИ.

Предлагаемая книга содержит две работы известного физика-теоретика лауреата нобелевской премии Вольганга Паули. «Общие принципы волновой механики» — глава из 24-го тома второго издания «Handbuch der Physik», изданного Гейгером и Шеелем в 1933 г.

Написанная в 1932 г., эта работа содержит в некоторых местах высказывания, не отвечающие современному состоянию вопроса. Тем не менее редакция не сочла возможным вносить существенные изменения или дополнения.

В этой книге приняты следующие обозначения:

векторы \vec{p} , \vec{k} , \vec{x} (латинские буквы);

операторы H , p , \vec{x} , \vec{Q} , $\vec{\beta}$, $\vec{\pi}$;

векторы-операторы \vec{H} , \vec{E} .

ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ.

ЧАСТЬ I.

НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТЕОРИЯ.

§ 1. Принцип неопределённости и дополнительность¹⁾.

Открытие волн материи де-Бройлем²⁾, матричной механики Гейзенбергом³⁾ и общее волново-механическое дифференциальное уравнение Шредингера⁴⁾, позволившее установить связь между этими двумя воззрениями, произвели последний, решающий поворот в квантовой теории. Принцип неопределённости Гейзенберга⁵⁾ и применяющие к нему принципиальные пояснения Бора⁶⁾ завершили предварительное построение основ теории.

Эти основы непосредственно связаны с двойственной (корпускулярной и волновой) природой света и материи и приводят к давно (но тщетно) искавшемуся решению задачи непротиворечивого и полного описания относящихся сюда явлений. Это решение приобретает ценой отказа от *однозначной объективности* (*Objektivier-*

¹⁾ См. В. Гейзенберг, Физические принципы квантовой теории, ОНТИ, 1932; N. Bohr, *Atomtheorie und Naturbeschreibung*, Berlin, 1931; Solvay-Kongress, 1927; Л. де-Бройль, Введение в волновую механику, ОНТИ, 1934; E. Schrödinger, *Vorlesungen über Wellenmechanik*, Berlin, 1928.

²⁾ L. de Broglie, *Ann. d. phys.* (10), 3, 22, 1925 (Thèses, Paris, 1924); A. Einstein, *Berl. Ber.*, 1925, стр. 9.

³⁾ W. Heisenberg, *Z. S. f. Phys.*, 33, 879, 1925; M. Born u. P. Jordan, *ibid.*, 34, 858, 1925; M. Born, W. Heisenberg u. P. Jordan, *ibid.*, 35, 557, 1926; P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.*, London, 109, 642, 1925.

⁴⁾ E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.* (4), 79, 361, 489, 734, 1926; 80, 437, 1926; 81, 109, 1926. То же в *Abhandlungen der Wellenmechanik*, Berlin, 1927.

⁵⁾ W. Heisenberg, *Z. S. f. Phys.*, 43, 172, 1927.

⁶⁾ N. Bohr, *Naturwissensch.*, 16, 245, 1928.

barkeit) процессов природы, т. е. от классического пространственно-временного и причинного описания природы, которое существенным образом покоится на однозначной разделимости явления и средств его наблюдения.

Чтобы напомнить об обычных трудностях, которые возникают при одновременном использовании понятий о волнах и квантах света, рассмотрим в качестве примера точечный, приближённо монохроматический источник света, установленный против дифракционной решётки (разрешающая способность которой для простоты принимается бесконечно большой). Согласно волновой теории, свет, диффрагированный решёткой, может попадать только на вполне определённые места, которые соответствуют разностям хода в целое число волн для пучков света, исходящих от отдельных штрихов решётки. Мы можем принять на основании *принципа суперпозиции*, подтверждаемого чрезвычайно большим числом опытных данных, что этот вывод волновой теории соответствует действительности; он остаётся справедливым (что характерно для таких явлений) также и для произвольно слабых интенсивностей падающего излучения, а следовательно, и для отдельного излучающего атома. С корпускулярной точки зрения явление протекает так: сначала в светящемся атоме происходит эмиссия света, затем (через промежуток времени, необходимый для распространения света) на дифракционной решётке происходит процесс рассеяния, связанный с наблюдаемой отдачей импульса, и, наконец, в определённом месте свет поглощается. Как уже говорилось выше, свет позади решётки может попадать только на такие места, которые соответствуют дискретным (вычисляемым по волновой теории) направлениям диффрагированного кванта. Это обстоятельство зависит от наличия *всех* атомов дифракционной решётки. Если теперь предположить, что возможно также установить, не изменяя при этом характера явления дифракции, то место дифракционной решётки, на которое попадает световой квант, то это приведёт к непреодолимым трудностям. Поведение светового кванта должно в каждый момент определяться положением всех вообще существующих атомов. Однако

прежде всего в этом случае недостаточно задание классического волнового поля, чтобы предсказать дальнейшее статистическое поведение кванта. Именно нельзя, как ещё будет пояснено, построить волновое поле так, чтобы его интенсивность по всей решётке, за исключением одного единственного её штриха, обращалась бы в нуль и, кроме того, чтобы в нём были представлены только определённые направления рассеянных лучей. С помощью волнового поля можно осуществить либо только то, либо только другое свойство. Чтобы избежать противоречия с принципом суперпозиции, необходимо поэтому потребовать: констатирование того, что световой квант попал на определённый штрих решётки и что на остальные штрихи он не попал, исключает влияние этих штрихов на наблюдаемое позади решётки дифракционное явление; последнее должно быть таково, как если бы существовал только один этот штрих.

Это требование, конечно, не связано специальным видом дифракционного опыта, но может быть обобщено и для любого интерференционного опыта. Последние всегда основаны на том, что световые волны, прошедшие различные пути и вследствие этого обладающие разностью фаз, снова встречаются в одном месте. Надо постулировать, что утверждение о выборе световым квантом в определённом случае какого-нибудь одного из этих путей исключает возможность наблюдения интерференционной картины, вычисленной по волновой теории (см. § 16).

Как уже упоминалось, это требование содержится в другом, более общем, которое мы можем сформулировать следующим образом: *все (возможно только статистические) свойства других (предшествующих или последующих) результатов измерений над световым квантом, которые могут быть выведены из знания какого-нибудь одного результата измерения, должны однозначно устанавливаться заданием определённого волнового поля, относящегося к этому результату измерения.* На это волновое поле накладывается требование, чтобы его можно было всегда составить наложением (суперпозицией) плоских волн различного направления и длин волн. В этих случаях говорят о волновом пакете.

Ещё не анализируя более точно возможные результаты измерений, касающиеся светового кванта, мы можем сказать, что знание того, что световой квант находится в определённой пространственно-временной области, должно выражаться в соответствующем ему волновом пакете в том, что волновые амплитуды заметно отличны от нуля лишь внутри соответствующей пространственно-временной области. Запишем плоскую волну с комплексной фазой в виде:

$$e^{i(\sum k_i x_i - \omega t)}, \quad (1)$$

где вектор \vec{k} с компонентами k_i имеет направление нормали к волне и абсолютную величину $2\pi/\lambda$. В дальнейшем мы будем его называть волновым вектором волны. Величины ω и ν будут обозначать соответственно круговую частоту и число колебаний, помноженное на 2π . Частота ω есть функция от k_1, k_2, k_3 , однозначно определённая природой волн. Например, для электромагнитных волн в вакууме просто:

$$\sum_i k_i^2 = \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (2)$$

где c означает универсальную постоянную — скорость света в вакууме. Важно заметить, что следующие заключения не зависят от специального вида функции $\omega(k_1, k_2, k_3)$. Для произвольного волнового поля можно каждую компоненту какой-либо напряжённости поля представить в виде

$$u(x_i, t) = \int A(\vec{k}) e^{i(\sum k_i x_i - \omega t)} dk_1 dk_2 dk_3, \quad (3)$$

где $A(\vec{k})$ обозначает функцию от k_1, k_2, k_3 . Путём простых выкладок можно показать следующее: если $u(x_i, t)$ для фиксированного момента времени заметно отлично от нуля только внутри пространственной области с размерами $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3$, и одновременно $A(\vec{k})$ отлично от нуля только внутри области « \vec{k} -пространства» с размерами $\Delta k_1, \Delta k_2, \Delta k_3$, то три произведения $\Delta x_i \Delta k_i$ не могут быть произвольно малыми, а должны быть, по край-

ней мере, порядка единицы:

$$\Delta x_i \Delta k_i \sim 1. \quad (4)$$

О количественном уточнении этого положения и о его доказательстве речь будет позже. Аналогичное положение относится к продолжительности интервала времени Δt , в течение которого заметно отлично от нуля $u(x_i, t)$ для фиксированной точки пространства x_1, x_2, x_3 , и к размерам интервала частот $\Delta \omega$, соответствующего упомянутой области \vec{k} -пространства, внутри которой $A(\vec{k})$ заметно отлично от нуля. Здесь также

$$\Delta \omega \Delta t \sim 1. \quad (4')$$

Из условия (4) непосредственно следует, что в случае волнового пакета с шириной порядка расстояния между двумя штрихами решётки, угловая ширина рассеянного пучка лучей так велика, что она охватывает (по крайней мере) два следующих друг за другом диффракционных максимума, и диффракционная картина становится совершенно смазанной.

Так как измерения, касающиеся светового кванта, осуществляются всегда посредством взаимодействия кванта с материальными телами, то условия (4) и (4'), которые существенны для непротиворечивого проведения корпускулярных представлений при явлениях интерференции, позволяют, обратно, делать некоторые заключения о материальных телах. Понятие о световых квантах вводится для расчёта обмена энергией и импульсом между светом и материей (веществом). В предположении, что законы сохранения импульса и энергии при этом обмене строго выполняются, — а только этими законами энергия и импульс определяются вообще — мы получаем, как известно, что обмен будет описываться правильно, если наделить световой квант энергией $\hbar \omega$ и импульсом \vec{p} в направлении его распространения с абсолютной величиной $\hbar \frac{\omega}{c}$. Здесь \hbar обозначает универсальную постоянную Планка \hbar , делённую на 2π .

Принимая во внимание определение вектора \vec{k} и соотношение (2), это можно записать так:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad E = \hbar \omega. \quad (1)$$

Соотношения (4) и (4') приводят к следствию, что положение светового кванта в фиксированный момент времени не может быть определено совместно с импульсом, а энергия совместно с моментом времени, в который световой квант проходит определённое место, и что справедливы следующие выражения:

$$\Delta p_i \Delta x_i \sim \hbar, \quad \Delta E \Delta t \sim \hbar. \quad (II)$$

Это и есть соотношения неопределённости, установленные впервые Гейзенбергом; приведённый здесь вывод их принадлежит Бору. Взаимодействие кванта света с материальным телом происходит (например, при процессе рассеяния), когда они совпадают в пространстве и времени, т. е. когда интервалы Δx и Δt для обоих одинаковы. Если бы значения p_i и E для материального тела до и после взаимодействия было возможно измерить точнее, чем это соответствует условию (II), то можно было бы с помощью законов сохранения получить более точное [чем по условию (II)] значение Δp_i и ΔE для светового кванта. *Если же считать строго справедливыми условия (II) для светового кванта и законы сохранения энергии и импульса для его взаимодействия с материальными телами, то эти соотношения неопределённости должны иметь всеобщее значение и выполняться не только для световых квантов, но также и для материальных тел любого вида (как для электронов и протонов*), так и для макроскопических тел).*

Простейшая интерпретация этого *общего* ограничения применимости классических представлений о корпускулах, к которому мы таким образом приходим, состоит в предположении, что обычная материя**) также обладает волновыми свойствами, причём волновой вектор и частота волны определяются соотношением (I), которое отныне постулируется как универсальное. *Наличие дуализма волн и частиц и справедливость выражения (I) для материи составляет как раз содержание гипотезы де-Бройля*

*) В момент написания книги лишь эти частицы и были известны.

**) Отметим во избежание недоразумений, что термин «материя» Паули всюду употребляет в смысле физического тела, обладающего инертной массой.

о волнах материи, которая получила столь блестящее подтверждение в опытах по рассеянию заряженных и незаряженных материальных лучей на кристаллической решётке.

Необходимость универсального дуализма волн и корпускул для общего непротиворечивого описания явлений хорошо иллюстрируется на рассмотренном выше примере дифракции светового кванта на решётке. Можно было бы сначала придумать такой способ определения места столкновения кванта с решёткой: представим себе отдельные части решётки подвижными друг относительно друга и установим, которая из этих частей испытает отдачу светового кванта, и тогда будем считать световой квант попавшим в неё. Такое опытное определение в действительности возможно, но, однако, неверно было бы думать, что теперь явление дифракции будет таким же, как и в том случае, когда части решётки жёстко связаны друг с другом. Во-первых, импульс той части решётки, о которой идёт речь, до столкновения со световым квантом должен быть определён с неточностью, меньшей, чем переданный световым квантом импульс отдачи, для того чтобы последний был наблюдаем. Но тут проявляется волновая природа подвижной части решётки, и отсюда следует, согласно (II), неопределённость $\Delta x_i > \frac{\hbar}{\Delta p_i}$ положения подвижных частей решётки друг относительно друга. Эта неопределённость будет как раз такого порядка, что получающееся в результате явление дифракции будет таким, как если бы существовала только затронутая световым квантом часть решётки.

Всё, что до сих пор сказано о дифракции световых квантов, справедливо также для дифракции волн материи. Только связь между волновым числом и частотой, которая в случае световых волн давалась соотношением (2), для волн материи будет другой. Согласно релятивистской механике между энергией и импульсом материальной точки существует соотношение

$$\frac{E^2}{c^2} = m^2 c^2 + \sum_i p_i^2, \quad (5)$$

где m — масса покоя частиц.

Согласно (I) отсюда следует для волн

$$\frac{\omega^2}{c^2} = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} + \sum_i k_i^2 = \frac{\omega_0^2}{c^2} + \sum_i k_i^2, \quad (5')$$

где

$$\omega_0 = \frac{mc^2}{\hbar}. \quad (6)$$

Связь (I) между энергией и частотой, а также между импульсом и волновым вектором *релятивистски инвариантна*, так как и $(\vec{p}_i, i \frac{E}{c})$ и $(\vec{k}, i \frac{\omega}{c})$ образуют компоненты четырёхмерного вектора: соотношения (5) и (5') тоже инвариантны. Для $m=0$ (5) и (5') переходят в соответствующие законы для энергии и импульса светового кванта.

Не только энергия и импульс, но также и скорость частицы может быть связана с простой характеристикой волны, отнесённой к частице. *Скорость частицы*, как показал де-Бройль, равна *групповой скорости волн*. Действительно, эта скорость определяется из соотношения¹⁾:

$$dE = \sum_i v_i dp_i$$

или

$$v_i = \frac{\partial E}{\partial p_i}, \quad (7)$$

причём групповая скорость определяется выражением

$$v_i = \frac{\partial \omega}{\partial k_i}. \quad (7')$$

Согласно (I) оба выражения совпадают. Это обстоятельство существенно потому, что когда можно пренебречь эффектом дифракции, волновые пакеты движутся вдоль классических механических траекторий, а следовательно,

¹⁾ Заметим, что это выражение для групповой скорости даёт правильную связь между фазовой и лучевой скоростями и в случае диспергирующего кристалла. Хотя волновая нормаль и луч здесь направлены неодинаково и \vec{v} не параллельно \vec{k} , но выражения (7') здесь также справедливы.

в рассматриваемом здесь случае свободного движения — по прямым линиям (см. § 4). Если выполняется соотношение (5), то имеем:

$$v_i = \frac{\partial E}{\partial p_i} = \frac{c^2 p_i}{E}. \quad (5a)$$

Таким образом, $p_i = \frac{E}{c^2} v_i$ и, подставляя эти выражения в (5), получаем хорошо известные выражения для энергии и импульса через скорость

$$\left. \begin{aligned} \frac{E^2}{c^2} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) &= m^2 c^2, \\ E &= \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \\ p_i &= \frac{mv_i}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \end{aligned} \right\} \quad (5b)$$

В *нерелятивистском случае*, очень важном для дальнейшего, когда $|p| \ll mc$, получается:

$$\frac{E}{c} = \sqrt{m^2 c^2 + \sum_i p_i^2} = mc \left(1 + \frac{1}{2m^2 c^2} \sum_i p_i^2 \right)$$

или

$$E = mc^2 + \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2, \quad (8)$$

и, таким образом,

$$\omega = \omega_0 + \frac{\hbar}{2m} \sum_i k_i^2. \quad (8')$$

Заметим ещё (о чём подробнее см. часть II, § 2), что, в согласии с опытом, мы здесь взяли положительный знак для E и ω , однако формально можно было бы также положить:

$$E = - \left(mc^2 + \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 \right). \quad (9)$$

Если мы ограничиваемся первым выбором знака, то целесообразно перенесением начала отсчёта энергии ввести

$$E' = E - mc^2, \quad \omega' = \omega - \omega_0. \quad (10)$$

Тогда имеем

$$\left. \begin{aligned} E' &= \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2, \\ \omega' &= \frac{\hbar}{2m} \sum_i k_i^2, \\ v_i &= \frac{p_i}{m} = \frac{\hbar k_i}{m}, \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

и, таким образом,

$$\lambda = \frac{2\pi}{|k|} = \frac{2\pi\hbar}{mv}, \quad (12)$$

где v обозначает скорость. Это есть известная формула для длины материальных волн, установленная де-Бройлем.

Соотношения неопределённости (II) для материи показывают, что уже в случае отсутствия сил классическая кинематика материальной точки не может применяться неограниченно. Эти соотношения содержат утверждение, что каждое точное знание местоположения частицы имеет одновременно следствием не только незнание, но и принципиальную неопределённость импульса и наоборот. Различие между (принципиальной) *неопределённостью* и *незнанием* имеет решающее для всей квантовой теории значение. Это можно более подробно пояснить на примере одного опыта. Пусть световой квант может проходить через два отверстия и создавать на расположенном за ними экране дифракционную картину (в статистическом среднем, при частом повторении опытов). В этом случае неизвестно, через какое именно отверстие пролетел световой квант. Если же имеется опытное устройство *), при котором для светового кванта

*) Здесь имеется в виду опыт, при котором попеременно открывается то одно отверстие, то другое, причём наблюдатель не может знать, какое именно отверстие открыто в данный момент. (Прим. перев.)

наверняка открыто только одно отверстие, то мы говорим: неизвестно, через какое отверстие пролетел световой квант. Очевидно, в последнем случае диффракционная картина получается путём сложения интенсивностей диффракционных картин от одного отверстия, — возможно только без учёта множителя пропорциональности. Обобщая, мы можем сказать: *при неопределённости некоторого свойства системы определённого устройства (при определённом состоянии системы) всякая попытка измерить это свойство уничтожает (по крайней мере частично) влияние прежних сведений о системе на (статистические) высказывания о позднейших возможных результатах измерений*. Поэтому мы имеем право сказать, что в этом случае измерение приводит систему в новое состояние. При этом, впрочем, часть влияния, оказанного на систему измерительным аппаратом, остаётся сама опять неизвестной.

Таким образом, для определения положения частицы и её импульса должны быть использованы *взаимно исключающие опытные устройства*. Для измерения положения существуют пространственно фиксированные аппараты (масштабы часы, диафрагмы), на которые переносится неопределённая часть импульса; последнее делает невозможным точное пространственно-временное следование за частицей. Не помогает делу и предварительное определение положения частицы. Воздействие на систему аппаратом, измеряющим импульс (положение) таково, что в границах, даваемых соотношением неопределённости, использование прежних знаний положения (импульса) теряет своё значение для предсказания результатов более поздних измерений положения (импульса). Когда из подобного рода соображений использование *одного* классического понятия исключает *другое*, мы, согласно Бору, называем оба эти понятия *дополнительными*; таковы, например, координата и импульс частицы. По аналогии с термином «теория относительности» можно поэтому назвать современную квантовую теорию «теорией дополнительности».

Мы увидим, что эта «теория дополнительности» не имеет аналога в классической теории газов, которая

также оперирует со статистическими закономерностями¹⁾. Именно газокинетическая теория не содержит утверждений (справедливых прежде всего благодаря конечности величины кванта действия), что вследствие измерений системы добытые о ней предшествующими измерениями сведения, при известных условиях, утрачиваются, т. е. не могут быть больше использованы. (Это высказывание обуславливает, впрочем, также существенное отличие новой теории от прежней теории Бора, Крамерса, Слэтера.) Как уже упоминалось, тем самым утрачивается однозначная объективность физических явлений и вместе с тем возможность их причинного пространственно-временного описания (см. § 9). Если эти явления вообще подлежат описанию, то должен быть сделан произвольный внешний по отношению к описываемой (наблюдаемой) системе, совершаемый во время наблюдения *выбор* того, где следует отделить средства наблюдения от явления (см. § 9).

В дальнейшем должно быть изложено, как при таком положении дел могут быть непротиворечиво установлены *статистические* характеристики состояния и *статистические* закономерности.

§ 2. Измерение положения и импульса.

Для более детальной характеристики состояния материальной частицы необходимо прежде всего исследовать, насколько имеют смысл понятия положения и импульса частицы вне области применимости классической механики. Что касается положения частицы, то для его определения пользуются действием частицы, совершаемым ею лишь тогда, когда она находится в определённой точке. К счастью, как раз в рассеянии света мы имеем такое действие, могущее, впрочем, совершаться как элементарными электрическими части-

¹⁾ С другой стороны, Н. Бор (N. Bohr, Faraday Lecture, *Journ. Chem. Soc.*, 1932, 349, особенно 376 и 377) указал на то, что также и в классической статистической механике, правда, в несколько другом смысле, можно говорить о «дополнительности», с одной стороны, микроскопического движения молекул, с другой стороны, — макроскопической температуры системы.

цами, так и макроскопическими телами. Представим себе, например, что плоскость (x, y) освещена посредством цуга волн ограниченной длины, причём так, что фиксированная точка (x_0, y_0) этой плоскости освещается в определённый момент времени t_0 . Этот момент определяется с погрешностью Δt , которая не может быть меньше $1/\nu$, где ν — средняя частота падающего света. Однако, применяя свет возможно более короткой длины волны, можно тем самым уменьшать Δt . Представим себе далее интенсивность света столь большой, что, по крайней мере, один световой квант, наверное, будет рассеян частицей, если только световой пучок её освещает. Можно использовать какие-либо оптические увеличительные приборы (камера-обскура, лупа, микроскоп), чтобы с помощью грубого макроскопического определения места действия рассеянного кванта добиться точного определения положения материальной частицы. Для этой цели достаточно наблюдать только один световой квант. Пределы точности определения положения всегда задаются границами оптического изображения, которые, в свою очередь, обуславливаются описываемым дифракционным эффектом классической волновой оптикой. Так, например, известно, что граница точности Δx изображения, полученного с помощью микроскопа, даётся следующим выражением:

$$\Delta x \sim \frac{\lambda'}{\sin \varepsilon}, \quad (13)$$

где λ' обозначает длину волны рассеянного излучения, которая может быть отлична от длины волны падающего излучения, а ε — половину апертуры объектива. Направление рассеянного кванта внутри этого угла ε должно при этом рассматриваться как принципиально неопределённое, а стало быть x -компонента импульса материальной частицы после столкновения может быть определена с точностью до

$$\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{\lambda'} \sin \varepsilon, \quad (14)$$

откуда следует подтверждение соотношения неопределённости

$$\Delta p_x \Delta x \sim \hbar.$$

Мы хотим, кроме того, обсудить, с какой точностью вообще возможно определение положения в рассматриваемом мысленном эксперименте. Очевидно, согласно (13), для увеличения точности целесообразно сделать длину волны рассеянного излучения возможно короче. Если бы длина волны рассеянного света была равна длине волны падающего излучения, то можно было бы сколь угодно повысить точность измерения положения, выбирая длину волны произвольно малой. Одновременно можно было бы, как уже выше упоминалось, заключить также в произвольно малый интервал момент времени, в который определялось положение. Однако благодаря эффекту Комптона происходит изменение частоты рассеянного излучения, определяемое законами сохранения энергии и импульса. Это приводит к следствию, что даже в пределе при $\nu \rightarrow \infty$ ($\lambda = \frac{c}{\nu} \rightarrow 0$) частота ν' рассеянного излучения не может превышать определённого конечного значения. Пусть \vec{p} и $E = c\sqrt{m^2c^2 + \vec{p}^2}$ — импульс и энергия материальной частицы до процесса рассеяния. Тогда в пределе $\nu \rightarrow \infty$, дающем максимум для ν' и минимум для $\lambda' = c/\nu'$, имеем:

$$\left. \begin{aligned} \nu' &\sim \frac{E}{h} = \frac{m_0c^2}{h} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \\ \lambda' &\sim \frac{hc}{E} = \frac{h}{mc} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

(При этом очень малые углы рассеяния не рассматриваются, так как они из геометрических соображений не могут быть пригодны для определения положения частицы ¹⁾.) Отсюда для максимальной точности определения положения *с помощью описанного здесь экспери-*

¹⁾ Например для случая, когда падающее излучение направлено противоположно направлению движения частицы, в то время как рассеянное излучение параллельно этому направлению, имеем из законов сохранения импульса и энергии:

$$\nu' = \nu \frac{E + cp_x}{2h\nu - cp_x + E};$$

мента — рассеяние светового кванта через оптический инструмент — получаем следующее выражение:

$$\left. \begin{aligned} \Delta x &\sim \frac{hc}{E} = \frac{h}{mc} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}, \\ \Delta t &\sim \frac{1}{\nu'} \sim \frac{h}{E} = \frac{h}{mc^2} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}. \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Последнее соотношение следует из того, что продолжительность процесса рассеяния, т. е. время, в течение которого может происходить взаимодействие между световым квантом и материальной частицей, никогда не может быть значительно меньше периода колебаний падающего и рассеянного излучений. Продолжительность измерения положения существенна потому, что она определяет пригодность результатов данного измерения для высказывания о последующих измерениях положения. Повторяемость измерения положения в позднейший момент времени существует в следующем смысле. Если по истечении времени τ вновь определить положение, то результат этого измерения в единичном случае не может быть предсказан. Однако, в среднем, при многократном повторении опытов, можно найти определённое среднее положение $\bar{x}(t_0 + \tau)$ со средней ошибкой $\Delta = \sqrt{(\overline{\Delta x})^2}$. Уменьшая τ , можно сделать выражения $\bar{x}(t_0 + \tau) - \bar{x}(t_0)$ и $\Delta(t_0 + \tau) - \Delta(t_0)$ сколь угодно малыми. Если бы момент времени первого измерения положения остался совершенно неопределённым, то результат этого измерения не мог бы применяться для предсказания результатов других таких же опытов и был бы в этом смысле физически неинтересен.

Данная выражением (16) граница точности определения положения имеет значение лишь для атомных ядер и электронов, так как размеры атомов в целом больше, чем отношение h/mc для них. Имеет ли эта граница для

таким образом, для $h\nu \gg E$:

$$\nu' \sim \frac{E + cp_x}{2h} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{v_x}{c} \right) \frac{mc^2}{h} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

электронов и ядер принципиальное значение ¹⁾, или её можно обойти косвенными методами, нельзя сразу решить посредством элементарных соображений. Это зависит всецело от того, на каких основах может быть успешно построена релятивистская квантовая механика. Кроме того, чтобы не слишком усложнять задач и не переходить за пределы современных знаний, специально не учитывается атомистическая структура масштабов и часов. Поэтому мы не принимаем здесь во внимание невозможность осуществления произвольно малых диафрагм, линз или зеркал. Мы прежде всего здесь подчёркиваем *положительное* утверждение, что понятие координаты материальной частицы и определённый момент времени имеет также смысл за пределами применимости классической механики. Определение положения возможно во всяком случае с большей точностью, чем длина материальной волны

$$\lambda_m = \frac{h}{|p|} = \frac{h}{mv} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}},$$

так как согласно (16)

$$\Delta x \sim \lambda_m \frac{v}{c}. \quad (17)$$

Таким образом, по крайней мере, в нерелятивистской квантовой механике, где $v \ll c$, естественно следующее основное предположение: *в каждом состоянии системы (в первую очередь в случае свободной частицы) в любой момент времени t существует вероятность $W(x_1, x_2, x_3; t) dx_1 dx_2 dx_3$ того, что частица находится с погрешностью в области $dx_1 dx_2 dx_3$ вокруг точки x_1, x_2, x_3 .*

Формулированное основное предположение само по себе не очевидно и не является следствием соотношения неопределённости (II). Это явствует из того, что (как ниже подробнее будет объяснено, часть 2, § 6) в случае светового кванта подобное указание его местоположения вне границ применения классической геометрической оптики лишено смысла. Положение светового кванта не может быть определено точнее, чем длина волны

¹⁾ Эта точка зрения защищалась Л. Ландау и Р. Пейерльсом (Z. s. f. Phys., 69, 56, 1931),

света, и за промежутки времени, меньший, чем период колебаний световой волны. Поэтому не существует плотности световых квант со свойствами, аналогичными плотности материальных частиц ¹⁾. Вообще аналогия между светом и материей простирается совсем не так далеко, как это вначале кажется. Она, напротив, полностью исчерпывается фундаментальными соотношениями (I) между энергией-импульсом, с одной стороны, и частотой и волновым числом, с другой, справедливыми как для световых волн, так и для материальных частиц.

В формулировке основного положения содержится неравноправие координат точки и времени, так как координаты положения устанавливаются в промежутке dx , а координата времени устанавливается точно ²⁾.

В действительности, как мы видели, этот момент времени может быть фиксирован не точнее, чем с погрешностью

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{c},$$

если ошибка в определении положения по порядку величины равна Δx . Только в предельном случае нерелятивистской квантовой теории, где c считается бесконечно большим, является разумной идеализацией пренебречь промежутком времени Δt при фиксированном Δx , что математически и означает положить Δt равным нулю.

Мы переходим к вопросу определения импульса частицы. Здесь также можно, согласно Бору, использовать рассеяние светового кванта на частице, так как эффект

¹⁾ В литературе, даже в некоторых учебниках, по этому вопросу встречаются различные неправильные указания.

²⁾ На это обстоятельство особенно указывал Шредингер (*Berl. Ber.*, 1931, стр. 238). В этой связи он также подчёркивал, что идеальные, т. е. точно показывающие время, часы должны обладать бесконечно большой неопределённостью в энергии, т. е. бесконечно большой энергией. По нашему мнению это вовсе не означает, что использование обычного понятия времени в квантовой механике является противоречивым, так как можно сколь угодно точно приблизиться к таким идеальным часам. Можно представить себе, например, очень короткий (в пределе бесконечно короткий) пучок волн, который (вследствие наличия соответствующего зеркала) описывает замкнутый путь. (При этом остаётся ещё не рассмотренным, как уже отмечалось в тексте, вопрос о существовании такого зеркала.)

Допплера в определённом направлении рассеянного излучения (вместе с частотой и направлением падающего излучения) позволяет сделать обратное заключение о скорости материальной частицы. Так как точность определения ν' ограничена конечной продолжительностью T взаимодействия между светом и материей, по соотношению

$$\Delta\nu' = \frac{1}{T}, \quad (18)$$

то в этом случае — обратно тому, что было при определении положения, — выгодно выбрать время T большим. Рассмотрим для простоты подробнее случай, когда материальная частица — перед процессом рассеяния — движется в направлении $+x$, т. е. уже заранее положено, что $p_y = p_z = 0$. Пусть на частицу падает излучение в направлении $-x$, рассеивающееся в направлении $+x$. Тогда имеем

$$-\frac{h\nu}{c} + p_x = p'_x + \frac{h\nu'}{c},$$

или

$$p'_x = p_x - \frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c}, \quad (19)$$

а также

$$h\nu - h\nu' = E' - E. \quad (20)$$

Так как ν задано, то, зная точно ν' , мы знали бы точно p_x (и p'_x). Чтобы найти связь неточностей Δp_x и $\Delta\nu'$, вычислим из (20) $\partial\nu'/\partial p_x$, считая p'_x согласно (19), функцией p_x и ν' , а ν — постоянной величиной. Принимая во внимание, что

$$\frac{\partial E'}{\partial p'_x} = v'_x, \quad \frac{\partial E}{\partial p_x} = v_x$$

(эти соотношения справедливы также и в релятивистском случае), находим

$$-h \frac{\partial\nu'}{\partial p_x} = v'_x \left(1 - \frac{h}{c} \frac{\partial\nu'}{\partial p_x}\right) - v_x; \quad h \frac{\partial\nu'}{\partial p_x} \left(1 - \frac{v'_x}{c}\right) = v_x - v'_x.$$

Для неточности $\Delta\nu'$ находим отсюда:

$$h \Delta\nu' = \frac{v_x - v'_x}{1 - v'_x/c} \Delta p_x.$$

v'_x для малых v приблизительно равно v_x ; v'_x убывает при возрастании v , затем становится отрицательным и для очень больших v переходит, наконец, в $-c$. Знаменатель $1 - v'_x/c$ возрастает при этом от 1 до 2 и по порядку величины всегда:

$$h \Delta v' \sim (v_x - v'_x) \Delta p'_x, \quad (21)$$

и, согласно (18),

$$\Delta p_x \sim \frac{h}{(v_x - v'_x) T}. \quad (22)$$

С другой стороны, для принципиальной неопределённости положения частицы после процесса, имеем:

$$\Delta x \sim (v_x - v'_x) T,$$

так как остаётся неизвестным, в какой момент времени внутри интервала T частица меняет свою скорость. Мы находим, таким образом, что соотношение неопределённости снова подтверждается:

$$\Delta p_x \Delta x \sim h.$$

Уравнение (22) показывает сверх того, что импульс частицы мог бы быть определён даже в произвольно короткое время, если бы изменение скорости частицы в процессе рассеяния могло бы быть произвольно большим. В действительности это изменение скорости не может превышать $2c$, так что по порядку величины имеем

$$\Delta p_x \sim \frac{h}{c \Delta t}. \quad (23)$$

Здесь вместо T написано Δt , чтобы указать, что T одновременно обозначает неопределённость момента времени, в который был получен импульс p_x . Результаты (22) и (23), давая нижние границы ошибки Δp_x , не зависят, впрочем, от специальных предположений о направлении луча света и скорости материи.

Для свободной частицы несущественно ограничение точности измерения её импульса продолжительностью времени T , так как импульс частицы в этом случае постоянен во времени. Мы можем, таким образом, предположить: *в каждом состоянии системы, в первую оче-*

редь в случае свободной частицы, существует вероятность $W(p_1, p_2, p_3) dp_1 dp_2 dp_3$ того, что в области $dp_1 dp_2 dp_3$ импульс частицы имеет значение p_1, p_2, p_3 . (Это предположение в случае свободного излучения, очевидно, также справедливо и для световых квантов.)

Впрочем измерения импульсов, даже независимо от ограничения точности соотношением (22), вообще говоря, «неповторимы», так как при этих измерениях происходят, в зависимости от условий, большие, хотя и *известные* изменения импульса. Только если продолжительность времени измерения T будет взята такой большой, что при заданном Δp_x также и $(p'_x - p_x)$ может быть сделано малым (падающий свет большой длины волны) — только в этом случае второе измерение, непосредственно следующее за первым, даст снова тот же результат. Однако, во всех случаях, а также и при кратковременном измерении, результат последующего измерения импульса может быть предсказан на основании предшествующего. Это обстоятельство существенно для вопроса об измерении импульса связанных частиц, так как в этом случае для измерения импульса имеется в распоряжении лишь ограниченный промежуток времени.

§ 3. Волновая функция свободной частицы.

Теперь нам следует ввести такие основные предположения о вероятностях $W(x_1, x_2, x_3)$ и $W(p_1, p_2, p_3)$ координат и импульсов частицы, которые находились бы в согласии с соотношением неопределённости (II) и волновым характером материи. При этом сначала мы ограничимся нерелятивистским приближением, считая, что скорость частицы мала по сравнению со скоростью света, и частота волны связана с фазовым вектором \vec{k} соотношением (8'):

$$\omega = \omega_0 + \frac{\hbar}{2m} \sum_i k_i^2. \quad (8')$$

Вследствие ограничения нерелятивистской областью световые кванты сразу же исключаются из рассмотрения. Связанные с этим вопросы будут обсуждаться лишь в следующем отделе. Образум так же, как в § 1 [см. (3)],

функции:

$$\psi(x_i, t) = \frac{1}{V(2\pi)^3} \int A(\vec{k}) e^{i[(\vec{k}x) - \omega t]} dk_1 dk_2 dk_3, \quad (24)$$

где k и ω всегда удовлетворяют соотношению (8') и таким образом всегда положительны. Множитель $1/V(2\pi)^3$ вводится для удобства, как это вскоре выяснится. Далее мы образуем комплексно сопряжённую функцию

$$\psi^*(x_i, t) = \frac{1}{V(2\pi)^3} \int A^*(\vec{k}) e^{-i[(\vec{k}x) - \omega t]} dk_1 dk_2 dk_3. \quad (24^*)$$

Если ввести, согласно (I), в (24) и (24*) импульс $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ и энергию $E = \hbar \omega$ частицы вместо \vec{k} и ω , то (24) и (24*) можно записать так:

$$\psi(x_i, t) = \frac{1}{V(2\pi\hbar)^3} \int A(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}[(\vec{p}x) - Et]} dp_1 dp_2 dp_3, \quad (24')$$

$$\psi^*(x_i, t) = \frac{1}{V(2\pi\hbar)^3} \int A^*(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}[(\vec{p}x) - Et]} dp_1 dp_2 dp_3. \quad (24'^*)$$

$[A(\vec{p})$ и $A(\vec{k})$ отличаются на такой численный множитель, что $|A(\vec{p})|^2 dp_1 dp_2 dp_3 = |A(\vec{k})|^2 dk_1 dk_2 dk_3$]. Введём функцию

$$\varphi(\vec{p}) = A(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}, \quad (25)$$

которая удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = E \varphi = \left(E_0 + \sum_i \frac{p_i^2}{2m} \right) \varphi. \quad (26)$$

Таким образом, можно написать:

$$\psi(x_i, t) = \frac{1}{V(2\pi\hbar)^3} \int \varphi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}x)} d\vec{p}, \quad (24'')$$

$$\psi^*(x_i, t) = \frac{1}{V(2\pi\hbar)^3} \int \varphi^*(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}x)} d\vec{p}. \quad (24''')$$

Обращение этих соотношений даёт согласно теории интеграла Фурье:

$$\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int \psi(x_i, t) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \vec{x})} dV \quad (27)$$

или

$$A(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int \psi(x_i, t) e^{-\frac{i}{\hbar}[(\vec{p} \vec{x}) - Et]} dV \quad (27')$$

и

$$A(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int \psi(x_i, t) e^{-i[(\vec{k} \vec{x}) - \omega t]} dV. \quad (27'')$$

Далее имеет место соотношение замкнутости или полноты:

$$\int \psi^* \psi dV = \int \varphi^* \varphi dp = \int A^* A dp, \quad (28)$$

которое определяет сделанный выбор численного множителя в (24) и (24').

Легко видеть, что в силу (8') функции ψ и ψ^* удовлетворяют дифференциальным уравнениям

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(E_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \psi, \quad (29)$$

$$+\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \left(E_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \psi^*, \quad (29^*)$$

где, как в (6),

$$E_0 = \hbar \omega_0 = m_0 c^2,$$

а Δ обозначает оператор Лапласа. Обратно, (24) есть общее ¹⁾ решение дифференциального уравнения (29), если для каждой парциальной волны, входящей в (24), соблюдается соотношение (8'). Это соотношение получается в согласии с (1) из соотношения классической механики

$$E = E_0 + \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2, \quad (8)$$

¹⁾ Для того чтобы это выражение охватывало также случай, когда ψ является суммой плоских волн, а не *интегралом*, следует допустить для $\varphi(k)$ определённую особенность и понимать интеграл (24) в смысле Стильтьеса.

которое даёт связь между энергией и импульсом частицы. Формально (29) прямо следует из (8), если ввести операторы (действующие на функции от координат и времени)

$$E = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}, \quad p_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (30)$$

и затем заменить (8) операторным уравнением, тождественным (29):

$$E\psi = \left(E_0 + \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 \right) \psi. \quad (31)$$

Кроме того, это уравнение формально аналогично (26).

В дальнейшем мы будем иметь дело с различными операторами, которые все, однако, будут *линейными*. Под этим понимается, что рассматриваемый оператор D удовлетворяет условию:

$$D(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1 D\psi_1 + c_2 D\psi_2, \quad (32)$$

где c_1 и c_2 — две произвольные постоянные, а ψ_1 и ψ_2 — произвольные функции каких-либо переменных. Эти переменные, вообще говоря, не обязательно должны пробегать непрерывную последовательность значений, как в случае пространственно-временных координат, но могут принимать только дискретные значения, или даже конечное число значений. Однако, всегда функции $D\psi$ следует считать зависящими от тех же переменных, что и функции ψ . Переходя к специальным операторам (26), заметим, что применение этих операторов к значениям энергии и импульса представляет лишь другое выражение для построения интеграла Фурье (24') при переходе от пространственно-временной функции $\psi(x_i, t)$ к функции импульса $\varphi(\vec{p})$.

Введённые здесь функции получают физический смысл лишь тогда, когда они связаны с вероятностями $W(k_i)$ и $W(p_i)$ энергии и импульса частицы. При этом существенно заметить, что, во-первых, эти вероятности *не могут быть отрицательны*, и, во-вторых, в каждый момент времени должны соблюдаться условия

$$\int W(\vec{x}) dx_1 dx_2 dx_3 = 1 \quad (33)$$

и

$$\int W(\vec{p}) dp_1 dp_2 dp_3 = 1. \quad (33')$$

Простейшее предположение относительно $W(\vec{x})$, удовлетворяющее этим требованиям, заключается в том, что $W(\vec{x})$ есть *дефинитная квадратичная форма* функций ψ_p, ψ_p^*, \dots ($p = 1, 2, \dots$), каждая из которых удовлетворяет уравнениям (25) или (25*):

$$W(x) = Q(\psi_p, \psi_p^*). \quad (34)$$

(Конечно, только успех теории может показать, возможно ли обойтись без образования форм четвертого или более высокого порядков.) Кроме того, чтобы добиться постоянства во времени интеграла $\int W(\vec{x}) dx_1 dx_2 dx_3$, в согласии с (29) и (29*), необходимо положить:

$$Q(\psi_p, \psi_p^*) = \sum_p C_p \psi_p^* \psi_p, \quad (35)$$

где C_p — положительные действительные числа. В справедливости этого можно убедиться как из (24) посредством теоремы Фурье, так из (29) интегрированием по частям. Например, по последнему способу имеем:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^2) &= E_0 \psi^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\psi \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) + \frac{\hbar}{2m} (\text{grad } \psi)^2, \\ +\frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^{*2}) &= E_0 \psi^{*2} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\psi^* \frac{\partial \psi^*}{\partial x_i} \right) + \frac{\hbar}{2m} (\text{grad } \psi^*)^2. \end{aligned}$$

Но

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} (\psi \psi^*) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_i} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_i} \right).$$

Таким образом, ни $\int \psi^2 dV$, ни $\int \psi^{*2} dV$, ни какая-либо линейная комбинация обоих этих выражений не постоянна во времени, тогда как

$$\int \psi \psi^* dV = \text{const.} \quad (36)$$

[При выполнении интегрирования предполагается, что появляющиеся вследствие интегрирования по частям поверхностные интегралы (по поверхности очень больших сфер) в предельном случае бесконечно большой области интегрирования обращаются в нуль.]

Заметим ещё для дальнейших применений, что последнее из написанных выше дифференциальных равенств принимает форму уравнения непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{i} = 0, \quad (37)$$

если наряду с $\rho = \psi\psi^*$ положить

$$\vec{i} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \operatorname{grad} \psi - \psi \operatorname{grad} \psi^*). \quad (38)$$

Если условиться считать производную по времени вещественной функции — новой (второй) функцией, то можно утверждать следующее: из (31) *следует, что одной действительной функции недостаточно, чтобы из волн типа (24) построить всюду неотрицательную вероятность, постоянную во времени после интегрирования по объёму*¹⁾.

Иначе говоря, для этого необходимы, по крайней мере, две действительные функции или комплексная функция и ей сопряжённая. Постоянные C_r могут быть,

¹⁾ Это связано с тем, что действительная часть ψ функции $u = \frac{1}{2}(\psi + \psi^*)$ [для мнимой части $v = \frac{1}{2i}(\psi - \psi^*)$ дело обстоит аналогично] не удовлетворяет (согласно (25) и (25*) дифференциальному уравнению первого порядка относительно производной по времени, а удовлетворяет лишь «итерированному» дифференциальному уравнению второго порядка

$$\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta - E_0 \right) \left(+\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta - E_0 \right) u = 0$$

или

$$\left[\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - E_0 \right)^2 \right] u = 0.$$

Если составить из u квадратичное выражение, интеграл по объёму которого постоянен, то оно должно содержать не только u и его производные по координатам, но также и первые производные по времени.

очевидно, включены в ψ , так что

$$W(x) = \sum_p \psi_p^* \psi_p = \sum_p |\psi_p|^2 \quad (35)$$

является наиболее общим выражением для вероятности $W(x)$.

Как мы увидим позже, иногда действительно бывает необходимо ввести несколько Ψ -функций: например, когда рассматриваются частицы с моментом импульса. Пока, однако, мы, ради простоты, не будем принимать это во внимание и будем оперировать с одной комплексной Ψ -функцией. Таким образом, мы имеем:

$$W(x) = |\psi|^2 = \psi^* \psi, \quad (35')$$

с условием нормировки:

$$\int \psi^* \psi dV = 1. \quad (36)$$

Согласно уравнению непрерывности (37) мы можем теперь интерпретировать выражение (34) как *статистическую плотность тока* или *поток вероятности*. $i(x)$ является вероятностью того, что через единицу поверхности, перпендикулярно к оси x , пройдет в единицу времени на одну частицу больше в положительном направлении оси x , чем в отрицательном.

Теперь легко получить также плотность вероятности $W(p)$ в пространстве импульсов, которая, впрочем, для свободной частицы будет сама постоянна во времени (не говоря уже об интеграле), так как в этом случае импульс частицы постоянен.

Эта вероятность даётся следующим выражением:

$$W(\vec{p}) = |A(\vec{p})|^2 = A^* A = \varphi^* \varphi. \quad (39)$$

Сначала может показаться, что $W(p)$ определяется как

$$W(\vec{p}) = C(\vec{p}) |A(\vec{p})|^2,$$

где $C(\vec{p})$ — ещё более общим образом определяемая положительная функция. Однако, благодаря соотношению замкнутости (28), вытекающему из (24'), необходимо положить $|C(\vec{p})| \equiv 1$, так как из

$$\int W(x) dx = 1$$

необходимо должно следовать:

$$\int W(\vec{p}) d\vec{p} = 1.$$

Этим полностью задан аппарат для статистического описания какого-либо состояния свободной материальной частицы. Каждое такое состояние описывается волновым пакетом $\psi(x, t)$ формы (24), из которого согласно (27) однозначно получается «пакет» $\varphi(\vec{p})$ в пространстве импульсов. Однако, фазы функций $\psi(x, t)$ и $\varphi(\vec{p})$ — эти функции часто называют «амплитудами вероятности» — непосредственно не наблюдаемы; непосредственно наблюдаемы лишь плотности вероятности $W(x, t)$ и $W(p)$. Комплексная волновая функция сама по себе носит, таким образом, *символический характер* и служит для того, чтобы осуществлять связь между $W(x, t)$ и $W(p)$ ¹⁾.

Из развитых основных положений можно выводить различные простые следствия, которые могут непосредственно сравниваться с экспериментом. В частности, можно образовывать средние значения каких-либо функций от \vec{x} или \vec{p} и исследовать связь между этими средними и их изменение со временем. Например,

$$\bar{x}_l = \int x_l \psi^* \psi dV, \quad \bar{p}_l = \int p_l \varphi^* \varphi dp. \quad (40)$$

Далее представляет интерес средняя протяжённость пакета в обычном пространстве и в пространстве импульсов, которая даётся «средним поперечником» волнового пакета («mittlere Querschnitte»):

$$\left. \begin{aligned} \overline{(\Delta x_l)^2} &= \int (x_l - \bar{x}_l)^2 \psi^* \psi dV, \\ \overline{(\Delta p_l)^2} &= \int (p_l - \bar{p}_l)^2 \varphi^* \varphi dp. \end{aligned} \right\} \quad (41)$$

Поведение средней точки пакета получается с помощью

¹⁾ В настоящее время ещё не решён в общем виде математический вопрос о том: определяется ли однозначно волновая функция ψ заданием физически совместимых функций $W(x)$ и $W(p)$, т. е. таких $W(x)$ и $W(p)$, которым соответствует по крайней мере одна волновая функция.

(24) и (27') посредством интегрирования по частям

$$\begin{aligned}
 \bar{x}_l &= \frac{1}{V(2\pi)^3} \int x_l \psi^* dV \int \varphi(\vec{k}) e^{i(\vec{k}x)} dk = \\
 &= \frac{1}{V(2\pi)^3} \int \psi^* dV \int \varphi(\vec{k}) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial k_l} (e^{i(\vec{k}x)}) dk = \\
 &= \frac{1}{V(2\pi\hbar)^3} \int \psi^* dV \int i\hbar \frac{\partial}{\partial p_l} [\varphi(p)] e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}x)} dp = \\
 &= \frac{1}{V(2\pi\hbar)^3} \int i\hbar \frac{\partial}{\partial p} [\varphi(p)] dp \int \psi^* e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}x)} dV = \\
 &= \int \varphi^*(p) i\hbar \frac{\partial}{\partial p_l} [\varphi(p)] dp.
 \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\bar{x}_l = \int \varphi^*(p) i\hbar \frac{\partial \varphi(p)}{\partial p_l} dp = \int \varphi^*(\vec{k}) \left(i \frac{\partial}{\partial k_l} \right) \varphi(\vec{k}) dk, \quad (42)$$

или также

$$\bar{x}_l = \int A^*(k) e^{i\omega t} \left(i \frac{\partial}{\partial k_l} \right) [A(k) e^{-i\omega t}] dk.$$

Таким образом, окончательно

$$\bar{x}_l = \int A^* i \frac{\partial A}{\partial k_l} dk + t \int \frac{\partial \omega}{\partial k_l} A^* A dk. \quad (43)$$

Из этого следует:

$$\frac{d\bar{x}_l}{dt} = \left(\frac{\partial \omega}{\partial k_l} \right) = \left(\frac{\partial E}{\partial p_l} \right) = \bar{v}_l = \frac{p_l}{m}, \quad (44)$$

что представляет собой выражение для групповой скорости.

С другой стороны, из уравнения непрерывности (37) легко получить, умножая (37) на x_l и интегрируя по частям:

$$\frac{d\bar{x}_l}{dt} = \int i_l dV = \frac{1}{m} \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x_l} \right) dV; \quad (45)$$

далее из сравнения с (44) следует:

$$\bar{p}_l = \int \varphi^*(p) p_l \varphi(p) dp = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_l} \right) \psi dV, \quad (46)$$

что легко также проверить непосредственно.

Соотношения (42) и (46) могут быть широко обобщены. Пусть $F(x)$ — какая-либо целая рациональная функция от x_i , $F(p)$ — какая-либо целая рациональная функция от p_i . Тогда имеем следующие соотношения:

$$\overline{F(x_i)} = \int \psi^* F(\vec{x}) \psi dV = \int \varphi^* F\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i}\right) \varphi dp, \quad (47)$$

$$\overline{F(p_i)} = \int \psi^* F\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}\right) \psi dV = \int \varphi^* F(p_i) \varphi dp. \quad (47')$$

Справедливость этого можно непосредственно проверить, интегрируя по частям и пользуясь теоремой об интеграле Фурье¹⁾. Так, например:

$$\begin{aligned} \overline{p_i^2} &= \int \varphi^* p_i^2 \varphi dp = \int \psi^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2} \right) dV = +\hbar^2 \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x_i} dV, \\ \overline{x_i^2} &= \int \psi^* x_i^2 \psi dV = \int \varphi^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial p_i^2} \right) dp = +\hbar^2 \int \frac{\partial \varphi^*}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial p_i} dp. \end{aligned}$$

Чтобы установить соответствующие соотношения для $\overline{(\Delta x_i)^2}$ и $\overline{(\Delta p_i)^2}$, требуется только небольшое изменение этих уравнений. Оно достигается наиболее просто, если перейти к новой системе отсчёта: $x' = x - x_0 - vt$, $t' = t$. При этом мы, конечно, должны использовать преобразование Галилея, так как релятивистские поправки пока последовательно пренебрегаются. Так как

$$p'_x = p_x - mv, \quad E' = E - p_x v + \frac{m}{2} v^2,$$

то необходимо положить

$$\varphi' = \varphi e^{-\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} v^2 - p_x v \right] t} e^{\frac{i}{\hbar} f},$$

чтобы, в соответствии с (26), удовлетворить уравнению:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi'}{\partial t} = E' \varphi'.$$

В выражении для φ' функция f , не зависящая от t , должна быть определена так, чтобы функция

$$\psi' = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int \varphi'(\vec{p}') e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}' \cdot \vec{x}')} d\vec{p}'$$

¹⁾ Относительно обобщения этого соотношения для других, не целых, рациональных функций смотри часть II, § 2с и 2b.

обладала свойством:

$$W'(\vec{x}') = W(\vec{x})$$

или

$$\psi^*(\vec{x}') \psi'(\vec{x}') = \psi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}).$$

Чтобы достичь этого, достаточно положить $f = p x_0$. Тогда окончательно получаем:

$$\psi'(\vec{p}') = \varphi(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} v^2 t - p x (x_0 + v t) \right]}, \quad (48)$$

$$\psi'(x') = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} \left[m v (x - x_0) - \frac{m}{2} v^2 t \right]}, \quad (49)$$

или

$$\psi'(x', t') = \psi(x' + x_0 + v t') e^{-\frac{i}{\hbar} \left[m v x' + \frac{m}{2} v^2 t' \right]}. \quad (49')$$

Легко проверить, что эта функция действительно удовлетворяет уравнению:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi'}{\partial t'} = \left(E_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta' \right) \psi'.$$

Для плотности тока (38) отсюда следует

$$\vec{i}' = \vec{i} - v \psi^* \psi. \quad (50)$$

Непосредственное наглядное истолкование этого выражения очевидно.

Так как средняя точка волнового пакета движется, согласно (43), с постоянной скоростью, мы введём систему отсчёта K' , которая движется вместе с центром волнового пакета, так что последний покоится относительно нового начала координат. Тогда в этой новой системе

$$\bar{x} \equiv 0, \quad \bar{p} \equiv 0$$

и

$$\overline{x^2} - \overline{(x - \bar{x})^2} = (\Delta x)^2, \quad \overline{p^2} - \overline{(p - \bar{p})^2} = (\Delta p)^2.$$

Строго говоря, следовало бы писать $\bar{x}_i = 0, \dots$, и т. д. для каждой координаты. Чтобы упростить обозначения, мы в дальнейшем будем рассматривать одномерный случай и опускать штрихи.

Среднее значение

$$\bar{p}^2 = \int p^2 \varphi^* \varphi dp = \hbar^2 \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} dV$$

постоянно во времени; напротив,

$$\bar{x}^2 = \int x^2 \psi^* \psi dV = \hbar^2 \int \frac{\partial^2}{\partial p^2} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial p} dp$$

меняется со временем. Из последнего выражения, согласно (25), сразу следует:

$$\begin{aligned} \dot{x}^2 = \hbar^2 \int \frac{\partial A^*}{\partial p} \cdot \frac{\partial A}{\partial p} dp + i\hbar t \int \frac{\partial E}{\partial p} \left(A^* \frac{\partial A}{\partial p} - A \frac{\partial A^*}{\partial p} \right) dp + \\ + t^2 \int \left(\frac{\partial E}{\partial p} \right)^2 A^* A dp \quad (51) \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \bar{x}^2 = \hbar^2 \int \frac{\partial A^*}{\partial p} \frac{\partial A}{\partial p} dp + \\ + \frac{\hbar t}{m} \int p \left(A^* \frac{\partial A}{\partial p} - A \frac{\partial A^*}{\partial p} \right) dp + \frac{t^2}{m^2} \bar{p}^2. \quad (51') \end{aligned}$$

Средний поперечник произвольного волнового пакета вдоль каждой из осей координат является в случае свободной частицы квадратичной функцией времени. Она возрастает, после прохождения минимума, как позднее, так и ранее произвольно сильно. Легко также переписать (51') для координатного пространства. Обозначим через ψ_0 значение ψ при $t=0$; через $(\bar{x}^2)_0 = \int x \psi_0^ \psi_0 dV$ значение (\bar{x}^2) при $t=0$; через $\vec{i}_0 = \frac{\hbar}{2m} (\psi_0^* \text{grad } \psi_0 - \psi_0 \text{grad } \psi_0^*)$ — значение \vec{i} при $t=0$. Тогда получим:*

$$\bar{x}^2 = (\bar{x}^2)_0 + 2t \int (xi) dV + \frac{t^2}{m^2} \bar{p}^2, \quad (52')$$

и в нештрихованной координатной системе (с $p = \psi^* \psi$):

$$\overline{\Delta x^2} = (\overline{\Delta x^2})_0 + 2t \int (x - \bar{x}) \left(i - \frac{p}{m} \right) dV + \frac{t^2}{m^2} (\overline{\Delta p^2}). \quad (52)$$

Этот результат не содержит ничего особенно характерного для квантовой теории, так как получилось бы то же самое для совокупности свободно движущихся точек, распределённых с плотностью p , плотностью тока \vec{i} и средним квадратом импульса $(\overline{\Delta p^2})$.

Вспомним, однако, что для повторяемости измерения положения важна непрерывность \bar{x} и $\overline{\Delta x}$ как функций времени (при произвольно малых $(\Delta x)_0$). Можно также в трёхмерном случае вычислить изменение со временем среднего значения $\Delta x_l \Delta x_m$ произведения двух координат. Для этих произведений получается аналогично выражение, квадратичное относительно t :

$$\overline{\Delta x_l \Delta x_m} = (\overline{\Delta x_l \Delta x_m})_0 + t \int \left[(x_l - \bar{x}_l) \left(i_m - \frac{p}{m} p_m \right) + (x_m - \bar{x}_m) \left(i_l - \frac{p}{m} p_l \right) \right] dV + \frac{t^2}{m^2} \overline{\Delta p_l \Delta p_m}. \quad (53)$$

Для квантовой теории характерно, однако, то обстоятельство, что между значениями $(\Delta x)^2$ и $(\Delta p)^2$ существует соотношение, соответствующее соотношению неопределённости. В этом соотношении оба выражения $(\Delta x)^2$ и $(\Delta p)^2$ не могут быть одновременно сделаны произвольно малыми¹⁾.

Проще всего можно получать это соотношение преобразованием следующего неравенства:

$$D = \left| \frac{x}{2x^2} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|^2 \geq 0.$$

Тогда

$$\begin{aligned} D &= \frac{x^2}{4(x^2)^2} \psi \psi^* + \frac{x}{2x^2} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} = \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{x}{x^2} \right)^2 \psi \psi^* + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{x^2} \psi \psi^* \right) - \frac{1}{2} \frac{1}{x^2} \psi \psi^* + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} = \\ &= \frac{1}{4} \frac{1}{(x^2)^2} \cdot [x^2 - 2x^2] \psi \psi^* + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{x^2} \psi \psi^* \right) + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x}. \end{aligned}$$

Далее интегрируем:

$$\int D dV = \frac{1}{h^2} \overline{p^2} - \frac{1}{4} \frac{1}{x^2} \geq 0.$$

¹⁾ См. Н. Weyl, Gruppentheorie u. Quantenmechanik, 2 Aufl., Leipzig, 1931, Anhang 1; В. Гейзенберг, Физические основы квантовой механики, ОНТИ; Обсуждения см. E. U. Condon, Science, 1929; Н. P. Robertson, Phys. Rev., 34, 163, 1929 и прежде всего Шрёдингер (Berl. Ber. 1930, 296), где впервые в общем виде доказаны положения (51), (52).

Таким образом,

$$\overline{p^2 x^2} = \overline{(\Delta p)^2} \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (54)$$

Это выражение является количественным уточнением соотношения неопределённости. Мы получаем знак равенства в (54) лишь в случае, если

$$\frac{1}{2} \frac{x}{x^2} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0$$

или

$$\psi = C e^{-\frac{1}{4} \frac{x^2}{x^2}}. \quad (55)$$

Если интересуются произведением $\overline{(\Delta p_l^2)} \overline{(\Delta x_l^2)}$ только для одного определённого значения индекса l , то зависимость от остальных координат безразлична. Если мы хотим, чтобы минимум был достигнут для всех трёх координат, следует положить:

$$\psi = C e^{-\frac{1}{4} \left(\frac{x_1^2}{x_1^2} + \frac{x_2^2}{x_2^2} + \frac{x_3^2}{x_3^2} \right)}. \quad (55')$$

В то время как $\overline{\Delta p_l^2}$ постоянно во времени, $\overline{\Delta x_l^2}$ меняется со временем; если минимум выражения $\overline{(\Delta p_l)^2} \overline{(\Delta x_l)^2}$ достигается в момент $t=0$, то линейный относительно t член в (52) исчезает, и тогда для более раннего или позднего момента времени произведение $\overline{(\Delta p_l)^2} \overline{(\Delta x_l)^2}$ принимает большие значения. Последующими измерениями оно может быть, правда, снова уменьшено, но никогда не может стать меньше минимального значения. Функция импульсов $\varphi(p)$, соответствующая этому минимуму, очевидно, представляет собой тоже гауссовскую функцию, что следует из полной симметрии проблемы минимума относительно p_x и x :

$$\varphi(p) = C e^{-\frac{1}{4} \frac{p_x^2}{(\Delta p_x)^2}}. \quad (56)$$

или

$$\varphi(p) = C e^{-\frac{1}{4} \left[\frac{p_1^2}{(\Delta p_1)^2} + \frac{p_2^2}{(\Delta p_2)^2} + \frac{p_3^2}{(\Delta p_3)^2} \right]}. \quad (56')$$

В этом легко также убедиться непосредственным вычислением с помощью (24").

В заключение рассмотрим общий метод решения (зависящего от времени) уравнения (29) при условии, если ψ для $t=0$ задана как функция координат ψ_0 .

Эту задачу можно будет сразу решить, если нам удастся найти «фундаментальное решение» $U(x_1, x_2, x_3, t)$, которое при $t=0$ представляет собой такую функцию, что для любой конечной области интегрирования

$$\lim_{t \rightarrow 0} \int_{(V)} U dV = \begin{cases} 1, & \text{если } V \text{ содержит нулевую точку,} \\ 0, & \text{если } V \text{ не содержит нулевой точки.} \end{cases} \quad (57)$$

Тогда вследствие линейного характера дифференциального уравнения искомым решением будет функция

$$\begin{aligned} \psi(x_i, t) &= - \int U(\bar{x}_i - x_i, t) \psi(\bar{x}_i; 0) dV = \\ &= \int U(\bar{x}_i, t) \psi(x_i + \bar{x}_i; 0) dV. \end{aligned} \quad (58)$$

Чтобы найти основное решение U для случая свободной частицы нерелятивистской волновой механики, полезно вспомнить о формальной аналогии дифференциального уравнения

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \Delta \psi \quad (59)$$

с уравнением теплопроводности или диффузии¹⁾.

Мы здесь для простоты положили $E_0=0$, так как это может быть легко достигнуто отщеплением множителя $e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t}$ от ψ функции. Здесь, однако, «коэффициент теплопроводности» является мнимым числом. Наше основное решение соответствует тогда решению уравнения теплопроводности для точечного источника тепла и дается для одномерного случая следующим выражением:

$$U(x, t) = \frac{C}{\sqrt{t}} e^{-\frac{im}{2\hbar} \frac{x^2}{t}}.$$

¹⁾ На эту аналогию особо указывал П. Эренфест (Zs. f. Phys., 45, 455, 1927). Для дальнейшего см. Л. де-Бройль, Введение в волновую механику, гл. II, § 13.

Легко проверить, что эта функция удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}.$$

Далее имеем:

$$\int_{x_1}^{x_2} U(x, t) dx = C \sqrt{\frac{2\hbar}{m}} \frac{\sqrt{\frac{m}{2\hbar} \frac{x_2}{Vt}}}{\sqrt{\frac{m}{2\hbar} \frac{x_1}{Vt}}} \int e^{i\xi^2} d\xi.$$

Если

$$\lim a \rightarrow +\infty, \quad \lim b \rightarrow +\infty, \quad \text{то} \quad \lim \int_a^b e^{i\xi^2} d\xi = 0.$$

Если

$$\lim a \rightarrow -\infty, \quad \lim b \rightarrow +\infty,$$

то

$$\lim \int_a^b e^{i\xi^2} d\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} e^{i\frac{\pi}{4}}.$$

Таким образом, действительно, как требует условие (57),

$$\lim_{t \rightarrow 0} \int_{x_1}^{x_2} U dx = \begin{cases} 0 & \text{если точка } x=0 \text{ лежит} \\ 1 & \text{вне} \end{cases} \left\{ \begin{array}{l} \text{внутри} \\ \text{вне} \end{array} \right. \text{ интервала } (x_1, x_2).$$

При этом постоянная C должна быть выбрана следующим образом:

$$C = e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}.$$

Таким образом мы окончательно имеем:

$$U(x, t) = e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{t}} e^{i\frac{m}{2\hbar} \frac{x^2}{t}}. \quad (60)$$

Образуя произведение

$$U(x_1, x_2, x_3; t) = U(x_1, t) U(x_2, t) U(x_3, t) = \\ = e^{-\frac{3\pi}{4}i} \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{t}}, \quad (61)$$

получаем отсюда решение для трёхмерного случая.

Подставив это выражение в (58), получим общее решение волнового уравнения $\psi(x_1, x_2, x_3; t)^1$.

Основное решение U можно также найти, исходя из разложения U в интеграл Фурье, согласно (24) и (27), и используя (57).

§ 4. Волновая функция в случае частицы, находящейся в силовом поле

Описание состояния системы частиц, находящихся в силовом поле, посредством статистических понятий и закономерностей получается обобщением подобного описания для свободных частиц. Очевидно, эти понятия и законы должны быть внутренне непротиворечивы и содержать в себе, как предельный случай, понятия и законы классической механики точечных частиц. Кроме этих общих требований, только успех может решить вопрос о пригодности определённых предпосылок. Для случая одной частицы и при пренебрежении релятивистскими поправками исходные предпосылки можно формулировать следующим образом:

1. Вероятность того, что в определённый момент времени t координаты x_i частицы находятся в интервале $(x_i, x_i + dx_i)$, является и здесь вполне определённым понятием. Эта вероятность снова даётся выражением

$$W(x_1, x_2, x_3, t) dx_1 dx_2 dx_3 = \psi^* \psi dx_1 dx_2 dx_3, \quad (36)$$

где $\psi(x_1, \dots, t)$ — сама по себе не наблюдаемая, в общем случае комплексная, волновая функция, а ψ^* — ком-

¹⁾ Специальные решения волнового уравнения, в особенности для случая, когда для $\psi(x_i, 0)$ выбирается гауссовская функция ошибок, можно найти у: W. Heisenberg, *Zs. f. Phys.*, **43**, 172, 1927; E. H. Kennard, *ibid.*, **44**, 326, 1927; C. G. Darwin, *Proc. Roy. Soc., London (A)*, **117**, 258, 1927.

плексно-сопряжённая ей. При таком написании ψ мыслится нормированной следующим образом:

$$\int \psi^* \psi dV = 1.$$

Это предположение о вероятности весьма естественно потому, что определение координат может быть произведено в такое короткое время, что наличие сил не будет играть при этом никакой роли.

Из (36) следует условие для изменения ψ во времени:

$$\frac{d}{dt} \int \psi^* \psi dV = 0.$$

Это условие выполнимо только в том случае, если для каждого момента времени $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ и $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$ определяются заданными ψ и ψ^* . (О необходимости использовать для частиц с моментом количества движения нескольких функций см. § 13.)

2. Если мы положим

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H(\psi), \quad (62)$$

то H должно быть *линейным* (но не более общим) оператором. Как уже упоминалось, применение оператора H означает сопоставление функции ψ новой функции $H\psi$. При этом для произвольных постоянных c , которые могут быть также комплексными, имеет место соотношение:

$$H(c\psi) = cH(\psi),$$

а для двух произвольных функций ψ_1 , ψ_2 имеем:

$$H(\psi_1 + \psi_2) = H\psi_1 + H\psi_2.$$

(Из этих обоих свойств следует, кроме того, что $H(\psi)$ неявно зависит от ψ^* .)

Требование линейности оператора H может рассматриваться как обобщение *принципа суперпозиции*, так как линейность H в случае свободной частицы, как мы уже видели, непосредственно выражает этот принцип, обязанный своим происхождением волновой теории. Принцип суперпозиции существует для непротиворечивой формулировки понятия измерения, поскольку связь системы

с измерительным аппаратом сама описывается квантово-теоретически (ср. § 9). Чтобы из (62) следовало построение $\int \psi^* \psi dV$ во времени, H должно обладать свойством:

$$\int [\psi^* H \psi - \psi (H \psi)^*] dV = 0. \quad (63)$$

При выводе (63) было использовано волновое уравнение

$$+ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = (H \psi)^*. \quad (62^*)$$

Условие (63) должно выполняться для всех регулярных функций, достаточно быстро исчезающих в бесконечности. Оператор H , обладающий свойством (63), называют эрмитовским¹⁾. Вследствие линейности H из (63) следует для двух произвольных функций:

$$\int [\psi_1^* H \psi_2 - \psi_2 (H \psi_1)^*] dV = 0.$$

3. Связь ψ с «амплитудой» $\varphi(p)$ для импульса, определяющей вероятность согласно соотношению (39), даётся попрежнему²⁾ выражением (24"), (27), но вероятность $W(p_i, t) dp_1 dp_2 dp_3$ уже более не постоянна. (Об измерении импульса связанных частиц см. § 5.) Соотношения (46), (47), так же как и (28), остаются справедливыми и здесь.

С точки зрения нерелятивистской волновой механики единственным путём для нахождения оператора H определённой системы является сравнение поведения общего решения уравнения (62) со свойствами механических траекторий этой системы в классической теории, в соответствующих предельных случаях, как это следует из боровского принципа соответствия. Между различными возможностями, вытекающими для H из принципа соответствия, может сделать выбор лишь опыт.

¹⁾ Заметим, что из (63) ещё не следует линейность H . Например, нелинейный оператор $H\psi = i\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}$ (причём $(H\psi)^* = -i\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}$)

обладает свойством (63), так как $\psi^* H \psi - \psi (H \psi)^* = \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\psi^2 \psi^*)$. Принцип суперпозиции необходимо сформулировать как особое предположение.

²⁾ Это было в общем виде впервые замечено П. Иорданом (*Zs. f. Phys.*, 40, 809, 1927).

Как простейший пример рассмотрим частицу во внешнем поле сил с потенциальной функцией $V(x_1, x_2, x_3)$. Классическая гамильтонова функция в этом случае такова:

$$H(p_i, x_i) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i).$$

Принимая во внимание, что среднее значение p_i^2 , согласно (47'), равно

$$\overline{p_i^2} = \int p_i^2 |\varphi(p)|^2 dp = -\hbar^2 \int \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2} dV,$$

естественно предположить по Шредингеру¹⁾, что волновое уравнение имеет следующий вид:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi. \quad (64)$$

Мы выведем отсюда некоторые следствия о средних значениях, которые аналогичны сформулированным в предыдущем параграфе положениям о поведении центра и ширины волнового пакета.

Прежде всего, так как при вычислении $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ выпадает член, содержащий $V\psi$, из (64) снова следует уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{i} = 0,$$

где $\rho = \psi^* \psi$, и плотность тока выражается попрежнему [см. (38)] в виде

$$i_k = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_k} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} \right).$$

Далее, отсюда снова сразу же следуют соотношения, данные в (44), (45), (46):

$$\begin{aligned} \overline{x_k} &= \int x_k \psi^* \psi dV, \quad \overline{p_k} = \int p_k \varphi^* \varphi dp = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x_k} \right) dV, \\ \frac{d\overline{x_k}}{dt} &= \int i_k dV = \frac{1}{m} \overline{p_k} = \left(\frac{\partial H}{\partial p_k} \right). \end{aligned}$$

¹⁾ E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.*, **79**, 361, 1926. На необходимость статистического истолкования волновой функции указывал в особенности М. Борн (*Zs. f. Phys.*, **38**, 803, 1926).

Мы получим, однако, нечто новое, если вычислим $\frac{d\bar{p}_h}{dt}$, так как это выражение уже не равно нулю, как в случае свободной частицы. Для этой цели образуем сначала выражение

$$m \frac{di_h}{dt} = \frac{1}{2} \left[(H\psi)^* \frac{\partial \psi}{\partial x_h} - \psi^* \frac{\partial}{\partial x_h} (H\psi) + (H\psi) \frac{\partial \psi^*}{\partial x_h} - \psi \frac{\partial}{\partial x_h} (H\psi)^* \right] = \\ = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-(\Delta\psi)^* \frac{\partial \psi}{\partial x_h} + \psi^* \frac{\partial}{\partial x_h} (\Delta\psi) - (\Delta\psi) \frac{\partial \psi^*}{\partial x_h} + \psi \frac{\partial}{\partial x_h} \Delta\psi^* \right] + \\ + \frac{1}{2} \left[V\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_h} - \psi^* \frac{\partial}{\partial x_h} (V\psi) + V\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_h} - \psi \frac{\partial}{\partial x_h} (V\psi)^* \right].$$

Вторая скобка сразу же упрощается и сводится к $-\frac{\partial V}{\partial x_h} \psi^* \psi$. Первую скобку следует преобразовать. Для двух произвольных функций u , v имеем:

$$v \Delta u - u \Delta v = \sum_l \frac{\partial}{\partial x_l} \left(v \frac{\partial u}{\partial x_l} - u \frac{\partial v}{\partial x_l} \right).$$

Положив в этом выражении один раз $v = \psi^*$ и $u = \frac{\partial \psi}{\partial x_h}$ и другой раз $v = \psi$, $u = \frac{\partial \psi^*}{\partial x_h}$ и вводя силу $K_l = -\frac{\partial V}{\partial x_l} = -\frac{\partial H}{\partial x_l}$, получим:

$$m \frac{di_h}{dt} = - \sum_l \frac{\partial T_{hl}}{\partial x_l} + K_h \psi^* \psi, \quad (65)$$

где

$$T_{kl} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_h \partial x_l} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x_h \partial x_l} + \frac{\partial \psi}{\partial x_h} \frac{\partial \psi^*}{\partial x_l} + \frac{\partial \psi^*}{\partial x_h} \frac{\partial \psi}{\partial x_l} \right]. \quad (66)$$

Симметричный тензор T_{kl} ($T_{kl} = T_{lk}$) может быть назван «тензором напряжений»¹⁾. Далее получаем:

$$\frac{d^2 \bar{p}_h}{dt^2} = m \frac{d^2 \bar{x}_h}{dt^2} = m \int \frac{di_h}{dt} dV = \int K_h \psi^* \psi dV = \\ = - \left(\frac{\partial V}{\partial x_h} \right) = - \left(\frac{\partial H}{\partial x_h} \right). \quad (67)$$

¹⁾ О релятивистском обобщении этого см. E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.*, **82**, 265, 1927; см. также часть II, § 2.

Это означает, что производная по времени среднего значения p_k равна среднему значению силы по волновому пакету¹⁾. Последнее, вообще говоря, отличается от значения силы в центре \bar{x}_k волнового пакета. Однако если пакет, в согласии с соотношением неопределённости $\Delta x_k \Delta p_k \sim \hbar$, может быть выбран так, что в области пакета сила меняется лишь незначительно, поведение пакета будет подобно поведению классической частицы, траектория которой удовлетворяет уравнению движения (см. § 12)

$$m \frac{d^2 x_k}{dt^2} = - \frac{\partial V}{\partial x_k}.$$

Другое следствие из (65) касается теоремы вириала²⁾. Умножая (65) на x_k и интегрируя по частям, получаем:

$$m \frac{\partial}{\partial t} \int x_k i_k dV = + \int T_{kk} dV - \int x_k \frac{\partial V}{\partial x_k} \psi^* \psi dV.$$

Вследствие (66) получаем далее для первого интеграла правой части, интегрированием по частям

$$\frac{\hbar^2}{m} \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} \frac{\partial \psi}{\partial x_k} dV = \frac{\bar{p}_k^2}{m}.$$

Таким образом

$$m \frac{\partial}{\partial t} \int x_k i_k dV = \frac{\bar{p}_k^2}{m} - \overline{\left(x_k \frac{\partial V}{\partial x_k} \right)}. \quad (68)$$

Если ещё просуммировать по всем значениям индекса k , то получим аналог теореме вириала.

Наконец, можно, аналогично (52), рассмотреть изменение со временем ширины волнового пакета; последняя даётся выражением:

$$\overline{(\Delta x_k)^2} = \int (x_k - \bar{x}_k)^2 \psi^* \psi dV. \quad (69)$$

Однако теперь, вследствие действия сил, уже невозможно в общем случае дать поведение $\overline{(\Delta x_k)^2}$ со временем;

¹⁾ P. Ehrenfest, Zs. f. Phys., 45, 455, 1927.

²⁾ A. Sommerfeld, Wellenmechan. Ergänzungsband zu Atom-
bau und Spektrallinien Braunschweig 1929, гл. II, § 9.

вместо этого мы вычислим первые и вторые производные $\overline{(\Delta x_k)^2}$ по времени. Так как $\int (x_k - \bar{x}_k) \psi^* \psi dV = 0$, то

$$\frac{d}{dt} \overline{(\Delta x_k)^2} = \int (x_k - \bar{x}_k)^2 \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) dV.$$

С помощью уравнения непрерывности и интегрирования по частям получаем

$$\frac{d}{dt} \overline{(\Delta x_k)^2} = 2 \int (x_k - \bar{x}_k) i_k dV. \quad (70)$$

Далее, так как $\frac{dx_k}{dt} = \int i_k dV = \frac{\bar{p}_k^2}{m}$, то

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} \overline{(\Delta x_k)^2} = \int (x_k - \bar{x}_k) \frac{\partial i_k}{\partial t} dV - \left(\int i_k dV \right)^2.$$

Используя (68), имеем

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} \overline{(\Delta x_k)^2} = \frac{\bar{p}_k^2 - (p_k)^2}{m} + \overline{(\Delta x_k \Delta K_k)}$$

или

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} \overline{(\Delta x_k)^2} = \frac{(\bar{p}_k - p_k)^2}{m} + \overline{(\Delta x_k \Delta K_k)}. \quad (71)$$

Соотношения (70) и (71) представляют собой естественное обобщение соотношения (52).

Прежде чем разбирать вопрос о взаимодействии нескольких частиц, рассмотрим, как нужно модифицировать волновое уравнение при наличии внешнего магнитного поля. Пусть Φ_k — компоненты вектор-потенциала, e — заряд частицы, c — скорость света. Тогда магнитная напряжённость даётся следующим выражением:

$$H_{kl} = \frac{\partial \Phi_l}{\partial x_k} - \frac{\partial \Phi_k}{\partial x_l}. \quad (72)$$

¹⁾ Мы предпочитаем написание H в форме антисимметрического тензора ($H_{li} = -H_{il}$), так что H_{23} , H_{31} , H_{12} означают соответственно 1, 2, 3-ю компоненты H . Векторное произведение $[\dot{x} \vec{H}]$ имеет тогда 1-ю компоненту $\dot{x}_2 H_{12} - \dot{x}_3 H_{31}$. Это выражение, вследствие того что $H_{31} = H_{13}$, $H_{11} = 0$, действительно равно $\sum_{(i)} H_{1i} \dot{x}_i$.

В случае если Φ_k явно зависит от времени, к электрической напряжённости добавляется член:

$$E_k = -\frac{1}{c} \frac{\partial \Phi_k}{\partial t}. \quad (73)$$

Сила выразится следующим образом:

$$\begin{aligned} K_k &= -\frac{\partial V}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \left(E_k + \frac{1}{c} \sum_l H_{kl} \dot{x}_l \right) = \\ &= -\frac{\partial V}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \left[-\frac{\partial \Phi_k}{\partial t} + \sum_{(l)} \left(\frac{\partial \Phi_l}{\partial x_k} - \frac{\partial \Phi_k}{\partial x_l} \right) \dot{x}_l \right]. \end{aligned} \quad (74)$$

Как известно, если сила задаётся выражением (74), уравнения движения механики

$$m \frac{d^2 x_k}{dt^2} = K_k$$

можно написать в канонической форме¹⁾:

$$\frac{dx_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_k},$$

если положить

$$H = \sum_k \frac{1}{2m} \left(p_k - \frac{e}{c} \Phi_k \right)^2 + V(x). \quad (75)$$

В этом случае изменится также обычная связь между импульсом и скоростью:

$$\dot{x}_k = \frac{1}{m} \left(p_k - \frac{e}{c} \Phi_k \right), \quad p_k = m\dot{x}_k + \frac{e}{c} \Phi_k. \quad (75')$$

То обстоятельство, что классическая гамильтонова функция (75) получается из гамильтоновой функции в отсутствии магнитного поля заменой p_k на $p_k - \frac{e}{c} \Phi_k$, подсказывает нам, что волновое уравнение частицы при наличии магнитного поля получится из обычного волно-

¹⁾ Отметим, в качестве исторической справки, что впервые это было показано в книге Lagmor, Aether and matter, Cambridge, 1900.

вого уравнения без магнитного поля (64), если заменить оператор $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k}$ оператором $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{e}{c} \Phi_k$. Сделав это, мы получим вместо (64) обобщённое уравнение:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \sum_k \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{e}{c} \Phi_k \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{e}{c} \Phi_k \right) \psi + V\psi \quad (76)$$

или

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \sum_k \left[-\hbar^2 \Delta \psi - \frac{\hbar}{i} \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial x_k} (\Phi_k \psi) - \frac{\hbar}{i} \frac{e}{c} \Phi_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + \frac{e^2}{c^2} \Phi_k^2 \psi \right] + V\psi. \quad (76')$$

Оправдание сделанного предположения заключается в том, что из этого уравнения для средних значений p_k и x_k , полного тока $\vec{i}_k = \int i_k dV$ и их производных по времени следуют выражения, которые аналогичны соответствующим уравнениям движения классической механики.

Прежде всего снова имеет место уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \text{div } \vec{i} = 0. \quad (37)$$

Это вместе с тем доказывает, что H — действительно эрмитов оператор. Но для тока \vec{i} теперь получаем новое выражение:

$$i_k = \frac{1}{2m} \left[\psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{e}{c} \Phi_k \right) \psi - \psi \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \Phi_k \right) \psi^* \right] \quad (77)$$

или

$$i_k = \frac{\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_k} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} \right) - \frac{e}{mc} \Phi_k \psi^* \psi. \quad (77')$$

Если мы образуем выражения:

$$\bar{p}_k = \int p_k \psi^* \psi dV = \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x_k} dV$$

и

$$\frac{d\bar{x}_k}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \int x_k \psi^* \psi dV = \int i_k dV, \quad (45')$$

то мы найдём, что

$$\frac{d\bar{x}_h}{dt} = \frac{1}{m} \left(\bar{p}_k - \frac{e}{c} \bar{\Phi}_k \right). \quad (75'')$$

Это уравнение аналогично (75').

Далее находим, аналогично (65) и (66):

$$m \frac{\partial i_k}{\partial t} = - \sum_{(l)} \frac{\partial T_{kl}}{\partial x_l} + \left(- \frac{\partial V}{\partial x_k} - \frac{e}{c} \frac{\partial \Phi_k}{\partial t} \right) \psi^* \psi + \frac{e}{c} \sum_{(l)} H_{kl} i_l, \quad (78)$$

где

$$\begin{aligned} T_{kl} = \frac{\hbar^2}{4m} \bigg[& - \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_l \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_k \right) - \\ & - \psi \left(\frac{\partial}{\partial x_l} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_l \right) \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_k \psi^* \right) + \\ & + \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_k \psi \right) \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x_l} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_l \psi^* \right) + \\ & + \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_k \psi^* \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_l} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_l \psi \right) \bigg], \quad (79) \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} T_{kl} = \frac{\hbar^2}{4m} \bigg\{ & \left[- \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_l \partial x_k} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x_l \partial x_k} + \frac{\partial \psi}{\partial x_l} \frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} + \frac{\partial \psi^*}{\partial x_l} \frac{\partial \psi}{\partial x_k} \right] + \\ & + \frac{2ie}{\hbar c} \left[\Phi_k \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_l} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_l} \right) + \Phi_l \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_k} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} \right) \right] + \\ & + \frac{4e^2}{\hbar^2 c^2} \Phi_k \Phi_l \psi^* \psi \bigg\}. \quad (80) \end{aligned}$$

Условие симметрии $T_{kl} = T_{lk}$ здесь снова выполняется. Если положить, принимая во внимание (74):

$$\bar{K}_k = \int \left[- \left(\frac{\partial V}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \frac{\partial \Phi_k}{\partial t} \right) \psi^* \psi + \frac{e}{c} \sum_{(l)} H_{kl} i_l \right] dV, \quad (81)$$

то из (78) (так как $\int i_k dV = \frac{d\bar{x}_k}{dt}$) получим

$$m \frac{d^2 \bar{x}_k}{dt^2} = \bar{K}_k, \quad (82)$$

что является аналогом уравнения движения.

Далее с помощью выражения:

$$\overline{x_k K_k} = \int \left[- x_k \left(\frac{\partial V}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \frac{\partial \Phi_k}{\partial t} \right) \psi^* \psi + \frac{e}{c} \sum_{(l)} H_{kl} x_k i_l \right] dV, \quad (81')$$

совершенно аналогично предыдущему, получим

$$m \frac{\partial}{\partial t} \int x_k i_k dV = \int T_{kk} dV + \overline{x_k K_k}.$$

Из (79) посредством интегрирования по частям следует:

$$\begin{aligned} \int T_{kk} dV &= \frac{\hbar^2}{m} \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_k \psi^* \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_k} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_k \psi \right) dV = \\ &= -\frac{1}{m} \overline{\left(p_k - \frac{e}{c} \Phi_k \right)^2} = m \overline{\dot{x}_k^2}. \end{aligned}$$

Оба последние выражения могут быть, правда, полностью оправданы лишь с точки зрения систематического операторного исчисления, которое будет рассматриваться позже. С этой оговоркой мы имеем:

$$m \frac{\partial}{\partial t} \int x_k i_k dV = m \overline{\dot{x}_k^2} + \overline{x_k K_k}, \quad (83)$$

что является аналогом теоремы вириала.

Таким же образом получаем, аналогично (70) и (71):

$$\frac{d}{dt} \overline{(\Delta x_k)^2} = 2 \int (x_k - \overline{x_k}) i_k dV, \quad (84)$$

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} \overline{(\Delta x_k)^2} = m \overline{(\dot{x}_k - \dot{\overline{x_k}})^2} + \overline{(x_k - \overline{x_k}) K_k}. \quad (85)$$

Как известно, потенциалы Φ_k определены лишь с точностью до добавочного градиента, так как произвольный добавочный градиент не меняет магнитной напряжённости H_{kl} . Таким образом, полагая

$$\Phi'_k = \Phi_k + \frac{\partial f}{\partial x_k}, \quad (86)$$

где f — произвольная функция координат, мы совершаем допустимую подстановку; f может даже явно зависеть от времени, но только тогда одновременно следует положить:

$$V' = V - \frac{\hbar}{c} \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (86')$$

чтобы сохранить инвариантным выражением (74) для силы. Действительно, тогда мы будем иметь:

$$\frac{\partial V'}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \frac{\partial \Phi'_k}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \frac{\partial \Phi_k}{\partial t}, \quad H_{kl} = H'_{kl}.$$

Так как в волновое уравнение (76) входят не только магнитные и электрические напряжённости и сила, но также и сами потенциалы V и Φ_k , то может сначала показаться, что вытекающие из этого уравнения физические результаты также зависят от абсолютного значения потенциала. Это, однако, не так; действительно, если ψ есть решение волнового уравнения (76) для потенциалов V и Φ_k , то с помощью подстановки:

$$\psi' = \psi e^{\frac{ie}{\hbar c} \int} \quad (86'')$$

получим решение ψ' для уравнения с потенциалами V и Φ_k , заданных выражениями (86), (86'). Определённая выражениями (86), (86'), (86'') группа подстановок называется «градиентной группой» (Eichgruppe); величины, которые не изменяются по отношению к этой подстановке, называются «eich-инвариантными» величинами¹⁾. Замечательно, что не только плотность вероятности $\psi^* \psi$, но также данная выражением (17) плотность тока и определённый выражением (79) тензор напряжений T_{kl} являются Eich-инвариантными величинами. Следует отметить, что с этой точки зрения представляются весьма естественными как волновое уравнение (76), так и, в частности, специальный выбор оператора Гамильтона в этом уравнении. С другой стороны, это уравнение существенно связано с предположением, что характеристики поля V и Φ_k сами по себе могут рассматриваться как классические величины (заданные функцией координат пространства и времени), т. е. что можно пренебречь возможным влиянием кванта действия на определение этих величин поля (см. часть II, § 6).

¹⁾ Инвариантность волнового уравнения относительно рассматриваемой группы подстановок (для случая релятивистского обобщения этого уравнения) была впервые установлена В. А. Фоком (Zs. f. Phys., 39, 226, 1927). Аналогия этой группы с «eich-группой» в старой теории гравитации и электричества Вейля была указана Ф. Лондоном (Zs. f. Phys., 42, 375, 1927). Сам Вейль (ibid., 56, 330, 1929) отметил связь этой группы с законом сохранения заряда при выводе волнового уравнения из вариационного принципа. Относительно «градиентной группы» в релятивистском волновом уравнении см. часть II, § 2d.

§ 5. Взаимодействие нескольких частиц. Операторное исчисление.

Способ, которым в квантовой механике описывается система, состоящая из нескольких частиц, имеет для этой теории фундаментальное значение и является для неё более всего характерным. Этот способ показывает, с одной стороны, плодотворность идеи Шредингера о введении функции ψ , удовлетворяющей линейному уравнению, с другой стороны, показывает чисто символический характер этой функции, принципиально отличной от волновых функций классической теории (поверхностные волны в жидкостях, упругие волны, электромагнитные волны).

Мы не получим удовлетворительного описания системы из нескольких частиц, если зададим только вероятность найти *одну* частицу в определённом месте. Представим себе, например, систему, состоящую из двух материальных частиц, находящихся в замкнутом ящике. Пусть этот ящик разделён на две части перегородкой с небольшим запирающимся отверстием. Закрывая внезапно отверстие и разделяя тем самым обе половины, можно установить, в какой из половин ящика находится каждая из частиц в соответствующий момент. Можно не только исследовать, как велика для каждой частицы вероятность находиться в одной или другой половине, но также определить, как часто частицы находятся в той же самой или различной половинах ящика. Пусть вместо разделяющей перегородки применяется «микроскоп» с коротковолновым излучением и вместо разделения конечного объёма только на две части пусть будет произведено разделение пространства на произвольно малые части. Допустим, что имеется N частиц с координатами $x_k^{(1)}, x_k^{(2)}, \dots, x_k^{(N)}$, причём мы для простоты будем писать q_1, \dots, q_f , где $f = 3N$ означает число степеней свободы, системы; далее будем писать просто dq вместо многомерного элемента объёма $dq_1 dq_2 \dots dq_f$.

Основные предположения, принимаемые для описания системы из нескольких материальных частиц, можно тогда сформулировать следующим образом:

1. В каждый момент времени t существует вероятность

$$W(q_1, \dots, q_f, t) dq \quad (87)$$

того, что одновременно координаты первой частицы находятся в интервале $(q_k, q_k + dq_k)$ ($k = 1, 2, 3$), координаты второй частицы — в интервале $(q_k, q_k + dq_k)$ ($k = 4, 5, 6$), координаты N -ой частицы — в интервале $(q_k, q_k + dq_k)$ ($k = f-2, f-1, f$).

Для пояснения введённого понятия вероятности заметим, что здесь прежде всего предположена различимость частиц; вероятность найти первую частицу в интервале $x_k^{(1)}, x_k^{(1)} + dx_k^{(1)}$ и вторую в интервале $x_k^{(2)}, x_k^{(2)} + dx_k^{(2)}$, вообще говоря, будет отлична от вероятности найти вторую частицу в интервале $x_k^{(1)}, x_k^{(1)} + dx_k^{(1)}$ и первую — в интервале $x_k^{(2)}, x_k^{(2)} + dx_k^{(2)}$ или, что то же самое, вероятность зависит от последовательности, в которой расположены $x_k^{(p)}$ среди аргументов q_1, \dots, q_f функции W . Подобная различимость действительно существует, если обе частицы принадлежат к различным сортам, например, имеют различную массу (как электрон и протон или ядра двух различных изотопов).

Существование в природе точно одинаковых частиц, например, двух электронов или двух протонов или двух α -частиц, вынуждает нас, однако, к особой осмотрительности, которая, впрочем, не нашла ещё непосредственного выражения в основах современной квантовой теории. В случае *частиц одинакового сорта* можно лишь говорить о вероятности того, что *одна* из частиц находится в интервале $(x_k^{(1)}, x_k^{(1)} + dx_k^{(1)})$, *другая* — в интервале $(x_k^{(2)}, x_k^{(2)} + dx_k^{(2)})$ и последняя — в интервале $(x_k^{(N)}, x_k^{(N)} + dx_k^{(N)})$. Если, таким образом, существуют несколько частиц одинакового сорта, то можно считать имеющими смысл лишь такие функции W , которые симметричны относительно координат одинаковых частиц. К этому вопросу мы возвратимся более подробно в § 14, а пока не будем принимать во внимание этого обстоятельства.

Посредством интегрирования по координатам всех частиц, кроме одной, получаем N новых функций:

$$W_1(x_1, x_2, x_3), W_2(x_1, x_3, x_4), \dots, W_N(x_{3N-2}, x_{3N-1}, x_{3N}).$$

Эти функции дают вероятность найти определённую частицу в определённой точке пространства при произвольном местонахождении всех остальных частиц. Они говорят

меньше о системе, чем первоначальная функция от / аргументов, так как, в то время как мы вывели эти функции однозначно из первоначальной, обратное, очевидно, не может быть выполнено. (В рассмотренном выше примере ящика, состоящего из двух половин, в котором находятся две частицы, из указания: «для каждой частицы одинаково вероятно находиться в первой или второй половине», не следует ещё что-либо об относительной частоте случаев: «обе частицы в одной половине» и «обе частицы в разных половинах».)

Только в частном случае знание функций W_1, \dots, W_N равнозначно знанию функции $W(q_1, q_2, \dots, q_f)$ — именно, если эта функция W распадается на произведение:

$$W(q_1, \dots, q_f) = \\ = W_1(q_1, q_2, q_3) W_2(q_4, q_5, q_6) \dots W_N(q_{3N-2}, q_{3N-1}, q_{3N}).$$

В этом специальном случае мы говорим, что частицы статистически независимы.

Существование вероятности $W(q_1, \dots, q_f; t)$ содержит утверждение или возможно лишь в предположении, что измерения положения различных частиц не возмущают друг друга принципиально, т. е. что не теряется возможность использования сведений о положении одной частицы для предсказаний результатов других измерений (например, координаты этой частицы в более позднее время), если мы знаем координаты других частиц. Такое положение дел тесно связано с вопросом, насколько существенна *одновременность* измерений положения различных частиц для существования вероятности. Это можно выразить ещё так: при каких условиях существует вероятность

$$W(x_k^{(1)}, t^{(1)}; x_k^{(2)}, t^{(2)}; \dots; x_k^{(N)}, t^{(N)}) dq_1 \dots dq_{3N}, \quad (88)$$

что первая частица находится в момент $t^{(1)}$ в интервале $x_k^{(1)}, x_k^{(1)} + dx_k^{(1)}$, далее вторая частица в момент $t^{(2)}$ — в интервале $x_k^{(2)}, x_k^{(2)} + dx_k^{(2)}$, далее N -ая частица в момент $t^{(N)}$ — в интервале $x_k^{(N)}, x_k^{(N)} + dx_k^{(N)}$. В общем случае, т. е. если между частицами существуют произвольные силы взаимодействия, отсутствие взаимного возмущения измерений гарантировано лишь тогда, когда имеет место сле-

дующее соотношение между расстоянием r_{ab} какой-либо пары (a, b) частиц и соответствующим временем:

$$|t_a - t_b| < \frac{r_{ab}}{c}. \quad (89)$$

Вызванное измерением координаты изменение силового воздействия частицы a на частицу b не может распространяться быстрее скорости света. Поскольку в релятивистской квантовой механике вообще принимается, что существует вероятность $W(x_1, x_2, x_3; t) dx_1 dx_2 dx_3$ для местоположения одной частицы, следует принять существоющей и вероятность (88), если значения аргументов удовлетворяют условию (89)¹). В нерелятивистской области последовательно считать скорость света c бесконечно большой величиной и потому ограничиться случаем, когда $t^{(1)} = t^{(2)} = \dots = t^{(N)} = t$.

2. Как естественное обобщение аналогичных предположений для случая одной частицы, мы принимаем также и здесь существование функции $\psi(q_1, \dots, q_f; t)$, причём

$$W(q_1, \dots, q_f; t) = \psi^* \psi dq. \quad (90)$$

Допустим также, что функция ψ опять-таки удовлетворяет уравнению:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (62)$$

где H — линейный оператор. Функция $(H\psi)(q_1, \dots, q_f; t)$ при этом однозначно определяется значением функции $\psi(q_1, \dots, q_f; t)$ для того же момента времени t , так что не требуется знания ψ для других моментов времени.

Чтобы выполнялось условие

$$\frac{d}{dt} \int \psi^* \psi dq = 0,$$

H должно быть эрмитовским оператором, т. е. для двух произвольных функций ψ_1, ψ_2 , удовлетворяющих лишь известным условиям регулярности, должно иметь место соотношение

$$\int \psi_1^* H \psi_2 dq = \int \psi_2 [H \psi_1]^* dq. \quad (63')$$

¹) О необходимости нескольких ψ -функций для частиц со спином см. § 13.

3. Обобщая (24') и (27), мы полагаем, что

$$\begin{aligned} & \varphi(p_1, \dots, p_f; t) = \\ & = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^f}} \int \psi(q_1, \dots, q_f; t) e^{-\frac{i}{\hbar}(p_1 q_1 + \dots + p_f q_f)} dq, \end{aligned} \quad (91)$$

С обращением:

$$\begin{aligned} & \psi(q_1, \dots, q_f; t) = \\ & = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^f}} \int \varphi(p_1, \dots, p_f; t) e^{+\frac{i}{\hbar}(p_1 q_1 + \dots + p_f q_f)} dp, \end{aligned} \quad (91')$$

Тогда как

$$W(p_1, \dots, p_f; t) dp = \varphi \varphi^* dp \quad (92)$$

даёт вероятность, что в момент t импульс частицы находится в интервале $(p_k, p_k + dp_k)$. В этих выражениях положено: $dq = dq_1, \dots, dq_f$ и $dp = dp_1, \dots, dp_f$. Далее соблюдается соотношение

$$\int \varphi^* \varphi dp \equiv \int \psi^* \psi dq. \quad (93)$$

Отсюда следует, с помощью интегрирования по частям, совершенно аналогично (47), (47'):

$$\begin{aligned} \overline{F(p_1, \dots, p_f)} &= \int \varphi^* F \varphi dp = \\ &= \int \psi^* \left[F \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_f} \right) \psi \right] dq, \end{aligned} \quad (94)$$

$$\begin{aligned} \overline{F(q_1, \dots, q_f)} &= \int \psi^* F \psi dq = \\ &= \int \varphi^* \left[F \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_1}, \dots, i\hbar \frac{\partial}{\partial p_f} \right) \varphi \right] dp. \end{aligned} \quad (94')$$

Здесь F — целая рациональная функция f переменных. Эти соотношения мы разъясним несколько позже.

Что касается выбора оператора Гамильтона H , то прежде всего положим, что в случае отсутствия взаимодействия между частицами, но при наличии, однако, произвольных *внешних* сил оператор Гамильтона распадается на независимые слагаемые:

$$H = H^{(1)} + H^{(2)} + \dots + H^{(N)}, \quad (95)$$

причём оператор $H^{(1)}$ изменяет лишь функцию $\psi(x_k^{(1)})$, содержащую координаты первой частицы, но функции,

содержащие координаты только других частиц, оставляет неизменными. Таким образом, имеем:

$$H^{(1)} [\psi(q^{(1)}) \psi(q^{(2)}, \dots, q^{(N)})] = \\ = \{H^{(1)}[\psi(q^{(1)})]\} \psi(q^{(2)}, \dots, q^{(N)}).$$

Аналогичные соотношения имеют место для операторов $H^{(2)}, \dots, H^{(N)}$. Если, таким образом,

$$\psi^{(1)}(q^{(1)}), \dots, \psi^{(N)}(q^{(N)})$$

суть какие-либо решения волнового уравнения

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^{(a)}}{\partial t} = H^{(a)} \psi^{(a)} \quad (a = 1, 2, \dots, N)$$

изолированной системы, то

$$\psi = \psi^{(1)} \cdot \psi^{(2)} \dots \psi^{(N)} \quad (96)$$

есть решение (правда, не наиболее общее) уравнения:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = [H^{(1)} + H^{(2)} + \dots + H^{(N)}] \psi.$$

Аддитивное разложение оператора Гамильтона на независимые слагаемые соответствует, таким образом, разложению волновой функции на независимые множители. Это находится в согласии с тем обстоятельством, что в случае статистически независимых частиц вероятность $W(q_1, \dots, q_f; t)$ распадается на произведение. Так как ψ для всех времён однозначно определяется заданием ψ_0 для определённого момента времени t_0 , то можно утверждать, что если в случае несвязанных частиц волновая функция в определённый момент времени распадается на произведение, то это будет соблюдаться для всех моментов времени. Также справедливо следующее: если механически несвязанные частицы статистически независимы для определённого момента времени t_0 , то они остаются статистически независимыми и для всех моментов времени.

На основании предыдущего параграфа мы знаем гамильтонов оператор H_0 для несвязанных частиц, находящихся под действием внешних сил. Он даётся выражением:

$$H_0 = \sum_{a=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m^{(a)}} \sum_{k=1}^3 \left(\frac{\partial}{\partial x_k^{(a)}} - \frac{i}{\hbar} \frac{e^{(a)}}{c} \Phi^{(a)}(x_k^{(a)}) \right)^2 + V^{(a)}(x_k^{(a)}) \right]. \quad (97)$$

Если силы между частицами могут быть получены из потенциала $V(q_1, \dots, q_f)$, зависящего только от координат частиц, то естественно положить:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = (H\psi) = (H_0\psi) + V(q_1, \dots, q_f)\psi. \quad (98)$$

Высказанному предположению о характере сил между частицами удовлетворяют и кулоновы электрические силы между заряженными частицами, потенциал которых даётся выражением:

$$V = \sum'_{(a,b)} \frac{e_a e_b}{r_{ab}}. \quad (99)$$

(В этой сумме $a \neq b$ и каждая пара (a, b) берётся только один раз.) Вопросы магнитного взаимодействия двух частиц мы будем подробно разбирать при обсуждении релятивистской квантовой механики.

В нерелятивистском случае выражения (97), (98), (99) для волнового уравнения проблемы многих тел представляют собой (не учитывая необходимого дополнения, касающегося спина, см. § 13) основу для расчёта строения атомов и молекул. Что касается их принципиального значения, то подчеркнём, что здесь потенциалы $\Phi^{(a)}$, $V^{(a)}$ ¹⁾ и V взяты из классической теории; это относится, в частности, и к кулонову потенциалу (99), который в свою очередь является следствием уравнений Максвелла. Таким образом, современная волновая механика покоится на двух различных основах: во-первых, на уравнениях для (понимаемых лишь символически) волн материи, которые должны рассматриваться как логическое обобщение классической механики частицы, вносящее в теорию квантов действие и, во-вторых, на электродинамических уравнениях Максвелла, которые, конечно, тоже нуждаются в квантово-механическом истолковании. Весьма заманчивым был бы охват обоих этих положений с одной логически единой точки зрения, пока ещё не найденной.

¹⁾ «Внешние силы» следует рассматривать как вспомогательное понятие, применение которого удобно, когда тела, вызывающие эти силы, не входят в рассматриваемую систему. Исключение этих сил в принципе всегда было бы возможно, если бы можно было строго провести в квантовой теории учёт запаздывания действия сил.

Этот вопрос должен быть связан с ещё не решённой проблемой электрического элементарного кванта.

В настоящей главе мы будем, однако, рассматривать потенциал просто как заданную функцию координат пространства и времени. Прежде всего на наш случай могут быть непосредственно перенесены уравнение непрерывности (37) и уравнение (45') для изменения тока со временем. При этом целесообразно вместо $e^{(a)}$, $m^{(a)}$, $\Phi^{(a)}(x_k^{(a)})$, где $k=1, 2, 3$, $(a)=1, 2, \dots, N$, ввести обозначения e_k , m_k , Φ_k , где $k=1, 2, \dots, f$, — так что, например, $m_1=m_2=m_3=m^{(1)}$, $m_4=m_5=m_6=m^{(2)}$. Тогда мы будем иметь в f -мерном пространстве вектор с f компонентами i_k ($k=1, \dots, f$); физический смысл этого вектора таков; i_1 , например, есть вероятность того, что, при заданном положении всех частиц, в положительном направлении относительно оси x_1 — через перпендикулярную по отношению к оси x_1 единичную площадку пройдёт число частиц, на одну частицу большее. Этот вектор \vec{i} даётся в f -мерном пространстве выражением:

$$i_k = \frac{\hbar}{2m_k i} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial q_k} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial q_k} \right) - \frac{1}{m_k c} e_k \Phi_k \psi^* \psi \quad (100)$$

и удовлетворяет уравнению непрерывности

$$\frac{\partial (\psi^* \psi)}{\partial t} + \sum_{k=1}^f \frac{\partial i_k}{\partial q_k} = 0. \quad (101)$$

Тензор напряжения также будет даваться в f -мерном пространстве выражением, плотностью аналогичным (79):

$$\begin{aligned} T_{\lambda\lambda} = \frac{\hbar^2}{4m_\lambda} \bigg[& -\psi^* \left(\frac{\partial}{\partial q_\lambda} - \frac{ie_\lambda}{\hbar c} \Phi_\lambda \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial q_\lambda} - \frac{ie_\lambda}{\hbar c} \Phi_\lambda \psi \right) - \\ & -\psi \left(\frac{\partial}{\partial q_\lambda} + \frac{ie_\lambda}{\hbar c} \Phi_\lambda \right) \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial q_\lambda} + \frac{ie_\lambda}{\hbar c} \Phi_\lambda \psi^* \right) + \\ & + \left(\frac{\partial \psi}{\partial q_\lambda} - \frac{ie_\lambda}{\hbar c} \Phi_\lambda \psi \right) \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial q_\lambda} + \frac{ie_\lambda}{\hbar c} \Phi_\lambda \psi^* \right) + \\ & + \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial q_\lambda} + \frac{ie_\lambda}{\hbar c} \Phi_\lambda \psi^* \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial q_\lambda} - \frac{ie_\lambda}{\hbar c} \Phi_\lambda \psi \right) \bigg]. \quad (79') \end{aligned}$$

Условие симметричности $T_{\lambda\lambda} = T_{\lambda\lambda}$ выполняется здесь только в случае, если λ и λ принадлежат той же частице. Аналогично (78) имеет место следующее соотношение:

$$m \frac{\partial i_{\lambda}}{\partial t} = - \sum_{\lambda} \frac{\partial T_{\lambda\lambda}}{\partial q_{\lambda}} + \left(- \frac{\partial (V + \sum_a V^{(a)})}{\partial q_{\lambda}} - \frac{e_{\lambda}}{c} \frac{\partial \Phi_{\lambda}}{\partial t} \right) \psi^* \psi + \\ + \frac{e_{\lambda}}{c} \sum_{\lambda} \left(\frac{\partial \Phi_{\lambda}}{\partial q_{\lambda}} - \frac{\partial \Phi_{\lambda}}{\partial q_{\lambda}} \right) i_{\lambda}. \quad (78')$$

При наших предположениях относительно Φ_h в последней сумме отличны от нуля лишь три члена (относящиеся к той же самой частице). Далее, снова имеем:

$$\frac{d\bar{q}_h}{dt} = \int i_h dV = \frac{1}{m_h} \left(\bar{p}_h - \frac{e_h}{c} \bar{\Phi}_h \right), \quad (75')$$

$$m \frac{d^2 \bar{q}_h}{dt^2} = \bar{K}_h, \quad (82')$$

причём \bar{K}_h определено выражением (81).

Последние из приведённых соотношений — уравнения движения — могут быть выведены весьма общим способом из волнового уравнения с помощью операторного исчисления. Мы обратимся сначала к соотношениям (91), (91'), из которых следуют соотношения (94), (94'), если F — целая рациональная функция. Из этих соотношений следует, что импульсам и координатам приводятся в соответствие операторы, которые действуют следующим образом:

$$p_h \psi(q_1, \dots, q_l) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_h} \psi, \quad q_h \psi(q_1, \dots, q_l) = q_h \psi, \quad (102)$$

$$p_h \varphi(p_1, \dots, p_l) = p_h \varphi(p_1, \dots, p_l),$$

$$q_h \varphi(p_1, \dots, p_l) = - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_h} \varphi. \quad (102')$$

Отсюда следуют фундаментальные перестановочные соотношения

$$\left. \begin{aligned} p_h q_l - q_l p_h &= \delta_{lh} \frac{\hbar}{i}, \quad \left(\delta_{lh} = \begin{cases} 1, & \text{если } l = h \\ 0, & \text{если } l \neq h \end{cases} \right) \\ p_h p_l - p_l p_h &= 0, \\ q_h q_l - q_l q_h &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (103)$$

Например:

$$p_k q_k \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} (q_k \psi), \quad q_k p_k \psi = q_k \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} \psi.$$

Таким образом, действительно,

$$(p_k q_k - q_k p_k) \psi = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial q_k} (q_k \psi) - q_k \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) = \frac{\hbar}{i} \psi.$$

То же самое получим, если используем для проверки перестановочных соотношений функцию $\varphi(p_1, \dots, p_l)$. Аналогичным способом можно проверить и остальные перестановочные соотношения (103). Эта форма перестановочных соотношений является лишь другим выражением для связи (91), (91') $\varphi(p)$ и $\psi(q)$.

Далее заметим, что p_k и q_k являются эрмитовскими (линейными) операторами. Такие операторы определяются тем, что соотношение

$$\int \psi_1^* (H \psi_2) dV = \int \psi_2 (H \psi_1)^* dV \quad (63)$$

должно иметь место для произвольных функций ψ_1 и ψ_2 . Легко установить, что это соотношение справедливо для операторов (102). Мы напомним далее, что в результате двукратного применения (63) к двум эрмитовским операторам получается:

$$\begin{aligned} \int (H_1 \psi_1)^* (H_2 \psi_2) dV &= \int \psi_2 (H_2 [H_1 \psi_1])^* dV, \\ \int (H_2 \psi_2)^* (H_1 \psi_1) dV &= \int \psi_1 (H_1 [H_2 \psi_2])^* dV; \end{aligned}$$

таким образом,

$$\int \psi_2 (H_2 [H_1 \psi_1])^* dV = \int \psi_1 (H_1 [H_2 \psi_2])^* dV. \quad (104)$$

Отсюда следует: если H_1 и H_2 — эрмитовы линейные операторы, то таковыми же являются и операторы:

$$F = H_1 H_2 + H_2 H_1, \quad (105)$$

$$G = i (H_1 H_2 - H_2 H_1). \quad (105')$$

Если, в частности, H_1 и H_2 коммутативны, то $H_1 H_2$ также эрмитово; таким образом, каждая целая рацию-

нальная функция от H , снова будет эрмитовой. Пусть A, B —два линейных оператора; для краткости мы часто будем использовать следующее обозначение:

$$[A, B] \equiv i(AB - BA). \quad (106)$$

Тогда имеем:

$$[A_1 A_2, A_3] \equiv A_1 [A_2 A_3] + [A_1 A_3] A_2, \quad (107)$$

$$[[A_1, A_2] A_3] + [[A_3, A_1] A_2] + [[A_2, A_3] A_1] \equiv 0. \quad (108)$$

Пусть F —произвольный эрмитов линейный оператор, неявно зависящий от времени, и H —оператор Гамильтона. Мы хотим вычислить производную среднего значения (математического ожидания):

$$\overline{F} = \int \psi^* (F\psi) dV, \quad (109)$$

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d\overline{F}}{dt} &= \hbar \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} (F\psi) dV + \hbar \int \psi^* \left(F \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dV = \\ &= i \int (H\psi)^* (F\psi) dV - i \int \psi^* (F[H\psi]) dV = \\ &= i \int \psi^* [(HF)\psi] dV - i \int \psi^* [(FH)\psi] dV. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\hbar \frac{d\overline{F}}{dt} = \int \psi^* ([H, F]\psi) dV = \overline{[H, F]} = i \overline{(HF - FH)}. \quad (110)$$

Далее имеем для каждой функции $F(p_1, \dots, p_l)$ от одних лишь p

$$Fp_k - p_k F = 0, \quad Fq_k - q_k F = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial F}{\partial p_k}. \quad (111)$$

Последняя формула справедлива для $F = p_i$ и для $F = q_i$; если формула (111) справедлива для F_1 и F_2 , то она справедлива и для $F_1 + F_2$ и $F_1 \cdot F_2$, что очевидно из (107). Отсюда следует справедливость соотношения (111) и для любой целой рациональной функции F от p .

Далее, в соответствии с определением $p_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k}$, имеем для каждой функции $G(q_1, \dots, q_l)$ от одних лишь q :

$$p_k G - G p_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial G}{\partial q_k}, \quad q_k G - G q_k = 0. \quad (112)$$

Из (111) и (112) вместе следует, что для каждой функции типа

$$H(p, q) = F(p_1, \dots, p_f) + G(q_1, \dots, q_f), \quad (113)$$

где F — целая рациональная, а G — произвольная функция,

$$H\psi(q) = \left[F\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_f}\right) + G(q_1, \dots, q_f) \right] \psi, \\ H p_k - p_k H = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial q_k}, \quad H q_k - q_k H = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial H}{\partial p_k}. \quad (114)$$

Наконец, пользуясь определением p_k и q_k , так же легко доказать формулу (114) ещё для функции вида:

$$H = F(p_1, \dots, p_f) + \sum_k [A_k(q) p_k + p_k A_k(q)] + \\ + G(q_1, \dots, q_f). \quad (113')$$

Как раз такой вид имеет гамильтонова функция в декартовых координатах, которые мы употребляли до сих пор. (Следует соблюдать симметрию в последовательности множителей A_k и p_k ; это, согласно (105), необходимо для того, чтобы оператор H был эрмитов.)

Полагая в (110) $F = p_k$ или $F = q_k$, получим, принимая во внимание (114):

$$\frac{\partial \bar{p}_k}{\partial t} = -\left(\frac{\partial H}{\partial q_k}\right), \quad \frac{\partial \bar{q}_k}{\partial t} = +\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\right). \quad (115)$$

Это — уравнения для средних значений соответствующих величин, причём усреднение происходит по волновому пакету, являющемуся произвольным решением волнового уравнения. При этом, исходя из предшествующего, под средним значением выражения вида

$$A_k(q) p_k + p_k A_k(q)$$

понимается интеграл

$$\int \psi^* \left[A_k(q) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} (A_k(q) \psi) \right] dq,$$

который имеет всегда действительное значение. Это определение оказывается оправданным во многих отношениях. Затем из (110), если положить $F = H$, следует

(для случая, когда H не зависит от времени явно)

$$\frac{d\bar{H}}{dt} = 0, \quad \bar{H} = \text{const.} \quad (116)$$

(так как $[H, H] = 0$).

Здесь мы усматриваем выражение закона сохранения энергии, так как H может быть интерпретировано как среднее значение энергии по волновому пакету. Подобным же образом для общего импульса системы следует:

$$\bar{P} = \sum_{(k)} p_k, \quad \frac{d\bar{P}}{dt} = - \left(\sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \right) H.$$

Это выражение обращается в нуль, если H явно зависит лишь от разностей координат $q_k - q_i$. Далее имеем для момента количества движения (момента импульса), в случае отсутствия магнитного поля,

$$J_{ik} = \sum_{a=1}^N (q_i^{(a)} p_k^{(a)} - q_k^{(a)} p_i^{(a)}),$$

$$(J_{ik} = -J_{ki}, \quad i, k = 1, 2, 3) \quad (117)$$

[(a) — индекс частицы, пробегающий значения от 1 до N].

$$\frac{dJ_{ik}}{dt} = - \sum_{a=1}^N \left[q_i^{(a)} \frac{\partial V}{\partial q_k^{(a)}} - q_k^{(a)} \frac{\partial V}{\partial q_i^{(a)}} \right]. \quad (118)$$

Здесь, как в классической механике, правая часть обращается в нуль, если потенциальная энергия системы инвариантна относительно вращения всей системы как целого в пространстве. При наличии магнитного поля имеем:

$$\frac{d\bar{q}_z}{dt} = \frac{1}{m} \left(\bar{p}_z - \frac{e}{c} \bar{\Phi}_z \right) = \int i_z dq, \quad (119)$$

причём i_z определяется выражением (100).

Далее имеем при нашем определении среднего значения:

$$\begin{aligned} \int H_{\lambda l} i_{\lambda} dV &= \frac{1}{2} \overline{(H_{\lambda l} \dot{q}_{\lambda} + \dot{q}_{\lambda} H_{\lambda l})} = \\ &= \frac{1}{2m} \overline{(H_{\lambda l} p_{\lambda} + p_{\lambda} H_{\lambda l})} - \frac{e}{mc} H_{\lambda l} \Phi_{\lambda}, \end{aligned}$$

где

$$H_{x\lambda} = \frac{\partial \Phi_\lambda}{\partial q_x} - \frac{\partial \Phi_x}{\partial q_\lambda}.$$

Таким образом,

$$m \frac{d^2 \bar{q}_x}{dt^2} = - \frac{\partial (V + \sum_a V^{(a)})}{\partial q_x} - \frac{e_x}{c} \frac{\partial \Phi_x}{\partial t} + \\ + \frac{e_x}{c} \frac{1}{2} \sum_\lambda (H_{x\lambda} \dot{q}_\lambda + \dot{q}_\lambda H_{x\lambda}) = \bar{K}_x.$$

Затем

$$\bar{J}_{ik} = \sum_{a=1}^N m^{(a)} (\dot{q}_i^{(a)} \dot{q}_k^{(a)} - q_k^{(a)} \dot{q}_i^{(a)}) = \\ = \sum_{a=1}^N \left[(q_i^{(a)} p_k^{(a)} - p_k^{(a)} q_i^{(a)}) - \frac{e^{(a)}}{c} (q_i^{(a)} \Phi_k^{(a)} - q_k^{(a)} \Phi_i^{(a)}) \right], \quad (117')$$

$$\bar{J}_{ik} = \sum_{a=1}^N m^{(a)} \int [\dot{q}_i^{(a)} \dot{q}_k^{(a)} - q_k^{(a)} \dot{q}_i^{(a)}] dq, \quad (117'')$$

$$\frac{d\bar{J}_{ik}}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{(a)} [\overline{(q_i^{(a)} K_k^{(a)} - q_k^{(a)} K_i^{(a)})} + \overline{(K_k^{(a)} q_i^{(a)} - K_i^{(a)} q_k^{(a)})}]. \quad (120)$$

Здесь под $K_k^{(a)}$ понимается оператор соответственной компоненты сил. (120) следует также и непосредственно из (78'). Правая часть (120) снова обращается в нуль, если система обладает симметрией вращения относительно оси, перпендикулярной к плоскости $x_i x_k$ (ср. § 13).

Скажем несколько слов о случае, когда вместо декартовых координат употребляются какие-либо другие координаты. Так как классическая гамильтонова функция имеет тогда общий вид квадратичной формы от p , с произвольным образом зависящими от q коэффициентами, то здесь появляется, вообще говоря, двузначность относительно последовательности множителей $f(q)$ и p_k . Эта последовательность может быть установлена только посредством пересчёта в декартовы координаты¹⁾.

¹⁾ В. Podolsky, *Phys. Rev.*, 32, 812, 1928.

Для образования частных производных этого общего выражения по p_k и q_k , напротив, можно дать рациональные правила¹⁾, именно можно установить как определение, что при дифференцировании произведения двух функций $F_1 F_2$ всегда должен иметь место следующий порядок сомножителей:

$$\frac{\partial}{\partial X} (F_1 F_2) = \frac{\partial F_1}{\partial X} F_2 + F_1 \frac{\partial F_2}{\partial X}. \quad (121)$$

Для произведения произвольного числа сомножителей отсюда по индукции следует

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial X} (F_1 \dots F_N) = & \frac{\partial F_1}{\partial X} F_2 \dots F_N + \\ & + F_1 \frac{\partial F_2}{\partial X} F_3 \dots F_N + \dots + F_1 \dots F_{N-1} \frac{\partial F_N}{\partial X}. \end{aligned} \quad (121')$$

Здесь под X понимается любая из переменных p_1, \dots, q_f . (114) в этом случае снова справедливо, если H — целая рациональная функция от p и произвольная функция от q . Благодаря (107), (115) снова будет следствием волнового уравнения.

Мы можем сформулировать волновое уравнение в произвольных криволинейных координатах. Пусть элемент кривой

$$ds^2 = g_{\lambda\lambda} dq_\lambda dq_\lambda$$

(по каждому индексу, который встречается два раза, в последующих уравнениях всегда подразумевается суммирование), где $g_{\lambda\lambda} = g_{\lambda\lambda}$ — произвольные функции от q_λ , и множитель массы предполагается включенным в $g_{\lambda\lambda}$. Из $g^{\lambda\lambda}$ может быть образована обратная $g_{\lambda\lambda}$ матрица; пусть далее $D = \sqrt{|g|}$ будет квадратным корнем из детерминанта $|g| = |g_{\lambda\lambda}|$ функций $g_{\lambda\lambda}$. Тогда в этих координатах волновое уравнение будет иметь вид:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{1}{D} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_x} + A_x \right) D g^{\lambda\lambda} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \right) \psi + V \psi. \quad (97*)$$

Здесь A_x есть помноженный на $-\frac{e_x}{c}$ вектор-потенциал.

¹⁾ М. Born, P. Jordan, W. Heisenberg, Z. S. f. Phys. 35, 557, 1926.

Точно так же имеет место уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial i^x}{\partial q_x} = 0,$$

где

$$\rho = D \psi \psi^* \\ i^x = D g^{x\lambda} \left[\psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \psi \right) + \psi \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \psi^* \right) \right].$$

Вследствие присутствия множителя D в функции плотности мы будем называть оператор F эрмитовским, если

$$\int D \psi^* (F \psi) dq = \int D (F \psi)^* \psi dq.$$

Пусть оператор импульса p_x будет эрмитов в этом смысле и, кроме того, удовлетворяет перестановочным соотношениям:

$$p_x q_x - q_x p_x = \frac{\hbar}{i};$$

тогда

$$p_x \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{D}} \frac{\partial \sqrt{D} \psi}{\partial q_x}.$$

Легко установить отношение этого оператора к волновому уравнению и току.

В частном случае сферических координат

$$ds^2 = m(dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\varphi^2)$$

и, таким образом,

$$D = r^2 \sin \theta, \quad g^{rr} = \frac{1}{m}, \quad g^{\theta\theta} = \frac{1}{m} \frac{1}{r^2}, \quad g^{\varphi\varphi} = \frac{1}{m} \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta}.$$

Для дальнейших применений заметим, что в этом случае

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{df}{dr} \right) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rf).$$

Согласно (97*), оператор Гамильтона можно написать в следующей простой форме:

$$H + \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p^2}{r^2} \right) + V, \quad (97'^*)$$

где

$$\left. \begin{aligned} p_r \psi &= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r \psi), \\ p^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \end{aligned} \right\} \quad (97''^*)$$

Такой способ написания часто встречается в старых работах по квантовой механике.

§ 6. Стационарные состояния как решения проблемы собственных значений.

Из решений обобщённого волнового уравнения

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q \right) \psi \quad (62)$$

особый интерес представляют те решения, для которых как плотность $\psi^* \psi$, так и плотность тока не зависят от времени. При этом мы всюду предполагаем, что входящие в H значения полей V , Φ_k не содержат времени явно. Рассматриваемые решения соответствуют тогда так называемым *стационарным состояниям* системы. Поскольку $\psi^* \psi$ и $\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial q_k} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial q_k}$ не зависят от времени, ψ должно иметь форму:

$$\psi = u(q) e^{-if(t)},$$

где u не зависит от t , а f не зависит от q . Из (62) следует далее:

$$\hbar \frac{\partial f}{\partial t} u(q) = H[u(q)],$$

что возможно только в том случае, если $\frac{\partial f}{\partial t}$ не зависит от времени. Мы можем, следовательно, положить

$$\psi_E = u(q) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}, \quad (122)$$

$$H \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q \right) u = Eu. \quad (123)$$

Мы имеем здесь, следовательно, однородное линейное дифференциальное уравнение, которое содержит один параметр. Такие дифференциальные уравнения, как известно, не всегда имеют регулярные решения при любых значениях E , и потому возникает *проблема собственных значений*. Для того чтобы установить условия регулярности для проблемы¹⁾, мы будем исходить из уравнения

$$\int v^* (Hu) dq = \int u (Hv)^* dq, \quad (124)$$

¹⁾ Ср. J. v. Neumann, *Gött. Nachr.* 1927, стр. 1. Этот вопрос был позже рассмотрен G. Jaffé, *Z. S. f. Phys.*, 66, 770, 1930. Однако, нам представляется, что в цитированной работе Неймана даётся наиболее общее решение вопроса.

справедливого для двух любых функций u и v . От функций, допустимых в качестве решений (123), мы должны потребовать, чтобы эта «эрмитовость» или «комплексная самосопряжённость» оператора H не нарушалась особыми точками. В частности, (124) должно быть справедливо, когда одна из функций иррегулярна. Области изменения q и функции u могут быть сделаны ещё весьма общие предположения. [В общем случае можно подразумевать под dq дифференциал объёма $\rho(q) dq_1 dq_2 \dots dq_f$ с соответствующей весовой функцией $\rho(q)$]. Например, при вращениях твёрдого тела речь может идти об угловых переменных, которые изменяются только от 0 до 2π или от 0 до π . Речь может идти также о функциях ограниченного интервала [например $(-1, +1)$], которые на концах интервала принимают одинаковые значения, или о функциях, определённых в полупространстве $(0, \infty)$, которые должны исчезать при $q=0$. Равенство (124) должно всегда выполняться в области функций, ограниченной условиями регулярности и краевыми условиями. При этом, однако, не обязательно, чтобы u и v были повсюду регулярны. $\psi^* \psi = uu^*$ имеет значение плотности вероятности; поэтому нужно также потребовать, чтобы интеграл

$$\int uu^* dq \quad (125)$$

существовал (т. е. имел конечное значение) по всей области изменения q . Во многих случаях эти требования определяют *дискретные* собственные значения E . В случае непрерывных собственных значений требование (125) должно быть несколько смягчено, что легко увидеть на примере свободных частиц. Одним из решений уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u = Eu$$

является плоская волна

$$u_{p_1, \dots, p_f} = e^{\frac{i}{\hbar}(p_1 q_1 + \dots + p_f q_f)},$$

где p_1, \dots, p_f рассматриваются как постоянные интегрирования. Для этих плоских волн условие (125), очевидно, не выполняется. Действительно, плоские волны

представляют собой физически особый предельный случай, так как здесь вероятность нахождения частицы вне определённого конечного объёма в бесконечное число раз превышает вероятность нахождения её внутри конечного объёма; только отношение вероятностей нахождения частиц в двух различных конечных областях пространства имеет определённое значение¹⁾. Как уже было показано в § 2, эта особенность исчезает, если рассматривать волновые пакеты. Если образовать функцию \bar{u} с помощью интегрирования по конечной, но сколь угодно малой области p -пространства:

$$\bar{u}_{p', p''} = \int_{p''}^{p'} dp_1 \dots dp_f u_{p_1, \dots, p_f},$$

то интеграл от $\bar{u} \bar{u}^*$ по всему q -пространству существует. Обобщая условие (125) на случай собственных функций, зависящих непрерывно от нескольких параметров $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ (обозначим их сокращённо λ без индекса), мы будем требовать, чтобы для

$$u_{\lambda', \lambda''} = \int_{\lambda'}^{\lambda''} u_{\lambda}(q) d\lambda \quad (126)$$

(где $d\lambda$ введено, как сокращение $d\lambda_1 d\lambda_2 \dots d\lambda_n$) существовал интеграл

$$\int \bar{u}_{\lambda', \lambda''}(q) \bar{u}_{\lambda', \lambda''}(q) dq. \quad (127)$$

Только эти «элементарные пакеты» $\bar{u}_{\lambda', \lambda''}$ должны удовлетворять условиям (124) для всего q -пространства.

Можно найти единую формулировку для дискретных и непрерывных собственных значений, полагая

$$\bar{u}_{\lambda} = \int_{\lambda_0}^{\lambda} u_{\lambda}(q) d\lambda + \sum_{p=\lambda_1}^{\lambda_n} u_p(q), \quad (126')$$

где интегрирование выполняется по непрерывным собственным значениям, лежащим в интервале $\lambda_0 \leq \lambda' < \lambda$, а сумма берётся по всем дискретным собственным значениям $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, лежащим в этом интервале, так что \bar{u}_{λ} может изменяться скачкообразно.

¹⁾ См. также П. А. М. Дирак, *Основы квантовой механики*.

разно. Для всякой непрерывной функции $f(\lambda)$ существует интеграл Стильтьеса

$$\int_{\lambda_0}^{\lambda} f(\lambda) d\bar{u}_{\lambda} = \int_{\lambda_0}^{\lambda} f(\lambda) u_{\lambda}(q) d\lambda + \sum_{p=\lambda_1}^{\lambda_n} u_p f(\lambda_p),$$

и функцию \bar{u}_{λ} , могущую изменяться скачкообразно при изменении λ , можно охарактеризовать (совершенно независимо от существования u_{λ}) с помощью уравнения

$$(H\bar{u}_{\lambda^*}) - (H\bar{u}_{\lambda'}) = \int_{\lambda'}^{\lambda^*} [H d\bar{u}_{\lambda}] = \int_{\lambda'}^{\lambda^*} E(\lambda) d\bar{u}_{\lambda}, \quad (123')$$

которое является обобщением (123). Дискретные значения E_1, E_2, \dots представляют собой значения E в точках разрыва $\lambda_1, \lambda_2, \dots$

Чтобы исследовать совместимые с (124) особенности функций u и v , нужно вернуться к уравнению

$$\oint [v^*(Hu) - u(Hv)^*] dq = \oint i_N(v^*, u) df, \quad (128)$$

которое получается из уравнения непрерывности

$$v^*Hu - u(Hv)^* = \text{Div } \vec{i}(v^*, u)$$

при интегрировании по конечному объёму в q -пространстве. При этом $\vec{i}(v^*, u)$ формально получается из обычной плотности тока $\vec{i}(\psi^*, \psi)$ путём замены $\psi^* \rightarrow v^*, \psi \rightarrow u$; Div определяется в f -мерном пространстве; поверхностный интеграл в первой части (128) берётся по замкнутой поверхности, ограничивающей область v ; i_N означает компоненту \vec{i} в направлении внешней нормали к граничной поверхности. В частности, если в левой части (128) стоит одномерный интеграл, то правая часть (128) вырождается в разность значений i на границах области интегрирования q_1, q_2 . В тех случаях, когда входящие в H потенциальные функции имеют особые точки, следует потребовать, чтобы в уравнении (128) интеграл по поверхности, окружающей особую точку, можно было сделать сколь угодно малым.

Отсюда легко вытекает для различных случаев следующее:

а) Пусть дана одномерная задача с гамильтоновой функцией

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \frac{e}{c} \Phi(x) \right)^2 + V(x).$$

В точке x_0 нарушается непрерывность $\Phi(x)$ или $V(x)$, или обеих функций. Так как в этом случае

$$i(v^*, u) = \frac{1}{2m} \left[v^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{du}{dx} - \frac{e}{c} \Phi(x) u \right) - u \left(\frac{\hbar}{i} \frac{dv^*}{dx} - \frac{e}{c} \Phi(x) v^* \right) \right],$$

следует потребовать

$$\left. \begin{array}{l} \frac{du}{dx} - \frac{i\hbar e}{c} \Phi(x) u \text{ непрерывно,} \\ u \text{ непрерывно} \end{array} \right\} \text{ при } x = x_0. \quad (129)$$

Это должно выполняться для всех рассматриваемых функций, в том числе и для $v(x)$.

б) Пусть для одной частицы в обычном пространстве V имеет особенность. Интеграл $\oint i_N df$ по сфере вокруг начала координат имеет вид

$$r^2 \int \left[v^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{du}{dr} - \frac{e}{c} \Phi_r u \right) - u \left(\frac{\hbar}{i} \frac{dv^*}{dr} - \frac{e}{c} \Phi_r v^* \right) \right] d\Omega.$$

Пусть все функции v, u могут быть представлены в форме $\bar{v}/r^\alpha, \bar{u}/r^\alpha$, где \bar{u} и \bar{v} регулярны в начале координат (в частности, они могут быть равными нулю, однако, это требование не обязательно). Тогда, как легко видеть, необходимо потребовать $2 - 2\alpha > 0$, т. е. $\alpha < 1$, для того чтобы

интеграл $\oint i_N df$ обращался в нуль в пределе при $r \rightarrow 0$, для всех регулярных \bar{u} и \bar{v} . Иными словами, функции u и v должны стремиться к бесконечности при $r \rightarrow 0$ медленнее, чем $1/r$. Собственные функции, для которых

$\lim (ru) = A \neq 0$ недопустимы (хотя $\int_0^\infty u^* u r^2 dr$ для таких

функций существует).

Мы получаем, таким образом, вполне определённую проблему о собственных значениях и вместе с тем естественный и свободный от произвола метод, позволяющий

определять допустимые значения энергии системы как дискретные, так и непрерывные. Этот метод ввёл впервые Шредингер¹⁾, которому тогда же удалось определить спектр собственных значений энергии для электрона с зарядом $-e$, находящегося в поле ядра заряда $+Ze$, т. е. обладающего потенциальной энергией $V = -\frac{Ze^2}{r}$. Он показал, что из установленного им волнового уравнения [ср. (98), (99)]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u + \left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) u = 0$$

следует, что энергия имеет отрицательные дискретные собственные значения $-\frac{Rh}{1^2}, -\frac{Rh}{2^2}, \dots, -\frac{Rh}{n^2}, \dots$ и при-
мыкающие к ним непрерывные положительные собственные значения ($0 \leq E < +\infty$). При этом

$$R = \frac{me^4}{4\pi\hbar^2} Z^2$$

представляет собой постоянную Ридберга, умноженную на квадрат порядкового номера ядра. (Наличие в этом случае смешанного—дискретного и непрерывного—спектра собственных значений энергии связано с поведением потенциальной функции в бесконечности: а именно, с её медленным убыванием от отрицательных значений до нуля при $r \rightarrow \infty$. Напротив, точечная особенность потенциала V в начале координат не играет никакой роли, так как точечное ядро может быть с таким же успехом заменено маленьким заряженным шаром.)

Простейший пример системы, имеющей только дискретные уровни энергии, представляет собой гармонический осциллятор. В одномерном случае он имеет потенциальную энергию

$$V = \frac{m}{2} \omega^2 x^2.$$

В случае трёхмерного изотропного осциллятора потенциальная энергия равна

$$V = \frac{m}{2} \omega^2 r^2,$$

¹⁾ E. Schrödinger, *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, т. I.

где ω обозначает круговую частоту осциллятора. Уровни энергии для линейного осциллятора равны

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (n = 1, 2, 3, \dots),$$

а для изотропного трёхмерного осциллятора

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega \quad (n = 1, 2, 3, \dots).$$

В рассмотренных здесь случаях (так же, как и в случае свободных частиц) значения энергии ограничены снизу: существует наименьшее значение энергии. Что это не всегда так ¹⁾, показывает пример, соответствующий постоянной силе, направленной вдоль x :

$$V = -Fx.$$

В качестве примера на вычисление в криволинейных координатах мы рассмотрим здесь случай полярных координат (который входит также в упомянутую проблему водородного атома), так как он особенно важен для задачи о частице в центральном силовом поле, т. е. в поле, потенциальная энергия которого $V(r)$ зависит только от расстояния r частицы от неподвижного центра. [Ср. уравнения (97'), (97'') на стр. (9.) Оператор Δ принимает в полярных координатах r, θ, φ вид

$$\Delta u \equiv \frac{1}{r^2} \frac{d^2}{dr^2} (ru) + \frac{1}{r^2} \vec{\Omega} u,$$

$$\vec{\Omega} \equiv \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

связано простым образом с оператором момента количества движения частицы, первая компонента которого имеет выражение

$$P_1 = \frac{\hbar}{i} \left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \right),$$

а остальные получаются циклической перестановкой. Квадрат вектора момента количества движения

$$P^2 = P_1^2 + P_2^2 + P_3^2$$

равен просто

$$P^2 = -\hbar^2 \vec{\Omega}.$$

¹⁾ Вычисления для специального примера имеются у Бете, *Квантовая механика простейших систем*.

В случае центрального поля сил волновое уравнение (123) допускает разделение переменных

$$u = f(r)Y(\theta, \varphi),$$

где Y удовлетворяет уравнению

$$\vec{\Omega}Y = \lambda Y \quad (130)$$

с постоянным λ , а $f(r)$ — уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rf) + \frac{\lambda}{r^2} r \right] + V(r)f = Ef.$$

Требуется найти решения уравнения (130) и собственные значения $\vec{\Omega}$. Ответ общеизвестен¹⁾. Только при $\lambda = -l(l+1)$,

где l — неотрицательное целое число ($l \geq 0$), существуют регулярные решения (130), а именно обобщённые шаровые функции порядка l . Для данного l существуют $2l+1$ линейно независимых шаровых функций. Собственные значения P^2 равны, следовательно, $\hbar^2 l(l+1)$. Можно выбрать $Y_l(\theta, \varphi)$ так, чтобы оператор

$$P_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

просто умножал бы функцию $Y_l(\theta, \varphi)$ на своё собственное значение. Собственные значения P_z равны $\hbar m$, где m — целое число, лежащее между $-l$ и $+l$:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta) e^{im\varphi}.$$

Непосредственно очевидно, что функции $Y_{l,m}$ ортогональны друг другу при одинаковом l и различных m . Ортогональность для различных l вытекает из дифференциального уравнения. Действительно, для любых двух функций Y_1 и Y_2

$$\begin{aligned} \sin \theta (Y_1 \vec{\Omega} Y_2 - Y_2 \vec{\Omega} Y_1) &\equiv \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta (Y_1 \frac{\partial Y_2}{\partial \theta} - Y_2 \frac{\partial Y_1}{\partial \theta}) \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\sin \theta (Y_2 \frac{\partial Y_1}{\partial \varphi} - Y_1 \frac{\partial Y_2}{\partial \varphi}) \right], \end{aligned}$$

откуда при подстановке $Y_{l,m}$ вместо Y_1 и $Y_{l',m'}$ вместо

¹⁾ Р. Курант и Д. Гильберт, *Методы математической физики*, т. I, стр. 299—300, ГТТИ, 1933.

Y , вытекает

$$\int Y_{l',m}^* Y_{l,m} \sin \theta d\theta d\varphi = 0 \quad \text{при } l \neq l'$$

в силу уравнения (130).

В связи с этим интересно обсудить возможность многозначных решений уравнения (130). Поскольку в общем

решении $\sum c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E t} u_n$ непосредственное физическое значение имеет только плотность $\psi^* \psi$, можно было бы усомниться в необходимости требования однозначности u . Если все u_n рассматриваемой системы умножаются при обходе определённого замкнутого пути на один и тот же множитель с модулем, равным единице, то $\psi^* \psi$ всё-таки остаётся всегда однозначным. Можно, однако, показать, что производные многозначных функций всегда имеют в известных местах такую особенность, которая нарушает ортогональность системы функций и самосопряжённость оператора Гамильтона (стр. 73). В частности, это имеет место в случае полуцелых шаровых функций $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, у которых как l , так и m различаются друг от друга на половину целого числа.

Решения дифференциального уравнения (97*) имеют в этом случае следующее свойство: при полном обходе вокруг полярной оси они изменяют свой знак. Это ещё не даёт оснований запрещать такие решения. Однако, кроме того, для этих функций предел

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \sin \theta \left[Y_{l,m} \frac{\partial}{\partial \theta} Y_{l',m}^* - Y_{l',m}^* \frac{\partial}{\partial \theta} Y_{l,m} \right] = Q(0)$$

не равен нулю, а имеет конечное значение. Определённая аналогично величина $Q(\pi)$ оказывается равной

$$Q(\pi) = (-1)^{l+l'} Q(0).$$

Полагая $l' = l$, легко видеть, что функции $Y_{l,m}$ с полуцелыми l и m соответствует полюсообразный источник в точке $\theta = 0$ и отрицательный источник (сток) такой же силы в точке $\theta = \pi$, тогда как при нечётном $l' - l$ не происходит никакой компенсации источников. Согласно установленному на стр. 79, 80 критерию, такие функции недопустимы в качестве собственных функций: действи-

тельно, при $l \neq l'$ они даже не ортогональны. Таким образом, целочисленность квантовых чисел l и m в нашем случае вытекает даже из общей точки зрения, не требующей заранее однозначности собственных функций.

Непосредственно из основного уравнения (124) для оператора \hat{H} вытекает важное свойство собственных функций, если мы заменим входящие туда функции ψ и u двумя решениями u_n и u_m , которым соответствуют различные значения энергии E_n , E_m . При этом мы займёмся сначала случаем дискретных собственных значений, чтобы иметь возможность применить это соотношение непосредственно к собственным решениям. В этом случае получаем¹⁾

$$E_n \int u_m^* u_n dq = E_m \int u_n u_m^* dq,$$

откуда следует

$$\int u_m^* u_n dq = 0 \quad \text{при } E_n \neq E_m. \quad (131)$$

Это свойство называют *ортогональностью собственных функций*. Здесь следует отметить, что одному значению энергии E_n может соответствовать несколько линейно независимых функций. Наиболее общее решение для этого собственного значения имеет вид

$$u_n = c_1 u_{n,1} + c_2 u_{n,2} + \dots + c_g u_{n,g},$$

где c_1, \dots, c_g — произвольные постоянные. Их число g — *кратность* состояния, или его *вес* — равно максимальному числу линейно независимых решений, которые существуют при данном состоянии. (В упомянутом выше примере водородного атома состояние n имеет кратность

¹⁾ При этом здесь уже предположено, что все E вещественны. Это следует, однако, из (124) при $u = u = u_n$, так как это соотношение переходит тогда в

$$E_n \int u_n^* u_n dV = E_n^* \int u_n u_n^* dV,$$

т. е.

$$E_n = E_n^*.$$

n^2 ¹⁾, для плоского осциллятора $g = n + 1$, состояния линейного гармонического осциллятора однократны.) Базис $u_{n,1}, \dots, u_{n,g}$ решений (123) с данным E_n можно всегда ортогонализировать, т. е. посредством образования определённых линейных комбинаций заменить его другим базисом, при котором условие (131) выполняется для всех пар различных функций u_n, u_m . В дальнейшем мы всегда предполагаем, что такая ортогонализация уже произведена. Ввиду того что постоянный множитель в каждой u_n ещё не определён, мы можем далее предполагать их нормированными согласно соотношению

$$\int u_n^* u_n dq = 1. \quad (131')$$

Комплексный множитель с модулем, равным 1 в u_n , остаётся тогда всё-таки неопределённым.

Любую функцию f , для которой существует $\int |f|^2 dq$, можно разложить в ряд

$$f \sim a_1 u_1 + a_2 u_2 + \dots + a_n u_n + \dots, \quad (132)$$

где коэффициенты a_n имеют значения

$$a_n = \int f u_n dq, \quad (133)$$

которые легко найти с помощью соотношений ортогональности (131), (131'). Значок \sim означает, что ряд в общем случае не является сходящимся в обычном смысле, а только «сходящимся в среднем». Это означает, что ряд удовлетворяет равенству

$$\lim_{N \rightarrow 0} \int \left| f - \sum_{k=1}^N a_k u_k \right|^2 dq = 0. \quad (132')$$

На это обстоятельство следует обращать особое внимание, когда f имеет какие-либо особенности, не нарушающие интегрируемости квадрата функции; для достижения сходимости в среднем функции u_n отнюдь не обязательно должны повторять эти особенности и наоборот.

¹⁾ Об удвоении кратности этих состояний благодаря спину электрона см. § 13.

Интеграл в соотношении (132') можно преобразовать

$$\int |f|^2 dq - \sum_{k=1}^N a_k^* \int f u_k^* dq - \sum_{k=1}^N a_k \int f^* u_k dq + \\ + \sum_{l,k=1}^N a_k a_l^* \int u_k u_l^* dq,$$

или, принимая во внимание (131), (131') и (133),

$$\int |f|^2 dq - 2 \sum_{k=1}^N a_k^* a_k + \sum_{k=1}^N a_k a_k^* = \int |f|^2 dq - \sum_{k=1}^N a_k a_k^*.$$

Поэтому (132') эквивалентно равенству

$$\int |f|^2 dq = \sum_{k=1}^{\infty} a_k^* a_k, \quad (134)$$

причём одновременно доказана сходимость входящего сюда ряда. Это соотношение называется *условием полноты* (или замкнутости), так как оно служит критерием того, что к системе u_n нельзя добавить новую линейно независимую функцию и что ни одна из функций u_n не опущена. Поскольку соотношения между функциями f и коэффициентами a_n линейны, для любых двух функций

$$f \sim a_1 u_1 + \dots + a_n u_n + \dots, \quad a_n = \int f u_n^* dq, \\ g \sim b_1 u_1 + \dots + b_n u_n + \dots, \quad b_n = \int g u_n^* dq$$

справедливы формулы:

$$\int f^* g dq = \sum_{k=1}^N a_k^* b_k, \quad \int f g^* dq = \sum_{k=1}^N a_k b_k^*. \quad (134')$$

Они могут быть получены из (133), если подставить в это соотношение $\lambda f + \mu g$ вместо f и $\lambda a_k + \mu b_k$ вместо a_k , где λ и μ — произвольные числа.

Соотношения ортогональности можно обобщить, если ввести элементарные пакеты $\bar{u}_{\lambda, \lambda'} = \bar{u}_{\lambda} - \bar{u}_{\lambda'}$ с помощью

(126). Применение соотношения (124) к этим функциям даёт

$$\int \bar{u}_{\lambda_1 \lambda_1'}^* \bar{u}_{\lambda_2 \lambda_2'} dq = 0, \quad (131')$$

если (λ_1', λ_2') не перекрывается с (λ_1, λ_2) . Далее, в случае чисто непрерывного спектра существует предел

$$\lim_{\Delta\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\lambda} \int \bar{u}_{\lambda, \lambda + \Delta\lambda}^* \bar{u}_{\lambda, \lambda + \Delta\lambda} dq \rightarrow G(\lambda),$$

так что

$$\int \bar{u}_{\lambda, \lambda + \Delta\lambda}^* \bar{u}_{\lambda, \lambda + \Delta\lambda} dq = \int_{\lambda}^{\lambda + \Delta\lambda} G(\lambda) d\lambda. \quad (135)$$

(131') и (135) можно объединить уравнением

$$\int \bar{u}_{\lambda_1 \lambda_1'}^* \bar{u}_{\lambda_2 \lambda_2'} dq = \int_{\lambda'}^{\lambda''} G(\lambda) d\lambda, \quad (136)$$

где (λ', λ'') представляет собой *общую часть интервалов* (λ_1', λ_2') и (λ_2', λ_1') . В частности, если $G(\lambda)$ в (136) равно 1, то функция u и соответственно \bar{u} называются *нормированными* по отношению к непрерывному параметру λ . В этом случае

$$\int \bar{u}_{\lambda_1 \lambda_1'}^* \bar{u}_{\lambda_2 \lambda_2'} dq = (\lambda'' - \lambda'). \quad (137)$$

Если ввести вместо λ функцию $\mu = f(\lambda)$, как новый параметр, то по отношению к μ нормированной будет функция

$$\bar{u}_{\mu', \mu''} = \int_{\lambda'}^{\lambda''} \sqrt{\frac{d\mu}{d\lambda}} d\bar{u}_{\lambda \lambda'}, \quad (137')$$

или грубо говоря: собственные функции u_λ умножаются в этом случае на $\sqrt{d\mu/d\lambda}$. Далее, разложение в ряд (132) заменяется здесь интегралом

$$f \sim \int a_\lambda u_\lambda d\lambda = \int a_\lambda d\bar{u}_\lambda, \quad (138)$$

причём

$$a_\lambda G(\lambda) = \int f u_\lambda^* dq \quad (139)$$

или

$$a_\lambda = \int f u_\lambda^* dq, \quad (139')$$

в том случае, если u_λ нормировано согласно (137). Условие полноты гласит

$$\lim_{\substack{\lambda_1 \rightarrow -\infty \\ \lambda_2 \rightarrow +\infty}} \int \left| f - \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} a_\lambda u_\lambda d\lambda \right|^2 dq = 0$$

или

$$\lim_{\substack{\lambda_1 \rightarrow -\infty \\ \lambda_2 \rightarrow +\infty}} \int \left| f - \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} a_\lambda du_\lambda d\lambda \right|^2 dq = 0,$$

что, в силу соотношений ортогональности, равносильно

$$\int |f|^2 dq = \int |a_\lambda|^2 d\lambda, \quad (140)$$

или при отсутствии нормировки:

$$\int |f|^2 dq = \int |a_\lambda|^2 G(\lambda) d\lambda. \quad (140')$$

Для двух функций f , g и коэффициентов их разложения a_λ , b_λ ,

$$\int fg^* dq = \int a_\lambda b_\lambda^* G(\lambda) d\lambda. \quad (140'')$$

Эти результаты можно сформулировать так, чтобы объединить дискретный и непрерывный спектры¹⁾. Пусть снова u_λ функция, определённая в (124'), которая может изменяться скачкообразно в зависимости от λ ; введём далее для сокращения

$$\bar{u}_{\lambda, \lambda^*} = u_{\lambda^*} - u_\lambda$$

и будем снова обозначать (λ', λ'') общую часть обоих интервалов (λ'_1, λ'_2) и $(\lambda''_1, \lambda''_2)$, если они встречаются в одном уравнении (общая часть может в частном случае исчезать). Отказываясь от нормировки, мы запишем условие ортогональности в виде:

$$\int \bar{u}_{\lambda'_1 \lambda'_2}^* \bar{u}_{\lambda''_1 \lambda''_2} dq = \bar{G}(\lambda'') - \bar{G}(\lambda'), \quad (136')$$

где $\bar{G}(\lambda)$ монотонно неубывающая с растущим λ , всегда положительная функция, которая может изменяться скачкообразно. Отказ от нормировки удобен потому, что он позволяет лучше

¹⁾ См. J. v. Neumann, *Götting. Nachr.*, 1927, стр. 1.

провести вычисления в случае вырождения, так как при определенных значениях λ к функции u_λ может добавляться целое линейное многообразие собственных функций. Если вместо (139) записать

$$\int_{\lambda'}^{\lambda''} a_\lambda d\bar{G}(\lambda) = \int f \bar{u}_{\lambda'', \lambda'}^* dq, \quad (139')$$

то это равенство будет справедливо как для дискретного, так и для непрерывного спектра. Условие полноты может быть тогда записано в виде

$$\int |f|^2 dq = \int_{-\infty}^{+\infty} |a_\lambda|^2 d\bar{G}(\lambda) \quad (141)$$

и соответственно

$$\int f g^* dq = \int_{-\infty}^{+\infty} a_\lambda b_\lambda^* d\bar{G}(\lambda). \quad (142)$$

Рассмотрим теперь оператор P_λ , который сопоставляет произвольной функции f ограниченную верхним пределом λ часть интеграла (138)

$$P_\lambda f = \int_{-\infty}^{\lambda} a_\lambda d\bar{u}_\lambda.$$

Этот оператор называют *проецирующим оператором*, так как он проецирует многообразие коэффициентов a_λ на частичное многообразие этих коэффициентов, которое исчезает вне интервала $(-\infty, \lambda)$. Каждый проецирующий оператор P имеет, очевидно, свойство

$$P^2 = P \quad (143)$$

и, обратно, *каждый* оператор P , обладающий этим свойством, мы будем называть проецирующим. В нашем случае оператор

$$P_{\lambda'' \lambda'} \equiv P_{\lambda''} - P_{\lambda'}, \quad \text{при } \lambda'' > \lambda'$$

является проецирующим оператором:

$$(P_{\lambda'' \lambda'})^2 \equiv (P_{\lambda''} - P_{\lambda'})^2 = P_{\lambda'' \lambda'}, \quad \text{для всех } \lambda'' > \lambda'. \quad (I)$$

Далее,

$$P(-\infty) = 0, \quad P(+\infty) = 1 \quad (II)$$

для $\lambda' > \lambda$ и $\lim \lambda' \rightarrow \lambda^*$ следует $P_{\lambda'} \rightarrow P_\lambda$.

Рассмотрим теперь отношение между операторами H и P_λ . Согласно (123')

$$H\bar{u}_{\lambda'\lambda''} = \int_{\lambda'}^{\lambda''} E(\lambda) d\bar{u}_\lambda,$$

и следовательно,

$$\begin{aligned} P_{\lambda'\lambda''} f &= \int_{\lambda'}^{\lambda''} a_\lambda d\bar{u}_\lambda, \\ HP_{\lambda'\lambda''} f &= \int_{\lambda'}^{\lambda''} a_\lambda E_\lambda d\bar{u}_\lambda = \int_{\lambda'}^{\lambda''} E(\lambda) d(P_{\lambda'\lambda''} f), \end{aligned} \quad (144)$$

при $\lambda' = -\infty$ и $\lambda'' = +\infty$ это переходит в

$$Hf = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\lambda) d(P_\lambda f), \quad (III)$$

что равносильно следующему утверждению: для всех g имеет место соотношение

$$\int (g \cdot Hf) dq = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\lambda) d \left(\int g \cdot P_\lambda f dq \right). \quad (III')$$

Вместо произвольного параметра λ здесь можно ввести непосредственно энергию. Требования (I), (II), (III) определяют проблему собственных значений весьма общим образом. Вопрос о её разрешимости мы обсудим ещё в следующем параграфе.

Для вычислений часто удобно ввести интеграл

$$\int u_\lambda^* u_\lambda dq$$

как несобственный. Пусть $\delta(\lambda)$ — несобственная функция со свойствами

$$\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} f(\lambda) \delta(\lambda) d\lambda = \begin{cases} f(0), & \text{если } 0 \text{ лежит} \\ 0, & \text{вне} \end{cases} \left\{ \begin{array}{l} \text{внутри} \\ \text{вне} \end{array} \right. (\lambda_1, \lambda_2), \quad (145)$$

тогда

$$\left. \begin{aligned} \int u_\lambda^* u_\lambda d\lambda &= G(\lambda) \delta(\lambda' - \lambda) \\ \text{или } &= \delta(\lambda' - \lambda) \text{ в случае нормировки.} \end{aligned} \right\} \quad (146)$$

В дальнейшем мы будем также употреблять производную δ' от δ -функции, которая определяется следующим образом:

$$\int f(\lambda) \delta'(\lambda) d\lambda = - \int f'(\lambda) \delta(\lambda) d\lambda = \\ = \begin{cases} -f'(0), & \text{если } 0 \text{ лежит} \\ 0, & \text{если } 0 \text{ не лежит} \end{cases} \begin{cases} \text{внутри} \\ \text{вне} \end{cases} (\lambda_1, \lambda_2). \quad (147)$$

Эти соотношения должны рассматриваться как удобное формальное сокращение (136), (137).

Следует также отметить, что общее дифференциальное уравнение (123) проблемы собственных значений всегда эквивалентно¹⁾ вариационной проблеме

$$\delta \int u^*(Hu) dq = \delta \int (Hu)^* u dq = 0 \quad (148)$$

с дополнительным условием

$$\int u^* u dq = 1. \quad (149)$$

Здесь u и u^* должны варьироваться независимо друг от друга. В случае необходимости (148) может быть ещё преобразовано с помощью интегрирования по частям. Например, для гамильтоновой функции, записанной в декартовых координатах,

$$H = - \sum_k \frac{\hbar^2}{2m_k} \left(\frac{\partial}{\partial q_k} - \frac{ie_k}{\hbar c} \Phi_k \right)^2 + V(q)$$

имеем:

$$\delta \int \left[\sum_k \frac{\hbar^2}{2m_k} \left(\frac{\partial u^*}{\partial q_k} + \frac{ie_k}{\hbar c} \Phi_k \right) \left(\frac{\partial u}{\partial q_k} - \frac{ie_k}{\hbar c} \Phi_k \right) + \right. \\ \left. + Vu^* u \right] dq = 0 \quad (150)$$

с дополнительным условием (149). Значение интеграла (150) для экстремальной функции в силу (123) точно равно собственному значению энергии. Эта вариационная проблема часто бывает полезна для приближённого интегрирования дифференциальных уравнений. Для этого выбирают определённую форму функции u и затем пытаются решить вариационную задачу при этих дополни-

¹⁾ E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.*, **79**, 361, 1926.

тельных ограничениях. При этом величина вариационного интеграла получается всегда больше, чем истинное собственное значение.

Коснёмся ещё двух общих положений. В случае вещественных собственных функций, если таковые имеются, наименьшим собственным значением обладает собственная функция без узловых поверхностей (корней). В случае вещественных собственных функций одной переменной расположению функций по возрастающему числу корней соответствует расположение их по возрастающим собственным значениям. Число корней имеет, таким образом, смысл «квантового числа» системы.

§ 7. Общие преобразования операторов и матриц.

С помощью условия полноты можно установить важную связь между действующими на u_n операторами и соответствующими им матрицами. Пусть F — линейный оператор, тогда каждой собственной функции u_n соответствует разложение в ряд

$$(Fu_n) \sim \sum_k u_k F_{kn}, \quad \text{где } F_{kn} = \int u_k^* (Fu_n) dq. \quad (151)$$

Если оператор F эрмитов, то

$$\int u_k^* (Fu_n) dq = \int (Fu_k)^* u_n dq,$$

и следовательно,

$$F_{kn} = (F_{nk})^*; \quad (152)$$

матрица F_{kn} в этом случае эрмитова. Рассмотрим теперь два эрмитовых оператора

$$\begin{aligned} Fu_n &\sim \sum_k u_k F_{kn}, & F_{kn} &= \int u_k^* (Fu_n) dq, \\ Gu_n &\sim \sum_k u_k G_{kn}, & G_{kn} &= \int u_k^* (Gu_n) dq. \end{aligned}$$

Мы применим к этим разложениям условие полноты (134') (справедливое для всех n, m), которое гласит:

$$\int (Fu_n)^* (Gu_m) dq = \sum_{k=1}^{\infty} F_{kn}^* G_{km}.$$

и используем эрмитовость F :

$$\int u_n^* (FG u_m) dq = \sum_k F_{nk} G_{km}. \quad (153)$$

На основании (134) каждому оператору сопоставляется матрица, причём каждому эрмитову оператору — эрмитова матрица. Из (153) далее следует: *произведению двух операторов FG соответствует произведение матриц $(F) \cdot (G)$, образованное по обычному правилу матричного умножения, которое гласит:*

$$(FG)_{nm} = \sum_k F_{nk} G_{km}. \quad (153')$$

Следует заметить, что при этом предполагается только эрмитовость F и G , но не (FG) ; коммутативность F и G также не обязательна.

Если произвольной функции f соответствует разложение $\sum_k a_k u_k$, то функции Ff соответствует разложение

$\sum_k (Fu_k) a_k = \sum_{l,k} u_l F_{lk} a_k$. Таким образом, коэффициентам $(a_1, a_2, \dots, a_m, \dots)$ сопоставляются с помощью F другие коэффициенты $(b_1, b_2, \dots, b_n, \dots)$

$$b_n = \sum_m F_{nm} a_m. \quad (154)$$

Матрица, эквивалентная оператору F , производит, следовательно, *линейное отображение* в векторном пространстве бесконечно большого числа измерений коэф-

¹⁾ Строго говоря, это ещё нужно доказать, так как ряд $\sum a_k u_k$ не обязательно сходится, а может быть согласован с f только в смысле сходимости в среднем. Если обозначить частичную сумму $\sum_1^N a_k u_k$ из N членов через f_N , то

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int |f - f_N|^2 dq = 0.$$

Потребуем теперь, чтобы оператор F обладал следующим свойством: если для последовательности $Ff_N = g_N$ существует такое g , что

фициентов разложения (а) нашей системы функций. Эрмитовость F находит своё выражение в соотношении

$$\sum_n a_n^* b_n = \sum_n a_n b_n^*, \quad (155)$$

которое означает вещественность этого «скалярного произведения».

Общее выражение для матричных элементов (151) содержит, в частности, формулу

$$F_{nn} = \int u_n^* (F u_n) dq \quad (156)$$

для диагональных элементов. В предыдущем параграфе мы видели, что это выражение в простейших случаях имеет смысл среднего значения или математического ожидания. При этом мы исходили из выражения $|\varphi(p)|^2 dp$, которое даёт вероятность того, что импульс рассматриваемой системы лежит между p и $p+dp$. Отсюда следует, что среднее значение любой целой рациональной функции импульса $F(p)$ равно

$$\int F(p) |\varphi(p)|^2 dp = \int \psi^*(q) \left[F \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi(q) \right] dq.$$

Аналогично для любой функции q

$$\bar{F}(q) = \int \psi^* F(q) \psi dq,$$

что опять-таки совпадает с (156), если под F здесь понимать просто умножение на функцию от q . Займёмся, наконец, функцией F , которая зависит от p линейно,

$\lim_{N \rightarrow \infty} \int |g - g_N|^2 dq = 0$, то $F/g = g$. При этом не делается различия

между функциями g и g' , для которых $\int |g - g'|^2 dq = 0$. В нашем случае существование такого g обеспечено, если сходится ряд

$\sum_1^\infty |b_k|^2$ (где $b_k = \sum_l F_{kl} a_l$), что всегда имеет место, если сумма

$$\sum_l |F_{kl}|^2 = \sum_l |F_{lk}|^2$$

сходится для всех k .

а от q произвольным образом:

$$F = \frac{1}{2} \sum_k [A_k(q) p_k + p_k A_k(q)]$$

(симметризация необходима для получения эрмитова F). Воспользуемся декартовыми координатами и введём плотность тока i_k , соответствующую k -й степени свободы; тогда снова

$$\begin{aligned} \bar{F} &= \sum_k \int A_k(q) \left[m i_k + \frac{e}{c} \Phi_k \right] dV = \\ &= \sum_k \int \psi^* \frac{1}{2} \left[A_k \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial q_k} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} (A_k \psi) \right] dq. \end{aligned}$$

Поскольку, далее, математическое ожидание суммы двух величин равно сумме математических ожиданий этих величин, а соотношение (156) линейно по отношению к F , (156) можно считать справедливым по отношению к величинам, равным сумме величин рассмотренных типов. В частности, это справедливо для гамильтоновой функции системы H .

О подобных операторах F , которые таким образом приведены в соответствие с физическими величинами, т. е. свойствами системы, которые могут быть описаны заданием численных величин, причём эти численные величины в принципе можно однозначно определить с помощью соответствующей экспериментальной установки (измерить), — можно сказать: *диагональный элемент F_{nn} равен математическому ожиданию соответствующей величины F в том состоянии системы, которое характеризуется собственной функцией ψ_n* . Только дальнейшее построение теории вместе с опытными фактами может решить, какие величины в системе имеют физическое значение, и как они могут быть измерены¹⁾. Заметим ещё, что даже для этих специальных опера-

¹⁾ Эта точка зрения противоположна другой, согласно которой каждому эрмитову оператору соответствует некоторая «наблюдаемая» величина системы, причём всегда имеет прямой физический смысл говорить о вероятности того, что эта величина F имеет в соответствующем состоянии определённое значение (см. § 9).

торов F прямой физический смысл имеют только диагональные элементы матрицы F . Недиагональные элементы связаны с возможными опытными данными только косвенно, а именно следующим образом: среднее значение любой целой рациональной функции $f(F)$ оператора F и, в частности, среднее значение всех его степеней задается диагональным элементом $[f(F)]_{nn}$ оператора $f(F)$. Если, с другой стороны, предположить закон матричного умножения при формальном образовании $[f(F)]_{nn}$, то можно показать, что задание $[f(F)]_{nn}$, вообще говоря, определяет также и недиагональные элементы F_{nm} матрицы F однозначно.

При введении общей связи (151) между операторами и матрицами о функциях $u_1, u_2, \dots, u_n, \dots$ предполагалось только, что они образуют полную ортогональную систему. Полезно выяснить, как изменяются матрицы при переходе к другой системе функций $v_1, v_2, \dots, v_n, \dots$, также обладающей свойствами полноты и ортогональности. Каждой функции v_m соответствует разложение

$$v_m \sim \sum_{(n)} u_n S_{nm}, \quad \text{где} \quad S_{nm} = \int u_n^* [S u_m] dq = \int u_n^* v_m dq. \quad (157)$$

Матрица S_{nm} определяет линейный оператор S , который сопоставляет каждой функции $f = a_1 u_1 + a_2 u_2 + \dots$ новую функцию $g = a_1 v_1 + a_2 v_2 + \dots$ с теми же коэффициентами разложения в новой системе. S имеет, следовательно, свойство

$$\int f u_n^* dq = \int [S f] v_n^* dq$$

при всех f . Этот оператор S принадлежит, однако, к существенно иному типу, чем рассмотренные эрмитовы операторы F , которые могут соответствовать физическим величинам. Мы будем называть S оператором преобразования. Поскольку в силу условия полноты справедливо соотношение

$$\int v_n^* v_m dq = \sum_k S_{kn}^* S_{km},$$

ортогональность и нормировка системы v_n может быть выражена уравнением

$$\sum_k S_{kn}^* S_{km} \sim \begin{cases} 0 & \text{при } n \neq m, \\ 1 & \text{при } n = m. \end{cases} \quad (158)$$

Далее, из $f \sim \sum a_k u_k$, $g \sim \sum a_k v_k$ следует: $\sum_k |a_k|^2 =$
 $= \int |f|^2 dq = \int |g|^2 dq$, что равносильно также требованию

$$\int |Sf|^2 dq = \int |f|^2 dq \quad (159)$$

для всех f , а также

$$\int (Sf)^* (Sg) dq = \int f^* g dq \quad (159')$$

для любых f и g .

Оператор S не является эрмитовым оператором. Согласно (159), он имеет, однако, свойство «сохранять длину», если пользоваться $\int |f|^2 dq$ в качестве меры «длины» функции, или, более обще, $\int |f - g|^2 dq$, как мерой «расстояния» между двумя функциями. Если, далее, $v_n = (Su_n)$ образуют полную систему функций, то многообразие функций Sf должно совпадать с многообразием f . Это означает, что для всех f должен существовать оператор S^{-1} , обратный оператору S . Полнота системы v равносильна тому, что u_n также могут быть разложены по функциям v_n согласно соотношениям:

$$u_m \sim \sum_{(n)} v_n S_{nm}^{-1}; \quad S_{nm}^{-1} = \int v_n^* [S^{-1} v_m] dq = \int v_n^* u_m dq; \quad (157')$$

сравнивая с (157), получаем

$$S_{nm}^{-1} = S_{mn}^*. \quad (160)$$

Итак, (S) не эрмитова матрица; эрмитовски сопряжённая ей матрица (\tilde{S}) , полученная из (S) с помощью перехода к комплексно сопряжённым величинам и перестановки строк и столбцов, совпадает с матрицей, обратной (S) :

$$S^{-1} = \tilde{S}. \quad (161)$$

Действительно, (158) в силу $S_{kn}^* = \tilde{S}_{nk}$ равносильно

$$\tilde{S}S = I, \quad (158')$$

если I означает единичную матрицу. Применяя к (157') условие полноты, легко видеть, что полнота системы функций v_n означает также

$$\sum_k (S_{kn}^*) \cdot S_{km}^{-1} = \begin{cases} 0 & \text{при } n \neq m, \\ 1 & \text{при } n = m, \end{cases} \quad (162)$$

или в силу (160)

$$\sum_k S_{nk} S_{mk}^* = \begin{cases} 0 & \text{при } n \neq m, \\ 1 & \text{при } n = m, \end{cases} \quad (163)$$

что в матричной записи означает

$$S\tilde{S} = I. \quad (163')$$

Важно подчеркнуть, что (163') не является простым следствием (158'), а вытекает из (158') тогда и только тогда, если существует оператор S^{-1} , обратный оператору S для всех f . Оператор S называется унитарным, если он, кроме свойства сохранять длину [уравнение (159)], допускает построение обратного оператора для всех без исключения функций; соответственно матрица (S) называется унитарной, если она удовлетворяет обоим условиям (158') (163'). Операторы преобразования принадлежат к унитарным операторам. При последовательном применении (умножении) двух унитарных операторов (матриц) получается всегда снова унитарный оператор (унитарная матрица).

Может быть, полезно подчеркнуть аналогию с подобными соотношениями между величинами, могущими принимать лишь конечное число (N) значений. В этом случае полная система функций состоит из N ортогональных (комплексных) векторов $u_k(1), u_k(2), \dots, u_k(N)$, где вместо q подставлены значения q_1, \dots, q_N соответствующей величины. Ортогональная система векторов в пространстве конечного числа измерений будет тогда и только тогда полной, когда число p векторов системы совпадает с числом измерений пространства N . В этом случае матрица S удовлетворяет соотношению

$$\tilde{S}S = I.$$

Если же \tilde{S} не квадратная матрица, а прямоугольная S_{nm} ($n = 1, 2, \dots, N$; $m = 1, 2, \dots, p$), число строк которой p меньше числа столбцов N , то, очевидно, $S\tilde{S} \neq I$, так что $S\tilde{S}$ не будет единичной матрицей. Ясно, что линейное отображение S , которое

переводит вектор $f(r) = \sum_{k=1}^N a_k u_k(r)$, $r = 1, 2, \dots, N$ в $[Sf(r)] =$
 $= \sum_{k=1}^p a_k v_k(r)$ будет тогда и только тогда иметь обратное отобра-

жение S^{-1} для всех $f(r)$, если $p = N$. Наряду с $\tilde{S}S = I$ должно быть справедливо $S\tilde{S} = I$; это требование равносильно здесь тому, что S квадратная матрица. Для матриц S с бесконечным числом строк и столбцов свойство полноты нельзя, однако, установить простым подсчётом; в этом случае существование обратной матрицы выступает как новое требование наряду с соотношением $\tilde{S}S = I$.

Теперь мы можем ответить на вопрос о том, как изменяется матрица, соответствующая согласно (151) оператору F , при переходе от системы функций u_k в системе функций v_k . Согласно (157), имеем

$$\left. \begin{aligned} F'_{nm} &= \int v_n^* (F v_m) dq, \\ F'_{nm} &= \sum_k \sum_l \int S_{kn}^* u_k S_{lm} F(u_l) dq, \end{aligned} \right\} \quad (151')$$

и, следовательно, благодаря тому, что

$$\left. \begin{aligned} F_{kl} &= \int u_k^* F(u_l) dq, \\ F'_{nm} &= \sum_{k,l} S_{kn}^* F_{kl} S_{lm}, \end{aligned} \right\} \quad (164)$$

получаем¹⁾

или в матричной записи

$$(F') = \tilde{S}FS = S^{-1}F'S, \quad (164)$$

и обратное соотношение

$$(F) = SF'S^{-1} = SF'\tilde{S}. \quad (164')$$

Легко установить, что если F эрмитова матрица, то и F' также будет эрмитовой матрицей. На языке операторов

¹⁾ Здесь мы не рассматриваем вопроса о сходимости рядов в (164), который в общем довольно сложен.

соотношение (164), очевидно, обозначает, что если F переводит функцию f в функцию g , то F' переводит функцию Sf в функцию Sg . Однако при такой интерпретации «координатная система» u_1, \dots, u_n остаётся неизменной, а изменяется оператор, тогда как мы исходили из представления о постоянном операторе F и изменяющейся координатной системе.

Фундаментальные перестановочные соотношения (103) для операторов p_k и q_l переходят, очевидно, в соответствующие матричные уравнения, если заменить функции f , на которые действуют эти операторы, последовательностями $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$ их коэффициентов разложения по произвольной полной системе ортогональных функций $v_1, v_2, \dots, v_n, \dots$. Действительно, эти перестановочные соотношения остаются, очевидно, инвариантными по отношению к любым унитарным преобразованиям вида (164).

Теперь мы можем охарактеризовать очень простым образом специальные собственные функции u_1, u_2, \dots , которые удовлетворяют уравнению

$$Hu = Eu$$

и соответствуют стационарным состояниям системы с гамильтоновым оператором H . Это такие ортогональные нормированные функции u , для которых матрица гамильтоновой функции (энергия), определённая согласно (151),

$$(H_{nm}) = \int u_n^* (Hu_m) dq$$

имеет диагональную форму

$$H_{nm} = \begin{cases} 0 & \text{при } n \neq m, \\ E_n & \text{при } n = m. \end{cases} \quad (165)$$

Этот результат позволяет сформулировать проблему определения собственных значений энергии E_n и матриц $p_{nm}^{(k)}, q_{nm}^{(k)}$ даже без знания волнового уравнения. Сначала записывают перестановочные соотношения с помощью правила умножения матриц. Далее, выражают матрицу энергии с помощью того же правила через матричные элементы $p^{(k)}$ и $q^{(k)}$ и требуют, чтобы она была диагональной матрицей. Этот метод приводит к бесконечному числу уравнений для определения матричных элементов p

и q и собственных значений энергии. Это было основным предположением «матричной» механики Гейзенберга, которая исторически предшествовала формулировке волнового уравнения¹⁾. Практическое решение этих уравнений удаётся получить только в немногих случаях, например, для гармонического осциллятора. В случае водородного атома также можно ещё получить значение энергии, однако, матричные элементы p и q уже определить не удаётся. Это связано с тем, что здесь наряду с дискретным присутствует также и непрерывный спектр, наличие которого сильно осложняет матричное исчисление. Мы скоро вернёмся к этому вопросу. Напротив, матричное исчисление часто оказывается удобным, если речь идёт о подпространстве конечного числа измерений. Такое подпространство получается, например, для вырожденных систем, когда одному определённом значению энергии соответствует несколько состояний, число которых мы обозначим g . В этом случае можно ещё произвести внутри соответствующего g -мерного подпространства состояний любую унитарную трансформацию матриц (164), не нарушая уравнений, которым они удовлетворяют, так как в этом подпространстве матрица энергии равна единичной матрице, умноженной на постоянное число E , а единичная матрица при рассматриваемых трансформациях сохраняется. В волновой механике этому соответствует возможность преобразовывать принадлежащие E собственные функции u_1, u_2, \dots, u_g по формулам:

$$u'_m = \sum_{n=1}^g u_n S_{nm} \quad (m = 1, 2, \dots, g).$$

Если, в частности, здесь S унитарная g -строчная (квадратная) матрица, то ортогональность системы функций при этом сохраняется. В матричном рассмотрении проблема о собственных значениях может быть сформулирована также несколько иначе. Можно ввести для p_i, q_k какие-либо произвольные матрицы, удовлетворяющие перестановочным соотношениям (в волновой механике им соответствует произвольная ортогональная система

¹⁾ W. Heisenberg, Zs. f. Phys., 33, 879. 1925.

функций). Применяя матричные правила умножения, получают определённую эрмитову матрицу H_{nm} для энергии. Задача состоит тогда в том, чтобы привести её унитарно к диагональному виду, т. е. решить бесконечное число линейных уравнений

$$S^{-1}HS = E$$

или

$$HS = SE; \quad \sum_m H_{nm} S_m = S_n E \quad (166)$$

для всех возможных E . Условие унитарности S требует нормировки коэффициентов:

$$\sum_n |S_n|^2 = 1. \quad (166')$$

Для каждого возможного значения E_p энергии E получается система коэффициентов $S_{n,p}$. Легко видеть, на основании (158'), что эти коэффициенты автоматически образуют унитарную матрицу, если H эрмитово. Хотя практически эта система уравнений в общем случае также неразрешима, мы увидим, однако, что она может быть использована в теории возмущений¹⁾.

Теперь же мы обсудим обобщение этих результатов для непрерывного спектра, не касаясь, однако, вопросов сходимости. Если собственные функции u нормированы относительно параметра λ или *параметров* λ_1, \dots , то можно образовать, по аналогии с (151),

$$Fu_\lambda \sim \int u_\lambda F_{\lambda'\lambda} d\lambda'; \quad F_{\lambda'\lambda} = \int u_{\lambda'}^* (Fu_\lambda) dq. \quad (151')$$

В $F_{\lambda'\lambda}$ и даже в само u могут, однако, входить δ -символы, определённые посредством (145) и (147). Например, для λ , имеющего численные значения q , можно выбрать u в виде δ -функции: $u_{q'}(q) = \delta(q - q')$, где $\delta(q - q')$ обозначает сокращённо $\delta(q_1 - q'_1) \delta(q_2 - q'_2) \dots \delta(q_f - q'_f)$. Тогда получаем

$$\int u_{q'}^*(q) u_{q''}(q) dq = \int \delta(q - q') \delta(q - q'') dq = \delta(q' - q'').$$

¹⁾ Ср. М. Born, P. Jordan и W. Heisenberg, *Zs. f. Phys.*, 35, 557, 1926.

Матрица q будет иметь вид

$$q_k(q', q'') = \int \delta(q - q') q_k \delta(q - q'') dq$$

или

$$q_k(q', q'') = q'_k \delta(q' - q''); \quad (167)$$

аналогично

$$p_k(q', q'') = \int \delta(q - q') \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} \delta(q - q'') dq$$

или

$$p_k(q', q'') = -\frac{\hbar}{i} \delta'_k(q' - q''), \quad (167')$$

где последнее выражение введено как сокращение для произведения

$$\delta(q'_1 - q''_1) \dots \delta(q'_{k-1} - q''_{k-1}) \delta(q'_k - q''_k) \delta(q'_{k+1} - q''_{k+1}) \dots \delta(q'_f - q''_f).$$

Таким образом устанавливается формальное равенство

$$\begin{aligned} \int [p_k(q', q''') q_k(q''', q'') - q_k(q', q''') p_k(q''', q'')] dq''' = \\ = \frac{\hbar}{i} \delta(q' - q''). \end{aligned}$$

В действительности все эти символы только тогда получают смысл, если их умножить на произвольные функции f^* и g от аргументов q' и q'' и проинтегрировать, например,

$$\int_{q'_1}^{q'_2} \int_{q''_1}^{q''_2} f^*(q') q_k(q', q'') g(q'') dq' dq'' = \int_{q_1}^{q_2} f^*(q) q_k g(q) dq,$$

где (q_1, q_2) обозначает общую часть интервалов (q'_1, q'_2) , (q''_1, q''_2) .

Точно так же существует преобразование от полной системы u_λ к другой полной системе v_μ , формально аналогичное (157):

$$\left. \begin{aligned} v(\mu; q) &= \int u(\lambda; q) S(\lambda, \mu) d\lambda, \\ S(\lambda, \mu) &= \int u^*(\lambda; q) v(\mu; q) dq. \end{aligned} \right\} \quad (157')$$

где

Матрица $S(\lambda, \mu)$ унитарна и удовлетворяет соотношениям

$$\int S^*(\lambda, \mu) S(\lambda, \mu') d\lambda = \delta(\mu - \mu'), \quad (158'')$$

$$\int S(\lambda, \mu) S^*(\lambda', \mu) d\mu = \delta(\lambda - \lambda'), \quad (163'')$$

аналогичным (158) и (163). Формула преобразования операторов

$$F(\mu; \mu') = \int S^*(\lambda, \mu) F(\lambda, \lambda') S(\lambda', \mu') d\lambda d\lambda' \quad (164')$$

аналогична (164).

Особенно интересен смешанный случай, когда один из индексов пробегает дискретные значения, а другой — непрерывные. Тогда мы имеем

$$v_n(q) = \int u(\lambda; q) S_n(\lambda) d\lambda, \quad u(\lambda; q) = \sum_n v_n^*(q) S_n^*(\lambda), \quad (168)$$

$$S_n(\lambda) = \int u^*(\lambda; q) v_n(q) dq, \quad (169)$$

$$\int S_n^*(\lambda) S_m(\lambda) d\lambda = \delta_{n,m}, \quad \sum_n S_n(\lambda) S_n^*(\lambda') = \delta(\lambda - \lambda') \quad (170)$$

$$(\delta_{n,m} = 0 \text{ при } n \neq m, \quad \delta_{n,m} = 1 \text{ при } n = m),$$

$$\left. \begin{aligned} F_{n,m} &= \int S_n^*(\lambda) F(\lambda, \lambda') S_m(\lambda') d\lambda d\lambda', \\ F(\lambda, \lambda') &= \sum_{n,m} S_n(\lambda) F_{nm} S_m^*(\lambda'). \end{aligned} \right\} \quad (171)$$

Эти формулы особенно просты, если, в частности, ввести для $u(\lambda, q)$ систему $u_{q'}(q) = \delta(q - q')$. Тогда, очевидно,

$$S_n(q') = \int \delta(q - q') v_n(q) dq = v_n(q'), \quad (169')$$

$$\int v_n^*(q) v_m(q) dq = \delta_{n,m}, \quad \sum_n v_n(q) v_n^*(q') = \delta(q - q'), \quad (170')$$

$$\left. \begin{aligned} F_{n,m} &= \int v_n^*(q) F(q, q') v_m(q') dq dq', \\ F(q, q') &= \sum_{n,m} v_n(q) F_{nm} v_m^*(q'). \end{aligned} \right\} \quad (171')$$

Мы получили важнейший результат, что собственные функции $u_n(q)$ сами представляют собой частный случай функций преобразования, которые осуществляют трансформацию от системы $\delta(q-q')$ к самой системе $u_n(q)$. Если, в частности, выбрать в качестве $u_n(q)$ такие $u_n(q)$, которые приводят определённый оператор Гамильтона H к диагональному виду $H_{nm} = E_n \delta_{nm}$, то можно сказать, что в силу (169'), $u_n(q)$ являются функциями преобразования от оператора q к оператору H , ибо q имеет диагональную форму в системе $\delta(q-q')$, а H в системе $u_n(q)$. Что касается второго соотношения (170'), то оно представляет собой только другое — символическое выражение условия полноты. С помощью интегрирования для двух произвольных функций f, g можно перейти снова к «действительному» (не символическому) уравнению

$$\sum_n \int f^*(q) v_n(q) dq \cdot \int g(q') v_n^*(q') dq' = \int f^* g dq,$$

которое точно совпадает с условием полноты (134'). В частности, это условие справедливо, если f и g равны 1 внутри определённых (не обязательно совпадающих) областей и равны нулю вне этих областей.

§ 8. Общая форма закона движения.

Наряду с перестановочными соотношениями мы ввели в качестве второго основного положения матричной механики требование, чтобы матрица энергии имела диагональную форму

$$H_{n,m} = E_n \delta_{n,m}. \quad (165)$$

Гейзенберг прибавил ещё одно дальнейшее определение, относящееся к изменению матричных элементов во времени. Он установил, что матричные элементы любой, не содержащей времени явно величины зависят от времени по формуле:

$$F_{n,m}(t) = F_{n,m}(0) e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t} \quad (172)$$

или, при введении унитарной диагональной матрицы:

$$U_{n,m}(t) = \delta_{n,m} e^{\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad (173)$$

$$F(t) = U(t) F(0) U^{-1}(t) = U(t) F(0) \tilde{U}(t). \quad (174)$$

В случае, если оператор Гамильтона не содержит времени явно, применение (174) к $F = H$ даёт сохранение диагональной формы энергии (165) для любого t . Соотношение (172) можно также выразить с помощью дифференциального уравнения

$$\frac{\hbar}{i} F_{n,m} = F_{n,m} (E_n - E_m), \quad (175)$$

или

$$\frac{\hbar}{i} \dot{F} = HF - FH, \quad (176)$$

если под H понимать специально диагональную матрицу (165). В силу (165), из (176) следует обратное выражение (172)¹⁾.

Соотношение (172) означает не что иное, как введение в формулу (151) для вычисления матричных элементов вместо функций u_n

$$\psi_n(t) = u_n e^{\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad (177)$$

которые удовлетворяют волновому уравнению

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{\psi}_n = H \psi_n.$$

Действительно, тогда

$$\begin{aligned} F_{k,n} &= \int \psi_k^* (F \psi_n) dq = e^{\frac{i}{\hbar} (E_k - E_n) t} \int u_k^* (F u_n) dq = \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} (E_k - E_n) t} F_{k,n}(0). \end{aligned}$$

Мы можем теперь обобщить эти соотношения, вводя в качестве базиса для матриц произвольную ортогональ-

¹⁾ Следует подчеркнуть, вопреки прежним представлениям матричной механики, что (176) отнюдь не является следствием (165); ему должно быть предпослано (172), в качестве особого постулата.

ную систему φ_n , которая не обязательно имеет специальную форму (177); при этом, однако, нужно наложить существенное требование, чтобы все эти $\varphi_n(t)$ удовлетворяли волновому уравнению

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{\varphi}_n = H \varphi_n. \quad (178)$$

Для всех решений (178) $\int \psi^* \psi dV$ постоянно во времени. Подставляя сюда решение $c_n \varphi_n + c_m \varphi_m$ для любых c_n, c_m , получаем

$$\frac{d}{dt} \int \varphi_n^* \varphi_m dV = 0, \quad (179)$$

т. е. ортогональность и нормировка функций сохраняются во времени. Далее, дифференцируя

$$F_{n,m} = \int \varphi_n^* (F \varphi_m) dq, \quad (180)$$

получаем соотношение

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \dot{F}_{n,m} &= \int [(H \varphi_n)^* (F \varphi_m) - \varphi_n^* (F H \varphi_m)] dq = \\ &= \int [\varphi_n^* (H F \varphi_m) - \varphi_n^* (F H \varphi_m)] dq = \\ &= (H F - F H)_{n,m}, \end{aligned}$$

справедливое для любого эрмитова оператора F , не содержащего времени явно. Таким образом мы получили уравнение (176)

$$\frac{\hbar}{i} \dot{F} = H F - F H, \quad (176)$$

на этот раз уже без специального предположения относительно матриц. В силу этого правила, каждая система (совместных друг с другом и не содержащих времени явно) перестановочных соотношений сохраняется с течением времени, если она выполняется для $t=0$ ¹⁾,

¹⁾ В старой литературе по квантовой механике вместо (176) часто встречается операторное уравнение

$$Ht - tH = \frac{\hbar}{i} I,$$

Введём теперь предположение (до сих пор не обязательное), что H тоже не содержит времени явно. Тогда, в силу (176), H не зависит от времени. Следовательно, существует не зависящее от времени унитарное преобразование S , которое приводит H к диагональной форме

$$S^{-1}HS = E.$$

Это то же самое преобразование S , которое приводит φ_n согласно

$$\psi_m = \sum_n \varphi_n S_{n,m}$$

к специальной форме φ_n , данной в (177). Тогда из (173) и (174) мы получаем с помощью S

$$F(t) = U(t) F(0) U^{-1}(t), \quad (174')$$

где

$$U = S e^{\frac{i}{\hbar} Et} S^{-1}.$$

Под $e^{\frac{i}{\hbar} Et}$ здесь понимается диагональная матрица $\delta_{nm} e^{\frac{i}{\hbar} E_n t}$. U , очевидно, унитарно, так как оно получается в результате перемножения унитарных матриц. Благодаря

$$SES^{-1} = H$$

можно также написать

$$U(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar} Ht} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} Ht \right)^n = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{it}{N\hbar} H \right)^N. \quad (175')$$

которое формально получается из (176) при подстановке t вместо F . В общем случае невозможно построить эрмитов оператор (например, как функцию p и q), удовлетворяющий этому уравнению. Это получается уже потому, что из записанного перестановочного соотношения следует, что H имеет непрерывный спектр собственных значений от $-\infty$ до $+\infty$ (ср. Дирак, Квантовая механика), тогда как, с другой стороны, возможны и дискретные собственные значения H . Итак, мы заключаем, что введение оператора t запрещается основами теории, и время в квантовой механике необходимо рассматривать как обыкновенное число («с»-число). Ср. в связи с этим также E. Schrödinger, *Berl. Ber.*, 1931, стр. 238.

Это следует и прямо из (176), без перехода к диагональному представлению E . Мы докажем далее, что U унитарно в том случае, когда существуют все степени H для любого f . Прежде всего

$$U(t_1)U(t_2) = U(t_1 + t_2) \quad (176)$$

и, в частности,

$$U(t)U(-t) = U(0) = I,$$

так что

$$U^{-1}(t) = U(-t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}.$$

Следовательно, если $U(-t)$ существует для того же множества функций, что и $U(t)$, то условие существования обратного оператора выполнено. Далее, последовательным применением

$$\int g^* (H^n f) dq = \int (H^n g)^* f dq$$

ко всем степеням $(H)^n$ оператора H можно показать, что

$$\int g^* (Uf) dq = \int (U^{-1}g)^* f dq$$

и, в частности, для $g = Uf$

$$\int (Uf)^* (Uf) dq = \int f^* f dq.$$

Таким образом, доказано, что U сохраняет нормировку функций. U удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{i}{\hbar} \dot{U} = HU, \quad \frac{i}{\hbar} U^{-1} = -U^{-1}H, \quad (177)$$

из которого, в силу (174), легко получается (176). Что касается значения Uf , то U в применении к коэффициентам разложения f по постоянной системе $\varphi_1(0), \varphi_2(0), \dots$

$$a_1, a_2, \dots$$

должно переводить их в $a_n(t) = \sum_m \dot{U}_{n,m}(t) a_m(0)$. В частности, можно выбрать систему $\varphi_k(0)$ в виде $\delta(q - q')$. Тогда U непосредственно переводит функцию $f(0)$ в функцию $f(t)$ так, что последняя удовлетворяет волновому

уравнению и произвольным начальным условиям $f(0)$ при $t=0$:

$$f(q, t) = U(t) f(q, 0) = \int U(q, q'; t) f(q', 0) dq', \quad (178)$$

$$\begin{aligned} U(q, q'; 0) &= \delta(q - q'), \\ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} U(q, q'; t) &= H U(q, q'; t). \end{aligned} \quad (179)$$

Свойство U сохранять нормировку функций следует непосредственно из уравнения непрерывности и равносильно

$$\int U(q, q'; t) U^*(q, q''; t) dq = \delta(q' - q''); \quad (180)$$

далее должно иметь место

$$U^*(q', q, t) = U(q, q'; -t) = U^{-1}(q, q'; t); \quad (181)$$

и вообще

$$\int U(q, q'; t_1) U(q', q''; t_2) dq' = U(q, q''; t_1 + t_2). \quad (182)$$

В этой функции U легко узнать обобщение функции, введённой в уравнение (60) § 2:

$$U(q, q'; t) = U(q - q'; t) = e^{-\frac{i\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{1}{t}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(q-q')^2}{t}}$$

для свободной материальной точки, двигающейся в одном измерении. Образовав произведения функций из (60), легко получить согласно (61) U -функцию для материальной точки, двигающейся в трёх измерениях, и совершенно аналогично — функцию для любого числа материальных точек. Для материальных точек, находящихся в поле сил, U зависит вообще не только от разностей координат $(q - q')$ и в общем случае может быть построено только окольным путём, с помощью перехода к собственным решениям. Действительно,

$$U(q, q'; t) = \sum_n u_n^*(q') e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} u_n(q), \quad (183)$$

так как тогда, согласно (170'), условия (179) выполняются. Собственные функции u_n характеризуются равенством

$$U u_n = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} u_n^* \quad (184)$$

Однако, существование рассмотренного здесь унитарного U должно быть постулировано как физически необходимое. Действительно, оно означает только, что волновое уравнение разрешимо при любой начальной функции $f(q, 0)$, а также, что ко времени t может осуществиться любая функция $f(q, t)$. Последнее равносильно тому, что любую функцию $f(q, t)$ можно с помощью волнового уравнения проследить от момента времени t в прошлое.

Это положение связано с проблемой разложения эрмитова оператора по его собственным значениям, которая была сформулирована в уравнении (III') на стр. 85. Прежде всего нужно более подробно исследовать область определения оператора H , применяемого к многообразию функций f , для которых существует $\int |f|^2 dq$. Очевидно, нельзя требовать, чтобы оператор H был определен повсюду, так как это не осуществляется уже для оператора умножения на q ($\int q^2 |f|^2 dq$ существует не для всех f). Можно, однако, потребовать, чтобы область определения H была повсюду плотной; это означает, что каждому f , для которого имеет смысл Hf , можно сопоставить такое g , чтобы существовало Hg , и $\int |f - g|^2 dq$ было сколь угодно мало. Кроме того, следует потребовать линейную замкнутость H : из

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int |f - f_N|^2 dq = 0 \quad \text{и} \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \int |F - H f_N|^2 dq = 0$$

должно следовать $Hf = F$.

Нейман¹⁾ в своих исследованиях об эрмитовских операторах получил замечательный результат, что не все операторы допускают разложение по собственным значениям (III). Оказалось, что для того, чтобы такое представление оператора H было возможным, необходимо потребовать, чтобы H можно было свести к унитарному оператору U . Это требование необходимо и достаточно для существования спектра собственных значений H . Унитарный оператор U всегда допускает разложение по соб-

¹⁾ J. v. Neumann, *Math. Ann.*, 102, 49; 1929. *Journ. f. reine u. angew. Math.*, 161, 208, 1929; Далее, M. H. Stone, *Proc. Nat. Ac.*, 115, 198, 423; 1929.

ственным значениям в форме

$$(Uf) = \int_0^{2\pi} e^{iEt} d(P_E f), \quad (185)$$

аналогичной (III)¹⁾. Здесь P_E и $P_E - P_{E'}$ — снова проецирующие операторы с свойствами (I) и (II). Собственные значения унитарного оператора всегда имеют модуль 1. Для унитарных операторов со свойством (176) можно записать разложение по собственным значениям сразу для любого t в форме

$$U(t)f = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} d(P_E f). \quad (185')$$

Для того чтобы свести оператор H к унитарному оператору U , Нейман рассматривает оператор специальной формы

$$U = \frac{1+iH}{1-iH}$$

и приходит к выводу, что такое U повсюду определено. Специальный выбор U не играет здесь роли; достаточно, например, рассмотреть оператор

$$U(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{it}{\hbar N} H \right)^N,$$

который ближе соответствует физической интерпретации²⁾.

Покажем теперь, что, как уже упоминалось, существует исключительный оператор H , который не может быть сведён подобным образом к унитарному оператору. Мы обсудим его здесь вкратце, так как он отнюдь не является чем-либо особо «патологическим», а напротив, может быть простым образом интерпретирован физически. Рассмотрим материальную точку, движущуюся вдоль оси x (одномерный случай). Пусть при $x=0$ она отражается от вполне упругой стены, так что движение возможно только в полупространстве $x > 0$. Это означает, что мы рассматриваем, как допустимые, только такие функции f , которые определены в интервале $0 < x < \infty$, имеют интегрируемый квадрат модуля (существует $\int_{-\infty}^{+\infty} |f|^2 dx$) и, кроме того, исчезают при $x=0$, т. е.

$f(0)=0$. В этом функциональном пространстве $vp_x = v \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

¹⁾ Кроме цитированных в ¹⁾ работ см. A. Winter, *Math. Zs.*, 30, 228, 1929 и книгу этого автора: *Spektraltheorie der unendlichen Matrizen*, Leipzig, 1929.

²⁾ Ср. также H. Weyl, *Zs. f. Phys.*, 46, 1, 1927 и его книгу, *Gruppentheorie u. Quantenmechanik*, 2-е изд., стр 36, Leipzig, 1931.

представляет собой допустимый эрмитов оператор (v — постоянная с размерностью скорости, так что $v p_x$ имеет размерность энергии), так как, во-первых, область определения его повсюду плотна и, во-вторых, в силу $f(0)=0$, он удовлетворяет условию самосопряженности. Действительно,

$$\int_0^{\infty} g^* (p_x f) dx - \int_0^{\infty} (p_x g)^* f dx = f g^* \Big|_0^{\infty} = 0.$$

Однако для этого оператора в рассматриваемом пространстве не существует разложения по собственным значениям! Это становится очевидным, если рассмотреть решение уравнения

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = v p_x \psi = \frac{\hbar}{i} v \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

или

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -v \frac{\partial \psi}{\partial x},$$

которое имеет форму

$$\psi(x, t) = f(x - vt). \quad (186)$$

Это решение справедливо в интервале времени $0 < t < \tau$ только в том случае, если при любом t этого интервала $f=0$ в точке $x=0$. Следовательно, $f(\xi)$ должно быть определено для области $-v\tau \leq \xi < \infty$ и, кроме того, должно выполняться условие:

$$f(\xi) = 0 \quad \text{при} \quad -v\tau \leq \xi < 0, \quad (186')$$

т. е.

$$\left. \begin{aligned} \psi(x, \tau) &= 0 & \text{при} & \quad 0 \leq x \leq v\tau, \\ \psi(x, \tau) &= f(x - v\tau) & \text{при} & \quad v\tau \leq x < \infty. \end{aligned} \right\} \quad (186'')$$

Действительно, в силу (186),

$$\int_0^{\infty} |\psi(x, \tau)|^2 dx = \int_0^{\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx$$

справедливо только, если выполняется (186'). Отображение U , которое переводит $f(x)$ в функцию $\psi(x, \tau)$, определённую равенствами (186''), не унитарно, хотя оно и сохраняет длину (нормировку) функции. Многообразие $\psi(x, \tau)$ меньше многообразия $f(x)$ или, что то же самое, обратный к U оператор U^{-1} существует не для всех $f(x)$, а только для таких $f(x)$, которые исчезают в интервале $0 \leq x \leq v\tau$. Для остальных f решение волнового уравнения в интервале $-\tau < t < 0$ не существует. Для того чтобы в рассматриваемом пространстве одновременно имели смысл N первых степеней p_x , нужно тем больше видоизменить первоначальную функцию f , чем больше N . Подобный оператор, очевидно, не допустим в качестве функции Гамильтона. Опера-

тор $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, напротив, ведёт себя в рассматриваемом пространстве нормально и имеет собственные функции $\sin kx$ точно так же, как и оператор $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ в обычном пространстве. Совершенно аналогично оператору $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ в полупространстве ведёт себя оператор радиальной слагающей импульса $p_r f = \frac{\hbar}{ir} \frac{\partial}{\partial r}(rf)$ в обычном пространстве. Это эрмитов оператор, но его матрица не может быть приведена к диагональному виду. Однако для входящего в функцию Гамильтона оператора $p_r^2 f = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(rf)$ такое приведение осуществимо; собственные функции этого оператора $\sin kr/r$.

§ 9. Определение стационарных состояний системы с помощью измерений. Общее исследование понятия измерения.

Прежде чем мы займёмся общим исследованием поведения системы при внешнем возмущающем влиянии, следует привести типичные примеры того, как возможно определение стационарного состояния системы при помощи измерения, т. е. посредством специально подобранного внешнего воздействия. При этом существенно принимать во внимание, что система, даже если она изолирована извне, не обязательно должна находиться в стационарном состоянии, или, что то же самое, не обязательно должна с достоверностью обладать одним единственным значением энергии. Напротив, наиболее общее состояние системы задаётся функцией

$$\psi = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} E_n t} u_n(q) = \sum_n c_n(t) u_n(q), \quad (187)$$

с не зависящими от времени, но в остальном произвольными коэффициентами $c_n(0)$. (Если речь идёт о системе с непрерывным спектром энергии, сумму следует заменить интегралом.) В общем случае только измерительная аппаратура создаёт стационарное состояние. Мы исследуем теперь, как отображается этот процесс в математическом аппарате волновой механики. При

этом мы получим в качестве основного результата простое статистическое истолкование коэффициентов c_n .

Простейший способ исследования состояния системы (атома или молекулы) заключается в воздействии на систему внешним силовым полем, на которое системы, находящиеся в различных состояниях, реагируют по-разному. Пусть Q обозначает координату центра тяжести атома или молекулы. Произвольная функция $\psi(q, Q; t)$ может быть представлена в виде

$$\psi(q, Q; t) = \sum_n c_n(Q, t) u_n(q, Q).$$

Здесь q обозначает координаты частиц системы по отношению к её центру тяжести, $u_n(q, Q)$ — собственные функции с значениями энергии $E_n(Q)$, которые соответствуют рассматриваемым функциям $\Phi_k(q, Q)$ и $V(q, Q)$ внешних потенциалов и удовлетворяют уравнениям

$$-\sum_{a=1}^N \frac{\hbar^2}{2m^{(a)}} \sum \left[\left(\frac{\partial}{\partial x_k^{(a)}} - \frac{ie^{(a)}}{\hbar c} \Phi_k(x^{(a)} + Q) + V^{(a)}(x^{(a)} + Q) + V(q_1, \dots, q_l) \right) \right] u_n(q, Q) = E_n(Q) u_n,$$

аналогичным (97). Q в этих уравнениях играют роль внешних параметров. Если внешние силы на протяжении системы изменяются мало, то $\Phi_k(x^{(a)} + Q)$ и $V^{(a)}(x^{(a)} + Q)$ можно разложить в ряды и ограничиться небольшим числом первых членов; в большинстве случаев даже первым членом:

$$\Phi_k(x^{(a)} + Q) = \Phi_k(Q) + \sum_{l=1}^3 \frac{\partial \Phi_k}{\partial Q_l} x_l^{(a)} + \dots,$$

$$V^{(a)}(x^{(a)} + Q) = V^{(a)}(Q) + \sum_{l=1}^3 \frac{\partial V^{(a)}}{\partial Q_l} x_l^{(a)} + \dots$$

Тогда из общего волнового уравнения для $c_n(Q, t)$ мы получаем, пренебрегая опущенными здесь смешанными

членами, волновые уравнения следующего вида:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial c_n}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{l=1}^3 \frac{\partial^2 c_n}{\partial Q_l^2} + E_n(Q) c_n. \quad (188)$$

Физическое значение этих уравнений заключается в том, что зависящее от положения центра тяжести системы собственное значение внутренней энергии системы можно рассматривать просто как потенциальную энергию для движения центра тяжести всей системы.

Что касается природы опущенных смешанных членов, которые будут более подробно рассмотрены в § 11, стр. 141—142, то они затрудняют разделение волновых уравнений по c_n , так как зависят от всех c_n и их первых производных. Влияние их мало в том случае, когда движение системы происходит настолько медленно, что среднее смещение системы $\Delta Q = \overline{Q}(t + \tau) - \overline{Q}(t)$ за время $\tau = \frac{\hbar}{E_n - E_m}$ удовлетворяет условию

$$\frac{\partial E_n}{\partial Q} \Delta Q \ll E_n - E_m. \quad (189)$$

Особая осторожность нужна в том случае, когда при отсутствии внешнего силового поля рассматриваемое состояние системы вырождено, так что разность энергий $E_n - E_m$ пропорциональна интенсивности внешнего поля. В этом случае неравенство (189) тоже является условием применимости волновых уравнений (188).

Волновые уравнения этого типа составляют основу всех опытов по отклонению молекулярных лучей во внешних силовых полях. Чтобы иметь дело со случаем, когда нет вырождения при наличии внешних силовых полей, можно сначала рассмотреть различные возбуждённые состояния, при которых суммарный вращательный момент системы равен нулю, и исследовать их разделение во внешнем электрическом поле. Пусть F — напряжённость электрического поля в точке Q ; тогда в нашем случае $E_n(Q)$ примет, вообще говоря, форму

$$E_n(Q) = -\frac{\alpha_n}{2} F^2(Q), \quad (190)$$

где $\alpha_n, \dots, \alpha_m, \dots$ — значения электрической поляризуемости атома или молекулы в состояниях n, \dots, m, \dots

В первоначальных опытах Штерна и Герлаха с молекулярным пучком разделились не различные возбуждённые состояния атома, а состояния с различным направлением вращательного момента атома. Энергия этих состояний равна

$$E_m = E_0 + \hbar \omega m, \quad (191)$$

где m — магнитное квантовое число, пробегающее значения от $-j$ до $+j$ (целые или полуцелые). Величина ω , пропорциональная напряжённости внешнего магнитного поля H , равна частоте ларморовой прецессии¹⁾, умноженной на численный фактор g (так называемый фактор расщепления Ланде):

$$\omega = g \frac{eH}{2m_0c}. \quad (192)$$

Условие (189) означает здесь, что величины компонент H по трём закреплённым в пространстве направлениям должны в месте нахождения атома испытывать лишь малые относительные изменения за время $1/\omega$.

Мы можем теперь, положив в снову волновое уравнение (188), обсудить, при каких условиях могут быть разделены во внешнем поле лучи, принадлежащие состояниям n и m . Представим себе цилиндрический луч с поперечником d , распространяющийся в направлении x . Согласно (82), центр волнового пакета движется вдоль классической траектории, соответствующей потенциальной функции $E_n(Q)$. В силу (84) и (85) и соотношений неопределённости, ширина такого волнового пакета изменяется в соответствии с неизбежным разбросом начальных импульсов в направлении, перпендикулярном к лучу, порядок которого, по крайней мере, $p_y \sim \hbar/d$. Это можно представить себе так же, как результат дифракции луча при прохождении через ограничивающую диафрагму с отверстием d . Вычислим теперь отклонение

¹⁾ Ларморова частота измеряется здесь как круговая частота и имеет в 2π раз большее значение, чем при обычном обозначении. Далее следует заметить, что уравнение (188) справедливо при изложенных условиях, также и при учёте электронного спина (см. § 13).

y_n, \dots, y_m, \dots луча во внешнем силовом поле по направлению y , соответствующее состояниям n, \dots, m, \dots за время t . С другой стороны, оценим расширение Δy луча в поперечном направлении за счёт упомянутого явления дифракции за то же время. Чтобы получилось два отчетливо разделённых луча, должно соблюдаться условие:

$$y_n - y_m \gg \Delta y. \quad (193)$$

Если подставить значения входящих сюда величин

$$y_n = \frac{1}{2M} \frac{\partial E_n}{\partial Q_y} t^2, \quad y_m = \frac{1}{2M} \frac{\partial E_m}{\partial Q_y} t^2, \quad \Delta y \sim \frac{\hbar}{Md} t,$$

то условие (193) даёт

$$\frac{\partial (E_n - E_m)}{\partial Q_y} t \gg \frac{\hbar}{d}, \quad d \frac{\partial (E_n - E_m)}{\partial Q_y} t \gg \hbar. \quad (194)$$

Соответствующая разности энергий $E_n - E_m$ частота ν_{nm} равна

$$\nu_{n, m} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}. \quad (195)$$

Обозначим теперь через $\delta f = d \frac{\partial f}{\partial Q_y}$ изменение какой-либо величины f на протяжении поперечника луча. Тогда

$$t \delta \nu_{n, m} \gg 1. \quad (194')$$

Во всех случаях далее справедливо неравенство $\delta \nu_{n, m} < \nu_{n, m}$ (в действительности $\delta \nu_{n, m}$ много меньше, чем $\nu_{n, m}$). Поэтому имеем:

$$t \nu_{n, m} \gg 1. \quad (196)$$

Нельзя определить, находится ли система в состоянии n или в состоянии m за произвольно короткое время. Для такого определения необходимо минимальное время

$$t \sim \frac{1}{\nu_{n, m}} = \frac{\hbar}{E_n - E_m}. \quad (196')$$

В случае классического опыта Штерна и Герлаха энергия даётся соотношением (191), а минимальное время равно, таким образом, $1/\omega$. Мы увидим, что минимальное время

$^1/\psi_{n,m}$ получается при всех методах определения состояния системы, а не только для рассмотренного здесь ¹⁾).

Отличительным свойством опытов по отклонению молекулярных пучков является то, что если до опыта молекула (или атом) находилась в одном из состояний n, m, \dots , то после этого опыта она практически с достоверностью находится в одной из областей V_n, V_m, \dots , совершенно разделённых между собой (но, возможно, зависящих от времени). Если, таким образом, вначале было $c_n = 1, c_m = 0$ для $n \neq m$, то после такого процесса решение имеет вид

$$\psi_n(q, Q; t) = a_n(Q, t) u_n(q, Q). \quad (197)$$

Здесь различные $u_n(q, Q)$ при любом заданном Q ортогональны между собой, как функции переменной q . Кроме того, в случае постоянного в пространстве внешнего поля, u не зависит от координат Q . Далее, как следствие уравнения непрерывности, имеем

$$\int a_n^* a_n dQ = 1, \quad \int a_n^* a_m dQ = 0 \quad \text{при } n \neq m, \quad (198)$$

и благодаря указанным свойствам опыта,

$$a_n(Q, t) \text{ вне } V_n(t). \quad (199)$$

Линейность волнового уравнения, которую мы здесь используем существенным образом, позволяет найти волновую функцию $\psi(q, Q; t)$ системы после опыта по отклонению луча при произвольном внутреннем начальном состоянии системы $\sum_n c_n u_n(q)$:

$$\psi(q, Q; t) = \sum_n c_n \psi_n(q, Q; t) = \sum_n c_n a_n(Q, t) u_n(q, Q). \quad (200)$$

Согласно развитым уже общим принципам вероятность нахождения системы в области $(Q, Q + dQ)$ при произ.

¹⁾ Соотношение (196') не равносильно по содержанию с рассмотренным ранее соотношением неопределённости $\Delta E \Delta t \sim \hbar$, так как в последнем речь шла о продолжительности времени, в течение которого частица с энергией, определённой с точностью до ΔE , находится в определённом месте. Здесь, напротив, не участвуют никакие q -величины, кроме E и t .

вольном значении q равна

$$W(Q) dQ = dQ \int \psi^* \psi(q, Q; t) dq = \sum_{(n)} |c_n|^2 |a_n(Q, t)|^2 dQ. \quad (201)$$

В силу (199), мы находим далее, что в общем случае вероятность найти атом в области V_n равна

$$\int_{V_n} W(Q) dQ = |c_n|^2. \quad (202)$$

Это статистическое утверждение можно по определению считать равносильным следующему высказыванию: *в общем случае $|c_n|^2$ представляет собой вероятность того, что система находится в состоянии E_n .*

Вероятность найти после опыта по отклонению пучка координату q между q и $q + dq$ (при любом значении Q) равна, в силу (200) и (198),

$$W(q) dq = dq \int \psi^* \psi(q, Q; t) dQ = \sum_{(n)} |c_n|^2 |u_n|^2 dq. \quad (203)$$

При этом предполагается, что u_n уже не зависит от Q , как было пояснено выше. Совершенно такое же выражение получается для вероятности в пространстве импульсов. Эти результаты оправдывают сделанные выше определения.

Мы можем рассматривать центр тяжести атома как специальный «измерительный аппарат» (при этом существенно только, чтобы его координаты были новыми степенями свободы системы), а энергию E_n внутреннего состояния системы — как измеряемую величину. Вместо центра тяжести атома можно использовать любой другой аппарат (при этом Q описывает как бы положение стрелки прибора). Необходимо только потребовать, чтобы этот аппарат с достоверностью различно реагировал на различные состояния системы, что как раз и выражает уравнение (199). Последующее отвлечение от степеней свободы аппарата, которое при расчёте формально сводится к интегрированию вероятностей по q , приводит, в силу (203), к следствию: *фазы амплитуд c_m , относящихся к измеряемой величине, не входят в окончательный результат.* Вероятность найти какую-либо величину ξ , характеризующую систему, между ξ и $\xi + d\xi$ равна сумме

этих вероятностей для тех случаев, когда измеряемая величина имеет определённое значение, умноженных на соответствующие весовые факторы $|c_n|^2$:

$$W(\xi) d\xi = \sum_n |c_n|^2 W_n(\xi) d\xi \quad \left(\sum_n |c_n|^2 = 1 \right), \quad (203')$$

в частности, это верно для канонически сопряжённых величин q и p , причём $W_n(q) = |u_n(q)|^2$; а $W_n(p) = |v_n(p)|^2$. В этом случае рассматриваемую совокупность называют *смесью* (Gemisch) в отличие от *чистого состояния* (reine Fall), при котором вероятность $W(\xi)$ не может быть представлена в виде суммы соответствующих вероятностей всех возможных случаев одновременно для всех величин ξ или, чего уже достаточно, для двух канонически сопряжённых величин ξ . Измерение внутренней энергии E_n системы и связанное с ним отвлечение от степеней свободы измерительной аппаратуры создаёт из чистого состояния, для которого

$$W(q) dq = \left| \sum c_n u_n(q) \right|^2 dq; \quad W(p) dp = \left| \sum c_n v_n(p) \right|^2,$$

в общем случае (т. е. когда не все c_n , кроме одного, исчезают) смесь, для которой

$$W(q) dq = \sum_n |c_n|^2 |u_n(q)|^2 dq; \quad W(p) dp = \sum_n |c_n|^2 |v_n(p)|^2 dp.$$

Этот результат, который вытекает из введённых нами ранее предположений, без дополнительных допущений, и существенным образом основывается на линейности всех волновых уравнений, имеет решающее значение для свободного от противоречий понимания измерительного процесса и связанных с ним понятий в волновой механике. Действительно, этот результат указывает, что получают одинаковые результаты, независимо от того, где производится необходимое разделение между наблюдаемой системой, которая описывается волновой функцией, и измерительной аппаратурой¹⁾.

¹⁾ Ср. J. v. Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Berlin, 1932, где в гл. VI этот вопрос подробно разъяснён.

То обстоятельство, что применяется определённая измерительная аппаратура, находит непосредственное выражение в математическом аппарате квантовой механики. Иначе обстоит дело, когда нужно констатировать, что измерение дало вполне определённый результат; в нашем случае: «центр тяжести атома находится после опыта в области V_n », «энергия атома имеет значение E_n , а не какое-либо другое значение». Такое *установление физического факта* при помощи не принадлежащих к системе измерительных средств (наблюдателя или регистрирующей аппаратуры) представляет собой с точки зрения математического аппарата теории, описывающего прямо лишь возможности (вероятности), особый акт, не определённый заранее законами природы, который дополнительно входит в вычисления как *редукция волнового пакета* (в нашем случае $\sum c_n u_n(q)$ переходит в $u_n(q)$). Совершенно аналогично обстоит дело уже и с измерением положения частицы. В этом случае следует заменить $\sum c_n u_n(q)$ функцией $\psi(q, t)$ и понимать под Q координату светового кванта в фокальной плоскости окуляра γ -лучевого микроскопа. Как уже было замечено в § 1, необходимости такого особого акта не следует удивляться, если вспомнить, что при каждом измерении имеет место некоторое принципиально неконтролируемое взаимодействие с измерительной аппаратурой. При этом важно обратить внимание на то, что способ выражения, согласно которому система должна обязательно иметь определённую внутреннюю энергию E_n , или, что то же самое, находиться в определённом *стационарном* состоянии, независимо от определения энергии с помощью измерений, легко приводит к противоречию, особенно там, где старая квантовая теория говорит о «переходах» между различными стационарными состояниями системы.

Обычно в квантовой механике то, что здесь говорилось об измерениях энергии системы, распространяют также на измерения «любой физической величины». Мы, напротив, обсудим это обобщение несколько позже из-за того, что, как мы видели, для таких измерений необходимо в общем случае конечное минимальное время, и поэтому приходится принять во внимание, что рассматриваемые

величины могут измениться с течением времени (ср. § 10). При измерении энергии системы это усложнение отпадает, так как энергия постоянна во времени. Действительно, вероятность того, что энергия системы равна E_n , даётся $|c_n|^2$ и, в силу соотношения $c_n(t) = c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$, получаем

$$|c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2. \quad (204)$$

Вероятность найти определённое значение энергии E_n замкнутой системы не зависит от времени. Это—наиболее общее выражение закона сохранения энергии. Доказанная выше теорема, которая гласит, что среднее значение энергии \bar{E} всегда постоянно во времени, получается отсюда как частный случай, так как среднее значение равно

$$\bar{E} = \sum_n |c_n|^2 E_n. \quad (205)$$

Здесь полезно ввести матрицу плотности P . Эта эрмитова матрица, введённая впервые И. Нейманом¹⁾, позволяет удобно вычислять средние значения какой-либо величины в заданном состоянии.

Пусть имеется состояние, которому соответствует собственная функция

$$\psi = \sum_n c_n(0) \psi_n(q, t) = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} u_n(q).$$

Определим в матричном представлении, в котором $H = E$ приведена к диагональному виду, матрицу

$$P_{m,n} = c_m^*(t) c_n(t). \quad (206)$$

Тогда среднее значение энергии даётся выражением

$$\bar{E} = \sum_n P_{n,n} E_n = \sum_n (PE)_{n,n};$$

среднее значение q , в силу того, что

$$\bar{q} = \int q \psi^* \psi dq = \sum_{n,m} c_m^* c_n \int q \psi_m^* \psi_n dc = \sum_{n,m} c_m^* c_n \bar{q}_{n,m},$$

¹⁾ J. v. Neumann, *Göttinger Nachr.*, 1927, стр. 245; ср. также P. A. M. Dirac, *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 25, 62, 1929; 26, 376, 1930; 27, 240, 1930.

равно

$$\bar{q} = \sum_{n,m} q_{n,m} P_{m,n} = \sum_n (qP)_{n,n}.$$

Подобно этому среднее значение любого оператора F дается выражением:

$$\begin{aligned} \bar{F} &= \int \psi^* (F \psi) dq = \sum_{n,m} c_n^*(t) c_m(t) F_{n,m}(0) = \\ &= \sum_{n,m} F_{n,m}(0) P_{m,n} = \sum_n (FP)_{n,n}. \end{aligned}$$

Шпур матрицы X , по определению, равен сумме диагональных членов

$$\text{Spur}(X) = \sum_n X_{nn}. \quad (207)$$

Шпур матрицы имеет важное свойство: шпур произведения двух матриц A и B не зависит от порядка сомножителей, т. е. представляет собой коммутативное образование

$$\text{Spur}(AB) = \text{Spur}(BA). \quad (208)$$

Действительно,

$$\text{Spur}(AB) = \sum_{m,n} A_{n,m} B_{m,n}$$

симметричен относительно A и B . Если подставить в (208) $A = S^{-1} \tilde{X}$; $B = S$, то отсюда получается важное для дальнейшего соотношение:

$$\text{Spur}(S^{-1}XS) = \text{Spur} X. \quad (209)$$

В частности, шпур матрицы инвариантен относительно унитарного преобразования матриц.

Наши предыдущие результаты могут быть объединены следующим образом: для наиболее общего состояния системы матрица плотности P определяет среднее значение оператора F

$$\bar{F} = \text{Spur}(PF) = \text{Spur}(FP); \quad (210)$$

в частности, можно подставить сюда вместо F координату q , импульс p , или энергию системы H .

Это выражение, вследствие (209), инвариантно относительно изменений представления матриц. Например, если q приведено к диагональной форме, имеем

$$\bar{F} = \int P(q', q'') F(q'', q') dq' dq''.$$

Таким образом, если, например:

$$P(q', q'') = \psi(q', t) \psi^*(q'', t); \quad F(q', q'') = \delta(q'' - q') F(q'),$$

то

$$\bar{F}(q) = \int \psi^*(q, t) F(q) \psi(q, t) dq,$$

как и должно быть. Далее, зависимость P от времени выбрана так, что для не зависящей явно от времени матрицы F получаем правильную зависимость от времени среднего значения F . Действительно, согласно (206)

$$\frac{\hbar}{i} \dot{P}_{m,n} = P_{m,n} E_n - E_m P_{m,n},$$

и, следовательно, вообще

$$\frac{\hbar}{i} \dot{P} = - (HP - PH). \quad (211)$$

Подставляя это в (210), действительно получаем [в соответствии с (176)]

$$\begin{aligned} \dot{\bar{F}} &= \text{Spur} (\dot{P}F) = -\text{Spur} (HPF) + \text{Spur} (PHF) = \\ &= -\text{Spur} (PFH) + \text{Spur} (PHF) = \\ &= -\text{Spur} (P, FH - HF) = (\overline{HF} - \overline{FH}). \end{aligned}$$

Следует отметить, что знаки в правой части (211) и (176) противоположны.

До сих пор мы рассматривали только *чистые* состояния. Из (206) следует, что для наиболее общего чистого состояния матрица P после приведения к диагональной форме с помощью унитарного преобразования всегда равна

$$P_{n,m} = \delta_{n,m}, \quad \text{т. е.} \quad P = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \\ & & & & & 0 \\ & & & & & & 0 \end{pmatrix}.$$

Следовательно, одно из собственных значений P равно 1, остальные равны нулю. Мы увидим, что это является также достаточным условием чистого состояния.

Как заметил Нейман, матрицу P можно обобщить таким образом, чтобы соотношения (210) и (211) имели место также для смеси. А именно: матрица P наиболее общей смеси получается путём линейной суперпозиции возможных матриц P_1, P_2, \dots чистых состояний по следующей формуле:

$$P = \sum_{\eta} p_{\eta} P_{\eta}, \quad (212)$$

где

$$\sum_{(n)} p_n = 1, \quad p_n \geq 0. \quad (212')$$

Легко видеть, что так как $\text{Spur}(P_n) = 1$ для всех P_n , то, в силу (212'), имеем универсальное соотношение

$$\text{Spur}(P) = 1. \quad (213)$$

Соотношение (213) действительно необходимо вследствие (210). Это легко обнаружить, подставив вместо F единичную матрицу. Мы утверждаем, что P положительно definitно, т. е. что все исчезающие собственные значения P положительны.

P не имеет отрицательных собственных значений. (214).

Это высказывание равносильно другому: для всех (эрмитовых операторов, представляющих собой квадрат, соблюдается неравенство

$$\text{Spur}(PA^2) \geq 0. \quad (214')$$

Действительно, если привести P к диагональному виду, то из (214') следует

$$\sum_n P_{n,n} \sum_k |A_{n,k}|^2 \geq 0$$

для всех $A_{n,k}$; таким образом, $P_{n,n} \geq 0$ при любом n . Отсюда, обратно, следует справедливость (214') при таком специальном представлении матриц. Благодаря инвариантности шпура это справедливо в любом представлении. Из (214') можно видеть, что *сумма двух положительно definitных матриц есть снова положительно definitная матрица*. Поэтому сумма нескольких положительных матриц может обратиться в нуль только в том случае, если все слагаемые порознь равны нулю. Поскольку $p_n P_n$ являются положительно definitными матрицами, мы теперь видим, что (214) действительно есть следствие (212); обратно наиболее общую эрмитову матрицу, удовлетворяющую условиям (213) и (214), можно представить в форме (212), причём матрицы P_n , которые соответствуют чистым состояниям, могут даже рассматриваться как коммутативные. В частности, если представить себе P в диагональной форме ($P_{n,n}$), то достаточно просто положить $p_n = P_{n,n}$, тогда как P_n только на n -ом месте имеет элемент 1, а остальные элементы все равны нулю.

Мы можем теперь охарактеризовать чистые состояния с общими матрицами P , которые удовлетворяют только условиям (213) и (214), более простым образом, а именно с помощью соотношения

$$P^2 = P. \quad (215)$$

Эрмитова матрица тогда и только тогда удовлетворяет соотношению (215), когда этому соотношению удовлетворяют все её собственные значения, т. е. когда они равны -1 , 0 или $+1$. Соб-

ственное значение -1 исключается благодаря (214), а из (213) тогда следует, что только одно собственное значение равно 1, а остальные равны 0. В общем случае $P - P^2$ всегда положительно-дефинитная матрица, так как собственные значения P в силу (213) всегда меньше или равны 1.

Мы покажем теперь, что при сложении двух совокупностей с матрицами плотности Q и P согласно

$$P = p_1 Q + p_2 R \quad (0 < p_1 < 1, 0 < p_2 < 1, p_1 + p_2 = 1)$$

никогда не может возникнуть новое чистое состояние. Оно получается только, когда $Q = R = P$. Чтобы показать это, образуем

$$P^2 = p_1^2 Q^2 + p_1 p_2 (QR + RQ) + p_2^2 R^2,$$

с другой стороны, имеем:

$$(Q - R)^2 = Q^2 - (QR + RQ) + R^2$$

и, следовательно,

$$P^2 = p_1 Q^2 + p_2 R^2 - p_1 p_2 (Q - R)^2$$

(при этом уже принято во внимание, что $p_1 + p_2 = 1$, и потому подставлено $p_1^2 + p_1 p_2 = p_1$ и $p_2^2 + p_1 p_2 = p_2$). Таким образом находим

$$P - P^2 = p_1 (Q - Q^2) + p_2 (R - R^2) + p_1 p_2 (Q - R)^2;$$

в правой части стоит тогда сумма существенно положительных матриц. Если бы P принадлежало чистому состоянию, то благодаря $P^2 = P$ обращались бы в нуль все матрицы правой части в отдельности, и, в частности, мы имели бы:

$$(Q - R)^2 = 0.$$

Однако, квадрат эрмитовой матрицы может исчезать только тогда, когда все элементы самой матрицы равны нулю (это видно, например, из $(A^2)_{n,n} = \sum_k |A_{n,k}|^2$). Итак, получаем

$$Q = R,$$

что и требовалось доказать. Определение чистого состояния, как такой совокупности, для которой собственное значение матрицы плотности равно 1, а остальные 0, оказывается, таким образом, эквивалентным другому определению, по которому чистое состояние не может быть получено путём смешения двух различных совокупностей.

Нейман¹⁾ далее показал, что величина

$$\sum \equiv \text{Spur} (P \log P) \quad (216)$$

¹⁾ Изложение общей квантовой статистики на основе волновой механики лежит вне рамок настоящей книги. См. П. Иордан, Статистическая механика на основе квантовой теории, 1935.

с точностью до фактора $1/k$ (k — постоянная Больцмана) играет роль энтропии для распределения плотности P . Для чистого состояния, и только для него, энтропия исчезает, так как $P_{n,n} \log P_{n,n} = 0$ как при $P_{n,n} = 0$, так и при $P_{n,n} = 1$. Если, как мы всегда предполагаем, соблюдаются соотношения (213) и (214), то условие

$$\text{Spur}(P \log P) = 0 \quad (215')$$

будет равносильно условию (215). Распределение P , которое при заданном среднем значении энергии

$$E = \text{Spur}(HP)$$

даёт наименьшее значение величине Σ , представляет собой каноническое распределение

$$P = Ce^{-H/\theta}, \quad (217)$$

где θ — постоянная, которая имеет значение температуры, умноженной на k , а C должно быть определено из условия нормировки (213). Свободная энергия дается выражением

$$e^{-F/\theta} = \text{Spur}(e^{-H/\theta}), \quad (218)$$

так что (217) можно также написать в виде

$$P = e^{(F-H)/\theta}. \quad (217')$$

Если оператор Гамильтона H приведён к диагональному виду, то P также диагонально $P_{n,n} = e^{-E_n/\theta}$ и, согласно (218),

$$e^{-F/\theta} = \sum_n e^{-E_n/\theta}. \quad (218')$$

Однако, инвариантность (218) относительно представления матриц в некоторых случаях оказывается полезной¹⁾.

Рассмотренный выше способ измерения энергии системы обладает тем свойством, что непосредственное повторение измерения даёт то же самое значение измеренной величины. Иными словами, в том случае, когда *результат* применения измерительного аппарата неизвестен, а известен только сам *факт* такого применения (по терминологии первого параграфа в этом случае измеренная величина остаётся после измерения неизвестной, но определённой); вероятность того, что измеренная величина имеет какое-либо определённое значение после измерения, такая же, как и до измерения. Мы будем называть такие измерения измерениями *первого рода*. Может, напротив, случиться, что измерение изменяет состояние

¹⁾ См. примечание на стр. 122.

системы контролируемым образом, в частности, это происходит, если в начальном состоянии (до измерения) измеряемая величина с достоверностью имела определённое значение. Результат повторного измерения тогда не совпадает с результатом первого измерения. Несмотря на это, не исключена возможность однозначных заключений о значении измеренной величины в данной системе до измерения по результатам измерения. Такие измерения мы будем называть измерениями *второго рода*¹⁾. Уже в § 2 мы увидели, что измерения импульса первого рода выполнимы только за достаточно большое время, измерения импульса второго рода осуществимы, однако, и в короткое время.

Примером измерения энергии второго рода является возмущение атомной системы посредством удара с последующим измерением энергии ударяющей частицы. Пусть в момент времени 0 измеряемая система находится в состоянии n , а ударяющая частица имеет начальную кинетическую энергию ε . Вероятность того, что ко времени t возмущённая система находится в состоянии m , а ударяющая частица обладает кинетической энергией между ε' и $\varepsilon' + d\varepsilon'$, даётся следующим выражением:

$$W_m(\varepsilon') d\varepsilon' = A_{n,m} \left[\frac{1 - \cos(E_n + \varepsilon - E_m - \varepsilon') t / \hbar}{E_n + \varepsilon - E_m - \varepsilon'} \right] d\varepsilon'. \quad (219)$$

Эта формула следует из общего аппарата теории возмущений [§ 10, уравнение (241₁) и стр. 137—138]. Здесь уже выполнено интегрирование по направлениям начального и конечного импульсов, и подразумевается, что энергия и импульс связаны соотношениями $\varepsilon = p^2/2m$ и $\varepsilon' = p'^2/2m$.

Если $t \gg \frac{\hbar}{|E_m - E_n|}$, как в (196'), то выражение в скобках существенно отлично от нуля только тогда, когда

$$E_m - E_n - (\varepsilon - \varepsilon') \sim \frac{\hbar}{t},$$

т. е. когда измеренная величина $\varepsilon - \varepsilon'$ лежит вблизи значения разности $E_l - E_n$ (для какого-либо l), если система находилась в состоянии n или вблизи $E_l - E_m$, если она была в состоянии m . Благодаря наложенному

¹⁾ Ср. также: L. Landau и R. Peierls, Zs. f. Phys., 69, 56, 1931.

на время условию, интервалы $(\varepsilon - \varepsilon')$, в которых $W(\varepsilon')$ заметно отлично от нуля, чётко отделены друг от друга. Таким образом можно различить, обладала ли система первоначально энергией E_n или E_m .

Этот опыт становится ещё несколько проще, если благодаря удару система ионизуется, так что энергия E_m оказывается непрерывной, и можно записать вместо (219)

$$W(\varepsilon', E') d\varepsilon' dE' = A_n(E') \left[\frac{1 - \cos((E_n + \varepsilon - E' - \varepsilon') t / \hbar)}{E_n + \varepsilon - E' - \varepsilon'} \right] d\varepsilon' dE'. \quad (219')$$

Тогда становится возможным измерение ε , ε' и E' с помощью известных методов и, если система находилась до удара в состоянии n , то $E' + \varepsilon - \varepsilon'$ с точностью до \hbar/t оказывается равным E_n .

При этом особенно существенно сохранение энергии в процессах столкновений. Кроме того, можно показать, что в границах справедливости неравенства (196') энергией взаимодействия системы можно в энергетическом балансе пренебречь. Тем самым снова оправдано, что E_n можно называть собственным значением энергии системы.

Мы исследуем теперь, какие заключения можно сделать из опыта с соударением при произвольном начальном состоянии системы, которое может быть задано следующим образом:

$$\psi = \sum c_n u_n.$$

Если выполнено неравенство (196'), то в правой части (219) или (219') исчезают все смешанные члены, получающиеся при умножении величин с различными значениями индексов n и m . Поэтому при измерении $\varepsilon - \varepsilon'$ или соответственно $\varepsilon - \varepsilon'$ и E_n получается непосредственно мера $|c_n|^2 A_{n,n}$ или $|c_n|^2 A_n(E')$. Усложнение, вносимое фактором $A_{n,m}$ или $A_n(E')$, можно обойти, если заставить ударяющую частицу продолжительное время отражаться взад и вперёд так, чтобы она каждый раз соударялась с системой, и измерить полное окончательное изменение её энергии. Это последнее будет в $|c_n|^2$ случаях совпадать с одной из разностей $E_n - E_m$ (m — произвольно). В случае ионизации и одновременного измерения $\varepsilon - \varepsilon'$ и E' в $|c_n|^2$ случаях $E' - (\varepsilon - \varepsilon')$ будет совпадать с E_n .

Теперь мы можем дать общую схему измерений второго рода с помощью собственной функции ψ измеряемой системы и Ψ измерительного аппарата. Установленные состояния измерительной аппаратуры могут описываться системой функции u_k (ортогональной, полной и нормированной). В приведённом выше примере под k следует понимать разность энергий $\epsilon - \epsilon'$. Так как нет существенного различия между случаями дискретного и непрерывного k , то мы будем пользоваться обозначениями первого случая и писать суммирование по k , также и тогда, когда речь идёт фактически об интеграле. Пусть

$$\psi = \sum c_n u_n$$

—состояние измеряемой системы до измерения (u_n ортогональная и полная система). Тогда

$$\sum \psi_k U_k$$

—состояние составной системы (измеряемая система + измерительный аппарат) после измерения. Кроме того, благодаря линейности всех гамильтоновых функций ψ_k линейно зависят от c_n :

$$\psi_k = \sum_n c_n v_k^{(n)}. \quad (220)$$

При этом $\sum_k \int |\psi_k|^2 dQ = 1$ для всех c_n , следовательно,

$$\sum_k \int |v_k^{(n)}|^2 dq = 1. \text{ После того как зафиксировано опре-}$$

делённое значение k для «аппарата», волновой пакет ψ видоизменяется, превращаясь, с точностью до постоянного нормирующего фактора, в волновой пакет ψ_k . Однозначное заключение о c_n на основании измеренной величины k возможно тогда и только тогда, когда для каждого k существует только одно $v_k^{(n)}$, отличное от нуля. (Различным k могут, однако, соответствовать также и совпадающие n .) Состояния k могут быть тогда разложены в отдельные друг от друга группы таким образом, чтобы

каждая группа соответствовала одному определённом значению n . Мы заменим поэтому k двойным индексом n, m и запишем вместо (220)

$$\psi_{n,m} = c_n v_{n,m}, \quad (220')$$

где для всех c_n из $\sum |c_n|^2 = 1$ должно следовать

$$\sum_{n,m} \int |\psi_{n,m}|^2 dQ = 1.$$

Это равносильно

$$\int |v_{n,m}|^2 dQ = 1. \quad (221)$$

Вероятность получить аппарат после измерения в группе n, m с определённым n должна равняться вероятности того, что система до измерения находилась в состоянии n . В соответствии с этим находим

$$|c_n|^2 = \sum_m \int |\psi_{n,m}|^2 dQ. \quad (222)$$

$v_{n,m}$ можно конечно разложить по u_l :

$$v_{n,m} = \sum T_{l;n,m} u_l.$$

Для каждого (n, m) тогда следует из (220)

$$\sum_{l,m} |T_{l;n,m}|^2 = 1. \quad (223)$$

Это условие, очевидно, значительно слабее, чем условие ортогональности. В частности, при измерениях первого рода T —единичная матрица. В общем случае измерений второго рода специальные состояния, при которых одно из c_n равно 1, а остальные равны 0, обладают тем свойством, что о результате измерения может быть сделано некоторое определённое высказывание с достоверностью. А именно: измеренное k должно попасть в определённую группу (n, m) с наперёд указанным n .

Вернёмся снова к нашему примеру измерения энергии с помощью столкновения. Если речь идёт о возбуждении, то мы предположим, что каждое значение разности энергий $E_n - E_m$ соответствует только одной определённой паре состояний. Тогда каждому k , т. е. каждому

значению $\epsilon - \epsilon'$, соответствует одно единственное E_n . Кроме того, тогда все $v_{n,m}$ совпадают с точностью до постоянного фактора с u_m и, следовательно, не зависят от n . В случае же ионизирующих столкновений мы будем предполагать, что энергия E' вылетающего электрона также измеряется специальным аппаратом. $\epsilon - \epsilon'$ и E' играют тогда вместе роль k . Каждому k соответствует одно единственное n , которое определяется равенством $E' - (\epsilon - \epsilon') = E_n$, в то время как E' играет роль m . $v_{n,m}$ здесь снова не зависит от n и представляет собой собственную функцию непрерывного спектра с энергией E' .

§ 10. Общий аппарат теории возмущений.

Для многих приложений существенно иметь приближённый метод для решения волнового уравнения, который был бы применим, когда матрица энергии хотя и не совсем диагональна, но недиагональные элементы $H_{m,n}$ малы по сравнению с разностями диагональных элементов

$$H_{m,n} \ll H_{m,m} - H_{n,n}. \quad (224)$$

При этом мы вначале ограничимся исследованием стационарных решений волнового уравнения и будем предполагать, что уже введена подходящая полная ортогональная система функций v_1, v_2, \dots , в которой это условие выполнено. В этой системе волновое уравнение для стационарных состояний гласит

$$\sum_{(n)} H_{m,n} c_n = c_m E. \quad (225)$$

Собственная функция, принадлежащая E , равна

$$u(E) = \sum_n c_n(E) v_n,$$

так как из

$$H v_m = \sum_n v_n H_{n,m},$$

тогда, в силу (225), действительно следует

$$H u = E u.$$

Если ψ_n ортогональны и нормированы, то чтобы нормировать u , необходимо потребовать

$$\sum_n |c_n|^2 = 1; \quad (226)$$

из (225) далее следует, что для различных E всегда имеет место равенство

$$\sum_n c_n^*(E) c_n(E') = 0, \text{ когда } E \neq E'. \quad (226')$$

Если E дискретно, т. е. если (225) разрешимо только для дискретных значений энергии E_1, E_2, \dots , то можно вместо $c_n(E_k)$ писать также

$$c_n(E_k) = S_{n,k},$$

причём тогда, в силу (226) и (226'), $S_{n,k}$ образуют унитарную матрицу. Предполагая, что k может также пробегать известные области значений (быть может, многомерные) непрерывно, мы получим самый общий случай, если заменим в этих областях все суммы по k интегралами.

Введём теперь для того, чтобы приближённо решить уравнения (225), предположение, что недиагональные элементы $H_{n,m}$ малы по сравнению с диагональными элементами. Чтобы формально выразить это обстоятельство, мы представим себе недиагональные элементы умноженными на некоторый числовой параметр ε , по степеням которого должны быть разложены c_n . Мы полагаем

$$H_{n,n} = E_n^{(0)} + \varepsilon \Omega_{n,n}; \quad H_{m,n} = \varepsilon \Omega_{m,n} \text{ при } n \neq m, \quad (227)$$

и будем искать теперь решение, лежащее вблизи собственного значения $E_k^{(0)}$, т. е. систему коэффициентов c_n , которая в нулевом приближении обращается в δ_{nk} :

$$\left. \begin{aligned} E_k &= E_k^{(0)} + \varepsilon E_k^{(1)} + \varepsilon^2 E_k^{(2)} + \dots \\ c_{n,k} &= \delta_{n,k} + \varepsilon c_{n,k}^{(1)} + \varepsilon^2 c_{n,k}^{(2)} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (228)$$

Приравнивая в уравнении (225) выражения при равных степенях ε , получаем:

$$E_m^{(0)} c_{m;k}^{(1)} + \Omega_{m,k} = \delta_{m;k} E_k^{(1)} + c_{m;k}^{(1)} E_k^{(0)}, \quad (229_1)$$

$$E_m^{(0)} c_{m;k}^{(2)} + \sum_n \Omega_{m,n} c_{n;k}^{(1)} = \\ = \delta_{m,k} E_k^{(2)} + c_{m;k}^{(1)} E_k^{(1)} + c_{m;k}^{(2)} E_k^{(0)}. \quad (229_2)$$

Из первого уравнения (229) прежде всего следует, что при $m=k$

$$E_k^{(1)} = \Omega_{k,k}. \quad (230)$$

Изменение k -го собственного значения равно диагональному элементу (математическому ожиданию) энергии возмущения Ω в этом состоянии. При $m \neq k$ получаем

$$c_{m;k}^{(1)} [E_k^{(0)} - E_m^{(0)}] = \Omega_{m,k}, \\ c_{m;k}^{(1)} = - \frac{\Omega_{m,k}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad \text{при } m \neq k. \quad (231_1)$$

Значение $c_{k,k}^{(1)}$ при этом остаётся неопределённым. Мы должны, однако, принять ещё во внимание условие нормировки (226), которое после разложения по ε даёт

$$c_{kk}^{(1)} + c_{kk}^{(1)*} = 0, \quad (232_1)$$

$$c_{kk}^{(2)} + c_{kk}^{(2)*} + \sum_n |c_{n;k}^{(1)}|^2 = 0. \quad (232_2)$$

Из первого уравнения тогда следует, что $c_{kk}^{(1)}$ может быть произвольным, чисто мнимым числом. Эта неопределённость соответствует тому обстоятельству, что в решении (225) всегда остаётся произвольной фазовая постоянная. Если $c_{n;k}$ является решением, то и

$$c'_{n;k} = c_{n;k} e^{i\delta_k}$$

при произвольном δ_k также будет решением, и можно, не приходя в противоречие с предположением (228), допустить, что

$$\delta_k = \varepsilon \delta_k^{(1)} + \varepsilon^2 \delta_k^{(2)} + \dots,$$

где $\delta_k^{(1)}$, $\delta_k^{(2)}$, ... совершенно произвольны.

Перейдём теперь к обсуждению второго приближения. Прежде всего из (229₂), принимая во внимание (230₁), получаем для $m = k$

$$\begin{aligned} E_k^{(2)} &= \sum_n' \Omega_{kn} c_{n;k}^{(1)} = - \sum_n' \frac{\Omega_{k,n} \Omega_{n,k}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \\ &= - \sum_n' \frac{|\Omega_{k,n}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \end{aligned} \quad (230_2)$$

Штрих у знака суммы означает, что при суммировании опускается значение $n = k$. Для самого нижнего состояния k это возмущение собственного значения всегда отрицательно. При $m \neq k$ из (229₂) получаем

$$\begin{aligned} c_{m;k}^{(2)} [E_m^{(0)} - E_k^{(0)}] &= -(\Omega_{m,m} - \Omega_{k,k}) c_{m;k}^{(1)} - \sum_{n \neq m}' \Omega_{m,n} c_{n,k}^{(1)}, \\ c_{m;k}^{(2)} &= \frac{(\Omega_{m,m} - \Omega_{k,k}) \Omega_{m,k}}{(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})^2} + \\ &+ \sum_{n \neq m}' \frac{\Omega_{m,n} \Omega_{n,k}}{(E_m^{(0)} - E_k^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \quad \text{для } m \neq k \end{aligned} \quad (231_2)$$

$c_{k;k}^{(2)}$ не входит в эти уравнения и должно только удовлетворять условию (232₂). Мы можем сформулировать эти результаты более наглядно, введя эрмитову матрицу T с элементами

$$T_{k,k} = 0, \quad T_{m,k} = i \frac{\Omega_{m,k}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad \text{для } m \neq k; \quad (233)$$

тогда

$$c_{m;k}^{(1)} = iT_{m,k} \quad \text{при } m \neq k, \quad (231'_1)$$

$$E_k^{(2)} = (T^2)_{kk}, \quad (232'_2)$$

$$c_{m,k}^{(2)} = -i \frac{\Omega_{m,m} - \Omega_{k,k}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}} T_{m,k} - (T^2)_{m,k} \quad \text{при } m \neq k. \quad (231'_2)$$

Заметим, кроме того, что бесконечно малое унитарное преобразование S всегда может быть представлено с помощью эрмитовой матрицы T , умноженной на мнимую единицу i . Действительно, если

$$S = 1 + \varepsilon iT, \quad (234)$$

то условие

$$S\tilde{S} = \tilde{S}S = 1.$$

При пренебрежении высшими степенями ϵ эквивалентно

$$T = \tilde{T}, \quad (234')$$

т. е. эрмитовости T (ср. § 8). Благодаря этому согласно (232₁) и (231₁) $c_{k;n}^{(1)}$ с точностью до множителя i равно эрмитовой матрице.

Из выражения (231) для $c_{m;k}^{(1)}$, учитывая (227), можно видеть, что условие (224) действительно необходимо для применимости нашего метода разложения. Если это условие нарушено, то малость ϵ ещё не оправдывает применения нашего метода, так как $\epsilon c_{m;k}^{(1)}$ становится тогда по порядку величины сравнимым с 1. В частности, это имеет место, когда рассматриваемая система вырождена, т. е. когда несколько значений энергии *точно* совпадают. В этом случае приходится сначала особо рассматривать соответствующее подпространство конечного числа измерений и отдельно решать задачу о собственных значениях

$$\sum_{n=1}^g H_{m,n} c_n = c_m E, \quad m = 1, 2, \dots, g. \quad (225')$$

В пространстве g измерений, в котором $E_m^{(0)} = E_m^{(0)}$ совпадает по порядку величины с $\Omega_{m,n}$, эта задача представляет собой чисто алгебраическую проблему и всегда разрешима. g новых собственных значений E определяются из условия равенства нулю определителя [так называемого «секулярного (или векового) детерминанта»]:

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E, & H_{12}, & \dots, & H_{1g} \\ H_{21}, & H_{22} - E, & \dots, & H_{2g} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{g1}, & H_{g2}, & \dots, & H_{gg} - E \end{vmatrix} = 0, \quad (235)$$

которое представляет собой уравнение степени g относительно E и при эрмитовом $H_{n,m}$ имеет всегда g вещественных корней. После выполнения преобразования $\tilde{v}_m = \sum_n c_{n;m} v_n$, с $c_{n;m}$, определёнными из (225') при $E = E_m$, наша орто-

гональная система v_n как бы приспосабливается к функции возмущения Ω , и тогда можно снова применять первоначальный метод возмущения. После такого преобразования обращаются в нуль все $\Omega_{m,k}$, для которых m и k оба лежат в рассматриваемом подпространстве. Поэтому (231₁) и (230₂) опять применимы, если соответствующим образом обобщить определение при $m \neq k$ и $n \neq k$. Мы будем теперь под этим понимать: что состояния m и k или, соответственно, n и k , обладают существенно различными невозмущёнными энергиями (лежат в различных из рассмотренных выше конечных подпространств). Неравенство (224) теперь должно выполняться только для этих пар состояний.

Разберём вкратце, как видоизменяется рассмотренный метод возмущения, когда соответствующие значения энергии лежат в непрерывном спектре. Если заменить индекс n непрерывным параметром λ , то получаем:

$$u(k) = \int c(n, k) v(n) dn,$$

$$Hv(m) = \int v(n) H(n, m) dn,$$

$$\int H(m, n) c(n, k) dn = c(m, k) E(k).$$

Зависимость E от k остаётся при этом ещё совершенно произвольной, и мы можем определить её из соображений удобства. Вместо (227) следует положить

$$H(m, n) = E_n^{(0)} \delta(m - n) + \varepsilon \Omega(m, n),$$

причём теперь сюда вошла несобственная δ -функция, определённая посредством (145). Точно так же

$$c(n, k) = \delta(n - k) + \varepsilon c^{(1)}(n, k) + \varepsilon^2 c^{(2)}(n, k) + \dots$$

(229₁) принимает следующий вид:

$$[E^0(m) - E^0(k)] c^{(1)}(m, k) = -[\Omega(m, k) - E^{(1)}(k) \delta(m - k)].$$

Благодаря присутствию δ -функции здесь нельзя просто подставить $m = k$ и $E^{(1)}(k)$ оставить произвольным. Если $\Omega(m, k)$ не обла-

дает особенностью при $m = k$ или, точнее говоря, если $\int_{m-\varepsilon}^{m+\varepsilon} \Omega(m, k) dk$

при $\varepsilon \rightarrow 0$ исчезает, то целесообразно положить просто $E^{(1)}(k) = 0$. Итак, мы полагаем

$$\Omega(m, k) - E^{(1)}(k) \delta(m - k) = \Omega'(m, k)$$

и требуем, чтобы

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{m-\varepsilon}^{m+\varepsilon} \Omega'(m, k) dk = 0.$$

Тогда

$$c^{(1)}(m, k) = - \frac{\Omega'(m, k)}{E^{(0)}(m) - E^{(0)}(k)}$$

обладает особенностью при $m=k$. Более подробное рассмотрение показывает, что для интеграла

$$\int_{k-a}^{k+a} f(m) c^{(1)}(m, k) dm,$$

где $f(m)$ непрерывно, но в остальном произвольно, всегда допустимо брать его главное значение. Это последнее определяется как

$$H \int_{k-a}^{k+a} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{k-a}^{k-\varepsilon} + \int_{k+\varepsilon}^{k+a} \right],$$

или же как

$$H \int_{k-a}^{k+a} F(m, k) dm = \frac{1}{2} \int_{k-a}^{k+a} [F(m, k) + F(2k-m, k)] dm,$$

где подинтегральная функция теперь регулярна. Это справедливо, в частности, для вычисления $u(k)$ и $v(n)$ с помощью $c(n, k)$, а также для вычисления $E^{(2)}(k)$ и $c^{(2)}(m, k)$.

Перейдём теперь к рассмотрению возмущений, зависящих от времени. Мы будем искать решение уравнений

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{c}_m = \sum_n H_{m,n} c_n, \quad (236)$$

считая заданным начальное состояние (при $t=0$). Здесь матричные элементы разложения H по зависящей от времени ортогональной системе равны

$$H_{m,n} = E_n \delta_{m,n} + \varepsilon \Omega_{m,n}(t), \quad (237)$$

причём может быть задана любая зависимость матричных элементов Ω от времени. Невозмущённое решение имеет вид

$$c_n^{(0)}(t) = c_n^{(0)}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t}.$$

Возмущённое решение мы будем искать в форме

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + \varepsilon c_n^{(1)}(t) + \varepsilon^2 c_n^{(2)}(t) + \dots$$

с заданными значениями $c_n(0) = c_n^{(0)}(0)$; таким образом $c_n^{(1)}(0) = c_n^{(2)}(0) = \dots = 0$. Целесообразно выделить в c_n

множитель $e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t}$:

$$c_n(t) = a_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} \quad (238)$$

и положить

$$\Omega'_{m,n}(t) = \Omega_{m,n}(t) e^{\frac{i}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) t}. \quad (239)$$

Тогда

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{a}_m = \varepsilon \sum_n \Omega'_{m,n}(t) a_n(t) \quad (237')$$

и, полагая

$$a_n(t) = a_n^{(0)}(t) + \varepsilon a_n^{(1)}(t) + \varepsilon^2 a_n^{(2)}(t) + \dots, \\ (a_n^{(0)}(t) = a_n^{(0)}(0) = \text{const}),$$

имеем

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{a}_m^{(1)} = \sum_n \Omega'_{m,n}(t) a_n^{(0)}(0), \\ -\frac{\hbar}{i} \dot{a}_m^{(2)} = \sum_n \Omega'_{m,n}(t) a_n^{(1)}(t).$$

Эти уравнения можно непосредственно проинтегрировать

$$a_m^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n^{(0)}(0) \int_0^t \Omega'_{m,n}(\tau) d\tau, \quad (240_1)$$

$$\left. \begin{aligned} a_m^{(2)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_l \int_0^t \Omega'_{m,l}(\tau) a_l^{(1)}(\tau) d\tau = \\ &= -\frac{i}{\hbar^2} \sum_n a_n^{(0)}(0) \sum_l \int_0^t \Omega'_{m,l}(\tau) d\tau \int_0^\tau \Omega_{l,n}(\tau') d\tau', \end{aligned} \right\} (240_2)$$

.....

Особый интерес представляет тот частный случай, когда $\Omega_{m,n}$ не зависит от времени, так что, согласно (239),

$$\Omega'_{m,n}(t) = \Omega_{m,n} e^{\frac{i}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t}.$$

Тогда (240) даёт

$$a_m^{(1)}(t) = - \sum_n a_n^{(0)}(0) \Omega_{m,n}(0) \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t} - 1}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}, \quad (241_1)$$

$$a_m^{(1)}(t) = + \sum_n a_n^{(0)}(0) \sum_l \Omega_{m,l}(0) \Omega_{l,n}(0) \times \\ \times \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})t} - 1}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) (E_l^{(0)} - E_n^{(0)})} - \frac{e^{\frac{i}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_l^{(0)})t} - 1}{(E_m^{(0)} - E_l^{(0)}) (E_l^{(0)} - E_n^{(0)})} \right]. \quad (241_2)$$

Если в (241₁) $E_m^{(0)} = E_n^{(0)}$, то рассматриваемая величина принимает следующий вид:

$$a_n^{(0)}(0) \Omega_{m,n}(0) \frac{i}{\hbar} t.$$

Эта формула применима, пока $|\varepsilon| |\Omega_{m,n}(0)| \frac{t}{\hbar} \ll 1$. Если в этом случае, когда один из знаменателей исчезает (резонансный знаменатель), нужно получить решение, пригодное для большого промежутка времени, то метод возмущений следует видоизменить аналогично тому, как это было сделано в случае стационарных решений для вырождённых или почти вырождённых систем.

Часто встречается смешанный случай, при котором отдельное собственное значение энергии невозмущённой системы лежит в области, содержащей также и непрерывный спектр собственных значений (явление предиссоциации, эффект Оже). В этом случае мы будем считать в (241₁) индекс n дискретным, а m — непрерывным, причём матричные элементы $\Omega_{m,n}$ предположим нормированными относительно непрерывного параметра m . (Случай нескольких параметров m совершенно аналогичен этому.) Тогда может возникнуть вопрос о вероятности перехода системы за время t в какое-либо состояние m ,

для которого:

$$E_*^{(0)} - \Delta E < E^{(0)}(m) < E_*^{(0)} + \Delta E,$$

если в момент времени $t=0$ она с достоверностью находилась в дискретном состоянии n [$a_*^{(0)}(0) = 1$; $a_*^{(0)}(m; 0) = 0$]. Для этой вероятности перехода $W(t)$ получаем

$$W(t) = \int |a^{(1)}(m, t)|^2 dm = \int dm |\Omega_{m,n}(0)|^2 \times \\ \times \frac{4 \sin^2 \left[(E^{(0)}(m) - E_*^{(0)}) \frac{t}{2\hbar} \right]}{[E^{(0)}(m) - E_*^{(0)}]^2}.$$

При этом интегрирование по m нужно выполнить по области, соответствующей интервалу энергии $(E_*^{(0)} - \Delta E, E_*^{(0)} + \Delta E)$. Если

$$\frac{\Delta E t}{\hbar} \gg 1, \quad (242)$$

то здесь можно, введя в качестве переменной интегрирования

$$\frac{[E^{(0)}(m) - E_*^{(0)}] t}{2\hbar} = x,$$

с достаточным приближением вынести из-под знака интеграла $|\Omega_{m,n}(0)|^2$ и взять оставшийся интеграл в пределах от $-\infty$ до $+\infty$ по x . Таким образом получаем

$$W(t) = |\Omega_{m,n}(0)|^2 \frac{t}{2\hbar} \frac{dm}{dE^{(0)}(m)} 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx,$$

и, так как интеграл равен π , то

$$W(t) = \frac{2\pi t}{\hbar} |\Omega_{m,n}(0)|^2 \frac{dm}{dE^{(0)}(m)}. \quad (243)$$

Множитель $\frac{dm}{dE^{(0)}(m)}$ соответствует переходу от нормировки матричного элемента Ω относительно m к нормированию по $E^{(0)}(m)$. Если имеется несколько параметров m , например m_1, m_2, m_3 , то следует рассмотреть элемент объёма в m -пространстве для области энергии $E_*^{(0)} - \Delta E < E(m_1, m_2, m_3) < E_*^{(0)} + \Delta E$. Если объём этой области

равен

$$\int dm_1 dm_2 dm_3 = \omega(E_n^0) 2\Delta E,$$

$$(E_n^0 - \Delta E < E(m_1, m_2, m_3) < E_n^0 + \Delta E),$$

то вместо $\frac{dm}{dE^0(m)}$ в (243) входит множитель $\omega(E_n^0)$.

Использованное в § 9 уравнение (219) для вероятности перехода при соударении точно так же получается из общей формулы (241₁). В этом случае невозмущенная система состоит из двух независимых частей. При этом полная энергия системы, входящая в (241₁), равна сумме энергии обеих подсистем, так что E_n^0 следует заменить через $E_n + \varepsilon$, а $E^0(m)$ соответственно через $E_m + \varepsilon'$. E_n и E_m здесь относятся к одному атому, а ε и ε' — к удаляющейся частице.

До сих пор мы выбирали в качестве начальных состояний системы дискретные состояния. Можно точно так же рассмотреть и случай непрерывных состояний. Из (241) снова получается формулы типа (243):

$$W_n(t) = \frac{2\pi t}{\hbar} |\Omega_{n,m}(0)|^2 \frac{dm}{dE^0(m)} P(m_0), \quad (243')$$

где $P(m)dm$ — плотность систем в m -пространстве. Это означает, что мы рассматриваем большое число систем, $P(m)dm$ -ая часть которых обладает значением m между m и $m+dm$. Далее: m_0 означает такое m , для которого $E(m_0) = E_n^0$. При этом, однако, здесь произведено усреднение по фазам $a_m^0(0)$, а $|a_m^0(0)|^2$, как не зависящее в рассматриваемом интервале от m , вынесено из-под знака интеграла и заменено через $P(m_0)$. Вследствие эрмитовости Ω всегда $|\Omega_{m,n}(0)|^2 = |\Omega_{n,m}(0)|^2$, что, согласно (243) и (243'), приводит к важному при рассмотрении теплового равновесия соотношению между частотой прямого и обратного перехода.

Рассмотренные здесь «процессы перехода» уже и в старой квантовой теории представляли собой случай, где причинное описание явлений становится невыполнимым, — в частности, уже потому, что из одного и того же начального состояния возможны различные переходы, выбор между которыми производит исключительно сле-

пой случай. Квантовая механика, строго говоря, не знает таких понятий, как разрывный «процесс», так как все изменения состояния системы *во времени* происходят непрерывно. Только наблюдение (измерение) устанавливает, в какое состояние система фактически перешла и дискретность, обусловленная конечностью кванта действия, связана исключительно с редукцией волнового пакета (символического и описывающего систему только статистически), которая необходима для разделения наблюдаемой системы и средств наблюдения.

§ 11. Адиабатические и внезапные возмущения системы. Наиболее общие статистические суждения квантовой механики.

Особый интерес представляют собой такие внешние воздействия на систему, которые могут быть описаны с помощью изменения внешних параметров (напряжённости внешнего поля, положения стенок и т. д.). Уже в старой квантовой теории существовал относящийся к этим случаям известный адиабатический принцип Эренфеста¹⁾, который гласит, что система, находившаяся вначале в определённом стационарном квантовом состоянии, остаётся в этом состоянии, если изменение параметров системы происходит достаточно медленно. Подобная теорема имеет место также и в волновой механике и была впервые сформулирована и доказана Борном²⁾.

Итак, допустим, что оператор Гамильтона H зависит от параметра a , и будем считать, что решениями проблемы собственных значений для всех входящих в рассмотрение значений a являются собственные функции

¹⁾ P. Ehrenfest, *Ann. d. Phys.*, 51, 327, 1916. Впоследствии Бор обсудил, в частности, вопрос о применимости классической механики при адиабатических, бесконечно медленных процессах. (См. A. Rubinowicz, *Handb. d. Phys.*, т. 24/1, гл. I, § 8.) Эта сторона вопроса, однако, уже не представляет интереса, так как приходится отказаться уже от самой классической механики при описании квантовых состояний.

²⁾ M. Born, *Zs. f. Phys.*, 40, 167, 1926. Относящиеся сюда более поздние работы E. Fermi и F. Persico, *Rend. Lincei* (6), 4, 452, 1926; M. Born и V. Fock, *Zs. f. Phys.*, 51, 165, 1928; P. Güttinger, там же, 73, 169, 1931.

$u_n(a)$ и собственные значения энергии $E_n(a)$. Они удовлетворяют, таким образом, уравнению

$$H(p, q, a) u_n(a) = E_n(a) u_n(a) \quad (244)$$

тождественно при всех a . Дифференцируя по a , получаем отсюда

$$\left(\frac{\partial H}{\partial a}\right)_{p,q} u_n(a) + H \frac{\partial u_n}{\partial a} = \frac{\partial E_n}{\partial a} u_n(a) + E_n \frac{\partial u_n}{\partial a}. \quad (244')$$

Положим теперь

$$\frac{\hbar}{i} \int u_m^* \frac{\partial u_n}{\partial a} dq = k_{mn}, \quad (245)$$

где k_{mn} вследствие ортогональности и нормировки u — эрмитова матрица. Далее, благодаря эрмитовости H , имеем

$$\frac{\hbar}{i} \int u_m^* \left(H \frac{\partial u_n}{\partial a} \right) dq = \frac{\hbar}{i} \int (H u_m)^* \frac{\partial u_n}{\partial a} dq = \frac{\hbar}{i} E_m k_{mn},$$

так что после умножения (244') на $\frac{\hbar}{i} u_m^*$ и интегрирования по q -пространству получаем

$$\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial H}{\partial a} - \frac{\partial E}{\partial a} \right) = kE - Ek. \quad (246)$$

Это уравнение следует понимать как матричное равенство, в котором E представляет собой диагональную матрицу. В этом случае диагональные члены в правой части исчезают тождественно, так что, в частности,

$$\left(\frac{\partial H}{\partial a} \right)_{nn} = \frac{\partial E_n}{\partial a} \quad (246')$$

и

$$k_{mn} = \frac{1}{E_n - E_m} \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial H}{\partial a} \right)_{mn} \quad \text{при } m \neq n \quad (E_m \neq E_n). \quad (246'')$$

Если a изменяется со временем, то решение уравнения

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} = H(p, q, a(t)) \psi$$

ищут в форме:

$$\psi = \sum_n c_n(t) u_n(a),$$

так что

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar}{i} \int u_m^* \dot{\psi} dq &= \int u_m^* H \psi dq = E_m(a) \int u_m^* \psi dq, \\
 -\frac{\hbar}{i} \dot{c}_m + \dot{a} \sum_n k_{mn} c_n &= F_m(a) c_m.
 \end{aligned} \quad (247)$$

Более подробное рассмотрение этих уравнений показывает ¹⁾, что:

$$c_m(T) - c_m(0) = \dot{a} F. \quad (248)$$

Здесь при определённом конечном $\dot{a} T = a(T) - a(0)$ и при $\lim T \rightarrow \infty$ и, следовательно, при $\lim \dot{a} \rightarrow 0$ F остаётся конечным. При этом здесь предполагается, что во время процесса ни одна из разностей $E_n - E_m$ не переходит через нуль. Подобный исключительный случай был особо рассмотрен Борном и Фоком, причём здесь играет существенную роль приём Лауэ ²⁾. Также и в этом случае при фиксированном $a(T) - a(0)$ имеет место равенство

$$\lim_{\dot{a} \rightarrow 0} (c_m(T) - c_m(0)) = 0. \quad (248')$$

Из (248) следует, что $|c_m(T) - c_m(0)|^2$ для малых \dot{a} равно, по порядку величины, \dot{a}^2 .

В частности, для случая $c_m(0)$ получается $|c_m(T)|^2 \sim \dot{a}^2$. Вероятность перехода из одного стационарного состояния в другое, вызванного изменением параметра a (эффект встряски), следовательно, пропорциональна \dot{a}^2 .

Несколько более общий, чем рассмотренный выше, случай имеет место, когда благодаря параметру a к системе прибавляются новые степени свободы. Если, например, атом проходит через силовое поле, изменяющееся в пространстве, то в первом приближении можно рассматривать его ядро как бесконечно тяжёлое, и считать проблему собственных значений решённой для каждого положения Q центра тяжести атома

$$H_0(q, Q) u_n(q, Q) = E_n(Q) u_n. \quad (249)$$

Здесь, однако, следует рассматривать Q не как параметр, изменяющийся во времени, а как координату, которая соответствует новой степени свободы.

¹⁾ См. работы, указанные в примечании 1, стр. 139.

²⁾ M. v. Laue, *Ann. d. Phys.*, 76, 619, 1925.

Нужно решить уравнение

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \sum_k \frac{\partial^2}{\partial Q_k^2} + H_0 \right) \psi(q, Q), \quad (250)$$

где H_0 действует только на q , а не на Q . Аналогичная проблема возникает также для молекул, когда ядра в первом приближении считают закреплёнными ($M \rightarrow \infty$) и только во втором приближении учитывают их движение (колебание и вращение). Если мы положим

$$\psi(q, Q) = \sum_n \varphi_n(Q, t) u_n(q, Q), \quad (251)$$

то, согласно (249):

$$-\frac{\hbar}{i} \sum_n \frac{\partial \varphi_n}{\partial t} u_n(q, Q) = \sum \left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \sum_k \frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial Q_k^2} + E_n(Q) \varphi_n \right] u_n(q, Q) - \frac{\hbar^2}{2M} \left[2 \sum_k \frac{\partial \varphi_n}{\partial Q_k} \frac{\partial u_n}{\partial Q_k} + \varphi_n \sum_k \frac{\partial^2 u_n}{\partial Q_k^2} \right] \right\}.$$

Введём для сокращения эрмитовы матрицы

$$A_{mn}^{(k)} = \frac{1}{M} \frac{\hbar}{i} \int u_m^* \frac{\partial u_n}{\partial Q_k} dq; \quad B_{mn} = -\frac{\hbar^2}{2M} \int u_m^* \sum_k \frac{\partial^2 u_n}{\partial Q_k^2} dq \quad (252)$$

и оператор возмущения \vec{Q} , определённый посредством

$$\vec{Q} \varphi_m = \sum_n \left(\sum_k A_{mn}^{(k)} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi_n}{\partial Q_k} + B_{mn} \varphi_n \right). \quad (253)$$

Тогда

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi_m}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_k \frac{\partial^2 \varphi_m}{\partial Q_k^2} + E_m(Q) \varphi_m + \vec{Q} \varphi_m. \quad (254)$$

В частности, имеются стационарные решения

$$\varphi_m(Q, t) = v_m(Q) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

для уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \sum_k \frac{\partial^2 v_m}{\partial Q_k^2} + E_m(Q) v_m + \vec{Q} v_m = E v_m. \quad (254')$$

Здесь E может, конечно, обладать как дискретным, так и непрерывным спектром или обоими вместе.

В известных случаях можно рассматривать оператор возмущения \vec{Q} как малый, и применять к (204) или (254') обычные методы теории возмущений. При этом в качестве нулевого приближения следует исходить из решений уравнения

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi_m^0}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_k \frac{\partial^2 \varphi_m^0}{\partial Q_k^2} + E_m(Q) \varphi_m^0 \quad (255)$$

или соответственно

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \sum_k \frac{\partial^2 v_m^0}{\partial Q_k^2} + E_m(Q) v_m^0 = E v_m^0 \quad (255')$$

(которые принимаются в качестве нулевых приближений). Этот метод применяется как при рассмотрении колебаний ядер в молекуле, так и при прохождении атома через внешнее силовое поле, а также и в ряде других проблем¹⁾. Это приближение можно назвать адиабатическим, потому что в этом приближении система всегда сохраняет своё внутреннее состояние m , а также потому, что это приближение тем лучше, чем меньше изменяется пакет за время $\hbar/[E_m(Q) - E_n(Q)]$, или, в случае дискретного спектра (255'), тем лучше, чем меньше разности энергий $E' - E''$ этого спектра по сравнению с разностями $E_m - E_n$ спектра внутренней энергии (малость частот колебания ядер по сравнению с электронными частотами).

Уравнения (254) и (254') являются также основными уравнениями для теории прохождения атомных пучков через магнитное поле с изменяющимся в пространстве направлением²⁾. В этом случае достаточно учесть в операторе возмущения \vec{Q} (253) конечное число состояний, соответствующих пространственному квантованию. Из строго доказываемого существования стационарных решений, в силу (254'), здесь, кроме того, следует, что также и при учёте эффекта встряски (поскольку внешнее поле не изменяется *во времени*) сумма внутренней энергии и энергии поступательного движения остаётся постоянной.

Наряду с предельным случаем адиабатического процесса особый интерес представляет случай «внезапного» изменения параметра a . Понятие «внезапного» изменения подлежит здесь уточнению: мы потребуем, чтобы относительное изменение a за рассматриваемые периоды времени $\frac{1}{\nu_{nm}} = \frac{\hbar}{E_n - E_m}$ было велико:

$$\dot{a} \gg a \frac{E_n - E_m}{\hbar}. \quad (256)$$

Тогда мы можем в уравнении

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \sum_n c_n u_n = \sum_m E_m c_m u_m$$

после интегрирования по времени, за которое происходит

¹⁾ М. Born u. J. R. Oppenheimer. *Ann. d. Phys.*, **84**, 457, 1927; J. Frenkel, *Phys. Zs. der Sowjetunion*, **1**, 99, 1932; L. Landau, там же 1,88 и 2,46, 1932.

²⁾ С. G. Darwin, *Proc. Roy. Soc. London (A)*, **117**, 258, 1927, особенно § 10.

изменение,

$$-\frac{\hbar}{i} \sum_n c_n u_n(a) \Big|_0^t = \int_0^t \sum_m E_m c_m u_m dt,$$

при конечном изменении параметра a положить в первом приближении равными нулю все величины, пропорциональные t . Поскольку это справедливо для правой части нашего уравнения, то же самое должно иметь место и для левой части: следовательно, здесь

$$\sum_n c_n u_n = \sum_n c_n(0) u_n(0),$$

что означает непрерывность функции $\psi = \sum c_n u_n$ при внезапном изменении параметра a

$$c_m(t) = \sum_n S_{mn} c_n(0), \quad (257)$$

где

$$S_{mn} = \int u_m^*(a) u_n(0) dq.$$

Пусть H_{mn} — матричные элементы новой, соответствующей значению параметра a , функции Гамильтона по отношению к системе функций, принадлежащих $H(0)$,

$$H_{mn} = \int u_m^*(0) H(a) u_n(0) dq. \quad (258)$$

Тогда

$$E(a) = S H S^{-1}, \quad (259)$$

т. е. S приводит матрицу новой функции Гамильтона к диагональному виду.

Теперь мы можем обсудить общее статистическое суждение квантовой теории (при этом мы для простоты записи применяем величины с дискретными собственными значениями). Это суждение можно формулировать следующим образом: спрашивается, какова вероятность того, что в определённый момент времени t_1 известная величина F принимает частное значение F_n , если до этого в момент $t_0 = t - \tau$ другая величина G имела значение G_m . Если S — матрица преобразования, переводящего из представления матриц, при котором $F(t_0)$ приведено к диагональному виду, в представление, при котором $G(t_1)$

диагонально, то искомая вероятность равна

$$W(F_n; G_m) = |S_{nm}|^2. \quad (260)$$

(Она симметрична относительно величин F и G .) Это суждение содержится в наших предыдущих суждениях, если: а) одна из величин F и G или обе являются координатами или импульсами (может быть, для различных моментов времени, см. §§ 3, 4, 5 и 9), или б) по крайней мере, одна из величин коммутирует с гамильтоновой функцией системы и, следовательно, постоянна во времени.

Если ни та, ни другая из этих возможностей не осуществяются, то можно помочь делу посредством некоторого ухищрения, которое представляет собой третью возможность для измерения величин и основывается на только что разобранным внезапном изменении функции Гамильтона. Суждение (260) справедливо также и тогда, когда с) можно, изменяя параметр, например, выключая внешнее поле, «внезапно» (в приведённом выше смысле) сделать рассматриваемую величину постоянной во времени (т. е. так изменить функцию Гамильтона, чтобы рассматриваемая величина с ней коммутировала) — («стоп-предположение»). В этом случае можно сперва в момент времени t_0 сделать постоянной величину F и измерить её, а затем, по истечении времени τ , считая от конца измерения, сделать постоянной G и измерить последнюю. Действительно, из доказанного выше результата относительно внезапного изменения параметра и выводов § 9 следует в этом случае справедливость (260).

Следует, однако, заметить, что такая возможность внезапной «остановки» какой-либо величины осуществима только в весьма ограниченном числе случаев: Так, например; невозможно выключить внезапно ядерный заряд протона и тем самым сделать импульс электрона в атоме водорода постоянным во времени. В этом случае удаётся, правда, определить собственную функцию $\varphi_n(p)$ в пространстве импульсов с помощью измерения второго рода (непосредственное повторение которого даёт уже другой результат) [возможность (а)]. В общем виде, однако, ещё не доказано, что любая величина может быть измерена за произвольно короткое время, даже если допустить измерения второго рода.

На этом основании мы предпочитаем, в отличие от догматического обоснования теории преобразований, не вводить в качестве аксиомы общее суждение (260). В конечном счёте ведь каждое измерение, если оно возможно, сводится к измерению пространственной координаты аппарата. Аппарат измеряет величину F , если при разложении функции ψ по нормированной ортогональной системе принадлежащего F оператора F «стрелка» аппарата с достоверностью даёт показания Q_1 , или Q_2 , ..., или Q_n , коль скоро до измерения ψ равнялось u_1 , или u_2 , ..., или соответственно u_n и т. д. В общем случае тогда вероятность показания стрелки Q_n по определению равна вероятности того, что до измерения величина F имела значение F_n . Из физического значения функции ψ аппарата и линейности всех операторов Гамильтона тогда следует, что эта вероятность равна квадрату модуля коэффициента разложения c_n функции ψ измеряемой системы (до измерения) по системе функций u_n ($c_n = \int u_n^* \psi_n dq$). Пусть после этого над системой производится новое измерение другой величины G с помощью нового измерительного аппарата с новыми координатами указателя Q_1, Q_2, \dots ; тогда вероятность того, что новая величина G имеет определённое значение G_m , если раньше величина F с достоверностью имела значение F_n , по определению совпадает с вероятностью того, что новый аппарат даёт показание Q_m , если известно, что первый аппарат, который в этом случае должен давать возможность однозначного заключения о состоянии после измерения (не совпадающего в случае измерений второго рода с состоянием до измерения), с достоверностью имел показание Q_n . Последнее равносильно тому, что состояние измеряемой системы после первого измерения описывается собственной функцией u_n ¹⁾. Если $v_1, v_2, \dots, v_m, \dots$ — собственные функции величины G , то веро-

¹⁾ Если $\bar{\psi}(q, Q_n)$ — функция сложной системы (система + аппарат) после измерения, то следует построить
$$\frac{\bar{\psi}(q, Q_n)}{(\int |\bar{\psi}(q, Q_n)|^2 dq)^{1/2}}.$$

Благодаря действию аппарата система теряет всякое воспоминание о прошлом состоянии, так как фаза в c_n изменяется неконтролируемым образом.

ятность $W(F_1, G_m)$ действительно равна тогда $|S_{nm}|^2$, где $S_{nm} = \int u_n v_m^* dq$.

Тем самым, казалось бы, все суждения о любых величинах F, G сводятся к вероятностным высказываниям о показаниях аппарата, т. е. к вероятностям для пространственных координат. Мы оставим, однако, открытым вопрос о том: существуют ли в действительности аппараты с постулированными свойствами для любых величин F, G , по той причине, что это существенным образом зависит от того, какие гамильтоновы функции действительно встречаются в природе, а об этом нерелятивистская волновая механика не может сделать никаких заключений. Более того, её понятие и её математический аппарат настолько последовательны и всеобщи, что эта теория осталась бы свободной от противоречий даже при существовании любых (эрмитовых) операторов Гамильтона.

§ 12. Пределный переход к классической механике. Связь со старой квантовой теорией.

Уже в § 5 мы указали связь уравнения волновой механики с классической механикой; а именно оказалось, что центр волнового пакета всегда движется так же, как движется материальная точка, на которую действует сила, равная среднему значению классической силы, по волновому пакету. Это само по себе не означает ещё полного предельного перехода к классической механике. Действительно, ведь классическая сила может на протяжении волнового пакета очень сильно изменяться, и поэтому среднее значение классической силы может сколько угодно сильно отличаться от значения силы в центре тяжести пакета. Только тогда, когда можно построить волновой пакет, внутри которого классическая сила изменяется достаточно мало, получается совпадение со свойствами системы, выведенными из траекторий классической механики. Кроме того, волновой пакет можно рассматривать только за такой промежуток времени, в течение которого размеры пакета изменяются лишь немного. Если речь идёт о стационарных состояниях и периоди-

ческих траекториях, то нужно потребовать, чтобы это время равнялось, по крайней мере, нескольким периодам обращения. Только тогда свойства содержащихся в волновом пакете стационарных состояний, если последние относительно мало отличаются друг от друга, могут приближённо описываться с помощью траекторий.

Предельный переход от волновой механики к классической механике формально аналогичен переходу от волновой оптики к оптике геометрической (Гамильтон). Эта аналогия послужила даже исходной точкой для рассуждений де-Бройля и Шредингера, которые привели к установлению волновой механики. Этот переход получается, если в общем волновом уравнении

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

сделать для ψ подстановку

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (261)$$

и разложить, после этого S по возрастающим степеням \hbar/i ¹⁾:

$$S = S_0 + \left(\frac{\hbar}{i}\right) S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots \quad (262)$$

Введём следующее предположение для оператора Гамильтона, который мы запишем сперва в декартовых координатах:

$$H = \sum_k \frac{1}{2m_k} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} + A_k \right)^2 + V,$$

[ср. (97) и (98)]; мы заменили здесь $\sum V^{(a)}(x^a)$ на $V(q_1, \dots, q_f)$. Здесь $A_k = -\frac{e_k}{c} \Phi_k$ и V могут быть любыми (вещественными) функциями координат q . Тогда

¹⁾ Такое предположение было сделано впервые в статьях: G. Wentzel, *Zs. f. Phys.*, 38, 518, 1926 и L. Brillouin, *C. R.*, 183, 24, 1926.

согласно (261)

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} + A_k \right) e^{\frac{i}{\hbar} S} &= \left(\frac{\partial S}{\partial q_k} + A_k \right) e^{\frac{i}{\hbar} S}, \\ \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} + A_k \right)^2 e^{\frac{i}{\hbar} S} &= \\ &= \left[\left(\frac{\partial S}{\partial q_k} + A_k \right)^2 + \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_k^2} + \frac{\partial A_k}{\partial q_k} \right) \right] e^{\frac{i}{\hbar} S}. \end{aligned}$$

Волновое уравнение даёт, следовательно, после сокращения на множитель $e^{\frac{i}{\hbar} S}$, без каких-либо пренебрежений

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \sum_{|k} \frac{1}{2m_k} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial q_k} + A_k \right)^2 + \right. \\ \left. + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\frac{\partial S}{\partial q_k} + A_k \right) \right] + V, \quad (263)$$

что в силу разложения (262) переходит, наконец, в последовательные уравнения

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \sum_k \frac{1}{2m_k} \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_k} + A_k \right)^2 + V = H \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_k}, q_k \right) \quad (264_0)$$

(это означает, что здесь в гамильтоновой функции просто заменяется p_k на $\frac{\partial S_0}{\partial q_k}$); далее,

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\partial S_1}{\partial t} &= \sum_k \frac{1}{2m_k} \left[2 \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_k} + A_k \right) \frac{\partial S_1}{\partial q_k} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_k} + A_k \right) \right] \\ &\dots \dots \dots \end{aligned} \right\} \quad (264_1)$$

Вместо (264₁) можно также написать

$$-\frac{\partial}{\partial t} e^{2S_1} = \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left[\frac{1}{m_k} \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_k} + A_k \right) e^{2S_1} \right]. \quad (265)$$

Уравнение (264₀) и (265) имеют простой физический смысл. Первое представляет собой известное дифференциальное уравнение в частных производных Гамильтона-Якоби классической механики. При этом следует заметить, что в области, достижимой рассматриваемым семей-

ством траекторий, решения этого уравнения вещественны. Согласно (264₁), тогда и S_1 вещественно в этих областях. Если предположить, что S_0 и S_1 вещественны, то (265) совпадает с *уравнением непрерывности* (при пренебрежении $S_2 \dots$). Действительно, тогда

$$\rho = \psi^* \psi = e^{2S_1}$$

$$\begin{aligned} i_k &= \frac{1}{2m_k} \left[\psi^* \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial q_k} + A_k \psi \right) + \psi \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial q_k} + A_k \psi^* \right) \right] = \\ &= \frac{1}{m_k} \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_k} + A_k \right) e^{2S_1}. \end{aligned}$$

Так как

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} = \frac{1}{m_k} \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_k} + A_k \right), \quad (266)$$

то

$$i_k = \rho \dot{q}_k \quad (267)$$

и (265) принимает форму уравнения непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} (\rho \dot{q}_k) = 0. \quad (265')$$

Проведём через точку q -пространства, в которой S_0 вещественно, механическую траекторию в соответствии с уравнением (266). [Если решение S_0 уравнения (264₀) не содержит иных параметров, то получается *одна* траектория; в общем случае каждому специальному выбору числовых значений, входящих в S_0 параметров $\alpha_1, \alpha_2, \dots$, соответствует определённая механическая траектория.] Согласно (265'), плотность остаётся постоянной во времени вдоль этой траектории. Следовательно, *в рассматриваемом приближении волновые пакеты ведут себя точно так же, как совокупности материальных точек, движущихся по классическим механическим траекториям*. Справедливость второй половины классических уравнений движения

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

для этих траекторий является, как известно из теории Гамильтона-Якоби, простым следствием (264₀) и (266).

Что касается области применимости рассматриваемого приближения, то она может быть, согласно (263), оха-

рактеризована следующим образом: в (263) член, умноженный на \hbar/i , должен быть мал по сравнению с первым членом. Итак, вводя сокращённое обозначение

$$\pi_k = \frac{\partial S}{\partial q_k} + A_k = p_k + A_k = m_k \dot{q}, \quad (266a)$$

получаем

$$\hbar \sum_k \frac{\partial \pi_k}{\partial q_k} \ll \sum_k \pi_k^2. \quad (268)$$

Для отдельной частицы при отсутствии магнитного поля имеем:

$$\pi_k = p_k = \frac{\hbar}{\lambda} n_k,$$

где n_k — компоненты единичного вектора в направлении движения, так что (268) тогда запишется так:

$$\lambda^2 \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\frac{n_k}{\lambda} \right) \ll 1$$

или

$$\sum_k \left(\lambda \frac{\partial n_k}{\partial q_k} - n_k \frac{\partial \lambda}{\partial q_k} \right) \ll 1. \quad (268')$$

В одномерном случае, когда $n_k = \pm 1$, это условие ещё проще:

$$\left| \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right| \ll 1. \quad (268'')$$

Неравенство (268), вообще говоря, нарушается в точках возврата, где одно из π_k и, следовательно, \dot{q}_k обращается в нуль, так что в этих точках $\partial \pi_k / \partial q_k$ может сделаться бесконечно большим. В частности, это всегда имеет место в случае одномерного движения. Следовательно, вблизи таких точек возврата классическая механика отказывается служить. Поведение решений вблизи этих критических точек требует особого исследования, и мы обсудим его ниже. Уравнения (264) и (265) можно, однако, применить также и в недостижимой по классической механике области, где S_0 мнимо, так как при выводе

этих уравнений не было сделано никакого предположения о вещественности функций. Для стационарного решения

$$\psi = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} u$$

можно положить

$$S = -Et + \bar{S}, \quad u = e^{\frac{i}{\hbar} \bar{S}},$$

где теперь \bar{S} и u не зависят от t . Разлагая

$$\bar{S} = \bar{S}_0 + \frac{\hbar}{i} \bar{S}_1 + \dots, \quad (262')$$

тогда получаем

$$\sum_k \frac{1}{2m_k} \left(\frac{\partial \bar{S}_0}{\partial q_k} + A_k \right)^2 + V = H \left(\frac{\partial \bar{S}_0}{\partial q_k}, q_k \right) = E, \quad (264'_0)$$

$$0 = \sum_k \frac{1}{2m_k} \left[2 \left(\frac{\partial \bar{S}_0}{\partial q_k} + A_k \right) \frac{\partial \bar{S}_1}{\partial q_k} + \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\frac{\partial \bar{S}_0}{\partial q_k} + A_k \right) \right], \quad (264'_1)$$

$$0 = \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left[\frac{1}{m_k} \left(\frac{\partial \bar{S}_0}{\partial q_k} + A_k \right) e^{2\bar{S}_1} \right]. \quad (265')$$

Предыдущие рассуждения легко обобщить на случай криволинейных координат. Пусть $ds^2 = \sum_x \sum_\lambda g_{x\lambda} dq_x dq_\lambda$ — элемент длины, $g^{x\lambda}$ — матрицы, обратная $g_{x\lambda}$ ($g_{x\alpha} g^{\lambda\alpha} = \delta_x^\lambda$), D — квадратный корень из детерминанта $g = |g_{x\lambda}|$. Тогда волновое уравнение, согласно § 5, стр. 68 (97*), имеет вид

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2D} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_x} + A_x \right) D g^{x\lambda} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \right) \psi + V \psi.$$

При этом множители m_x мы считаем уже включёнными в $g_{x\lambda}$. Здесь и в дальнейшем всегда производится суммирование по каждому из индексов, встречающемуся два раза. Подстановка (261) тогда даёт

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2} g^{x\lambda} \left(\frac{\partial S}{\partial q_x} + A_x \right) \left(\frac{\partial S}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \right) + \frac{1}{2D} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q^x} D g^{x\lambda} \left(\frac{\partial S}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \right) + V. \quad (263^*)$$

Введение разложения (262) (при учёте $g^{\lambda\lambda} = g^{\lambda\lambda}$) приводит к

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2} g^{\lambda\lambda} \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \right) \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \right) + V = \\ = H \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda}, q_\lambda \right), \quad (264^*)$$

$$-\frac{\partial S_1}{\partial t} = g^{\lambda\lambda} \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \right) \frac{\partial S_1}{\partial q_\lambda} + \frac{1}{2D} \frac{\partial}{\partial q_\lambda} D g^{\lambda\lambda} \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \right). \quad (264_1^*)$$

или

$$-\frac{\partial}{\partial t} e^{2S_1} = \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial q_\lambda} \left[D g^{\lambda\lambda} \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \right) e^{2S_1} \right]. \quad (265^*)$$

Для

$$\rho = D \psi^* \psi \\ i^z = D g^{\lambda\lambda} \left[\psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \psi \right) + \psi \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \psi^* \right) \right]$$

из волнового уравнения вытекает общее уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q_\lambda} i^z = 0$$

и при вещественном S_0 и S_1 в рассмотренном приближении снова получаем

$$\rho = e^{2S_1}, \\ \dot{q}^z = \frac{\partial H}{\partial p_z} = g^{\lambda\lambda} \left(\frac{\partial S_0}{\partial q_\lambda} + A_\lambda \right), \quad (266^*)$$

$$i^z = \rho \dot{q}^z. \quad (267^*)$$

Отсюда можно получить те же следствия, которые мы раньше имели в декартовых координатах.

Введение криволинейных координат важно, однако, потому, что при подходящем выборе последних для некоторых гамильтоновых функций удаётся достигнуть разделения переменных. В этом случае стационарное решение u распадается на произведение функций различных переменных

$$u = u_1(q_1) \dots u_f(q_f),$$

а \bar{S} соответственно распадается аддитивно:

$$\bar{S} = \bar{S}_1(q_1) + \dots + \bar{S}_f(q_f).$$

Каждая из этих функций $S_x(q_x)$ удовлетворяет тогда в этих переменных дифференциальному уравнению второго порядка. Наряду с постоянной энергией в решение входят в качестве параметров ещё $f-1$ новых постоянных $\alpha_2, \dots, \alpha_f$. Всё, что в дальнейшем говорится о системе с одной степенью свободы, справедливо без каких-либо изменений также и для движения каждой отделённой координаты q_x и для соответствующей собственной функции $u_x(q_x)$ системы с разделяющимися переменными. В частности, это верно для радиального движения материальной точки под влиянием центрального поля сил.

Разберём теперь более подробно одномерный случай. При этом векторный потенциал следует положить равным нулю, так как магнитное поле в одномерном случае не может проявиться. Для простоты мы будем писать пока S вместо \bar{S}_0 и a вместо e^{S_1} и исследуем стационарное решение. Тогда в рассматриваемом приближении

$$u = ae^{\frac{i}{\hbar} S}.$$

Таким образом (264') и (265') принимают следующий вид:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 + V(x) = E, \quad (269)$$

$$0 = \frac{d}{dx} \left(a^2 \frac{dS}{dx} \right), \quad (270)$$

и, следовательно,

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} = \pm \frac{dS}{dx}, \quad (271)$$

где

$$S = \pm \int p(x) dx.$$

При этом мы ещё можем распорядиться нижним пределом интеграла в (271), а двойному знаку соответствуют два различных частных решения уравнения (269). Отсюда следует

$$\begin{aligned} a^2 \frac{dS}{dx} &= \text{const} = c^2, \\ a &= \frac{c}{\sqrt{p(x)}} = \frac{c}{\sqrt{2m(E - V(x))}}. \end{aligned} \quad (272)$$

Итак, общее решение уравнений (269) и (270) гласит:

$$u = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_{a_1}^x p(x) dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{a_2}^x p(x) dx} \quad (273)$$

Это решение теряет силу вблизи точек, где $p(x)$ обращается в нуль. В областях, не достижимых по классическим траекториям, где $E - V(x)$ отрицательно, а $p(x)$, следовательно, чисто мнимо, также существует решение в форме (273). Мы, ради ясности, запишем решение для этой области в виде

$$u = \frac{C'_1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{a_1}^x |p(x)| dx} + \frac{C'_2}{\sqrt{|p(x)|}} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_{a_2}^x |p(x)| dx} \quad (273')$$

Одного рассмотрения дифференциальных уравнений (269) и (270) геометрической оптики (классической механики) ещё не достаточно, чтобы составить правильное решение из частных решений (273) и (273') вблизи критической точки возврата, где $p(x) = 0$. Под «правильным» решением здесь следует понимать, что эти различные частные решения должны аппроксимировать одно и то же частное решение точного волнового уравнения

$$\hbar^2 \frac{d^2 u}{dx^2} + p^2(x) u = 0$$

в различных областях, где $p^2(x) > 0$ и $p^2(x) < 0$. По крайней мере, вблизи точек возврата неизбежно приходится использовать строгое волновое уравнение.

Поднятый здесь не совсем простой математический вопрос был подробно исследован Крамерсом и его учениками¹⁾. Они получили следующий результат: предполо-

¹⁾ Н. А. Крамерс, *Zs. f. Phys.*, **39**, 828, 1926; А. Зваан, *Dissert.*, Utrecht, 1929, см., в частности, гл. III, § 2; К. Ф. Ниссен, *Ann. d. Phys.*, **85**, 497, 1928; Н. А. Крамерс и Г. Р. Итманн, *Zs. f. Phys.*, **58**, 217, 1929, в особенности стр. 221 и 222.

жим, что $V(x)$ непрерывно в точке возврата (это даёт возможность использовать комплексную плоскость как вспомогательное средство при доказательстве). Пусть далее справа от точки возврата $x=a$, т. е. при $x>a$, $p^2(x)>0$, а при $x<a$, напротив, $p^2(x)<0$. Тогда, по Крамерсу, имеем следующее «правильное решение»:

$$\left. \begin{aligned} u(x) &= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^a |p(x)| dx} && \text{для } x < a, \\ u(x) &= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} 2 \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right] && \text{для } x > a. \end{aligned} \right\} \quad (274)$$

В более общем виде

$$\left. \begin{aligned} u(x) &= \frac{C}{i \sqrt{|p(x)|}} e^{+\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p(x)| dx} + \frac{1}{2} \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p(x)| dx} && \text{для } x < a, \\ u(x) &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{i \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right]} && \text{для } x > a. \end{aligned} \right\} \quad (275)$$

Образуя вещественную часть обоих выражений (275), что всегда допустимо, снова приходим к (274). Выделение мнимой части приводит также к правильному решению. Второй член в первом выражении (275) настолько мал по сравнению с первым, что лежит в пределах ошибок самого асимптотического разложения. Для многих целей им можно просто пренебречь. Однако, во всех вопросах, где не только модуль $u(x)$, но и фаза $u(x)$ играет существенную роль, отбрасывание этого члена приводит к ошибке. В частности, только благодаря ему поток, образованный для $x < a$, равен потоку для $x > a$ в соответствии с требованием уравнения непрерывности.

Вблизи второй точки возврата $b > a$, слева от которой лежит разрешённая область, аналогично имеем:

$$\left. \begin{aligned} u(x) &= \frac{C'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_b^x |p(x)| dx} && \text{для } x > b, \\ u(x) &= \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} 2 \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right] && \text{для } x < b. \end{aligned} \right\} \quad (275')$$

Теперь мы можем сформулировать квантовые условия для того случая, когда область, в которой $p^2(x) > 0$, при рассматриваемом значении энергии состоит из одного непрерывного интервала $a < x < b$. Мы вводим это предположение. Как при $x = -\infty$, так и при $x = +\infty$ функция $u(x)$ должна оставаться ограниченной. Поэтому в обеих областях, $x < a$ и $x > b$, следует исключить экспоненциально нарастающие частные решения и оставить там только спадающие (весьма круто) решения. Для этого, согласно (275) и (275'), необходимо, чтобы для всех x в интервале $a < x < b$

$$C \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right] = C' \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right].$$

Это возможно только тогда, когда (постоянная) сумма обеих фаз равна целому кратному π :

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx - \frac{\pi}{2} = n\pi.$$

Обозначая

$$J = 2 \int_a^b p(x) dx = \oint p(x) dx, \quad (276)$$

имеем

$$\frac{1}{\hbar} J = \left(n + \frac{1}{2} \right) 2\pi, \quad J = \left(n + \frac{1}{2} \right) h. \quad (277)$$

Кроме того

$$C' = (-1)^n C.$$

Это равносильно тому, что n означает число корней собственной функции. Действительно, когда x изменяется от a до b , фаза

$$\frac{1}{h} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}$$

возрастает от $-\frac{\pi}{4}$ до $\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi - \frac{\pi}{4}$, следовательно, косинус n раз принимает значение 0.

Результат (277) приводит к правилу квантования старой квантовой теории, но с «полуцелым квантованием». Это означает, что фазовый интеграл старой квантовой теории равняется полуцелому кратному h . Оказывается, таким образом, что это правило квантования даёт лучшее приближение к волновой механике, чем квантование в целых числах. Из сказанного выше, это следует также и для систем со многими степенями свободы, если переменные для них разделяются. При этом, однако, особо предполагается *осцилляторный характер* рассматриваемой степени свободы, т. е. предполагается, что в определённом интервале каждому значению рассматриваемой координаты q соответствуют два значения скорости частицы \dot{q} , отличающиеся друг от друга знаком, так что каждая точка этого интервала в течение полного периода проходится два раза; тогда как q -точки вне рассматриваемого интервала не должны быть достижимы для механических траекторий с теми же значениями постоянных интегрирования. Осцилляторный тип степеней свободы противоположен *ротационному типу*, примером которого может служить угловая координата (прецессионное движение вокруг неподвижной в пространстве оси). Мы увидим, что в этом случае (поскольку речь идёт об орбитальном движении частицы, а не о спине) волновая механика приводит к целочисленному квантованию.

Если для частицы с одной и той же полной энергией имеется больше, чем один разрешённый классической механикой интервал, то волновая механика приводит к своеобразным явлениям, которые основаны на том, что, согласно (275), волновая функция в классически недости-

жимой области не равна точно нулю, а только мала. В то время как в классической механике «потенциальный барьер» конечной высоты совершенно разделяет две области для частицы с определённой полной энергией, волновая функция может «просочиться» из одной области в другую, а стационарное решение будет даже иметь в обеих областях по порядку величины одинаковую плотность¹⁾. Это обстоятельство имеет фундаментальное значение для многочисленных применений квантовой теории²⁾. Мы ещё вернёмся к нему в части II, § 5, в связи с релятивистской квантовой теорией.

Что касается условия (268"), то вдали от точек возврата оно выполняется тем лучше, чем больше квантовое число n . Мы можем теперь нормировать наши собственные функции, причём следует заметить, что при больших квантовых числах фаза

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}$$

представляет собой быстро изменяющуюся функцию. Поэтому теми интегралами, которые содержат быстро изменяющуюся фазу, можно пренебречь по сравнению с другими, содержащими только медленно колеблющуюся или совсем постоянную фазу. В этом приближении собственные функции ортогональны. Для нормировки получаем условие

$$4C^2 \int_a^b \frac{dx}{p(x)} \cos^2 \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right] = 1$$

¹⁾ Прямое обнаружение частицы на потенциальном барьере посредством измерения координаты здесь всегда связано с такой неопределённостью сообщённой частице энергии, что *после* такого добавка энергии частица и классически могла бы достигнуть запрещённой области.

²⁾ Ср. Н. Ф. Мотт, *Волновая механика и физика ядра*, ОНТИ, 1936; а также Г. Бете и А. Зоммерфельд, *Электронная теория металлов*, ОНТИ, 1938; и особенно Е. Schrödinger, *Berl. Ber.*, 1929, стр. 668.

или

$$2C^2 \int_a^b \frac{dx}{p(x)} = 2C^2 \int_a^b \frac{dx}{mx} = \frac{C^2}{m\omega} = 1,$$

если [принимая во внимание определение (276) фазового интеграла J]

$$\frac{1}{\omega} = 2 \int_a^b \frac{dx}{\dot{x}} = 2m \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2m(E - V(x))}} = \frac{\partial J}{\partial E} \quad (278)$$

означает период классического движения. Итак,

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{m\omega_n}{p_n(x)}} 2 \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{a_n}^x p_n(x) dx - \frac{\pi}{4} \right] \quad (279)$$

представляют собой нормированные функции. Построим теперь матрицу x_{nm} :

$$\begin{aligned} x_{nm} = \int x u_n u_m dx &= \int x \sqrt{\frac{m\omega_n}{p_n(x)}} \sqrt{\frac{m\omega_m}{p_m(x)}} \times \\ &\times 2 \left\{ \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{a_n}^x p_n(x) dx - \frac{1}{\hbar} \int_{a_m}^x p_m(x) dx \right] + \right. \\ &\left. + \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{a_n}^x p_n(x) dx + \frac{1}{\hbar} \int_{a_m}^x p_m(x) dx - \frac{\pi}{2} \right] \right\} dx. \end{aligned}$$

Вторым членом можно будет пренебречь по сравнению с первым, так как он содержит сумму фаз и поэтому осциллирует значительно быстрее, чем первый член, в который входит разность фаз. Далее, все величины будут сравнительно медленно изменяться с квантовым числом. Поэтому все разности вида $F_n - F_m$ можно заменить дифференциалами $\frac{\partial F}{\partial J} (n - m)$, где J снова обозначает фазовый интеграл (276). Дифференцирование по нижнему пределу интеграла $\int_a^x p(x) dx$ ничего не вносит,

так как при $x=a$ подинтегральное выражение равно нулю. Таким образом, полагая

$$\tau = n - m, \quad (280)$$

мы получаем, как это было показано Дебаем¹⁾,

$$x_{nm} = 2 \int_a^b x \frac{m\omega}{p(x)} \cos \left(2\pi\tau \int_a^x \frac{\partial p}{\partial J} dx \right) dx.$$

Поскольку

$$\frac{\partial p}{\partial J} = \frac{\partial p}{\partial E} / \frac{\partial J}{\partial E} = \omega \frac{m}{p(x)} = \frac{\omega}{x}$$

и, следовательно,

$$\int_a^x \frac{\partial p}{\partial J} dx = \omega t,$$

получаем

$$x_{nm} = 2 \int_0^{1/2\omega} x(t) \omega \cos(2\pi\omega t) dt = \omega \int_0^{1/\omega} x(t) \cos(2\pi\omega t) dt.$$

Разложим классическое движение в ряд Фурье, полагая $x=0$ при $t=0$:

$$x = \sum_{\tau=0}^{\infty} a_{\tau} \cos 2\pi\omega t$$

и

$$a_{\tau} = 2\omega \int_0^{1/\omega} x(t) \cos(2\pi\omega\tau t) dt.$$

Итак, в предельном случае больших квантовых чисел мы получаем следующее соотношение:

$$x_{nm} = \frac{1}{2} a_{\tau} = \frac{1}{2} a_{n-m}. \quad (281)$$

Благодаря множителю $1/2$ сумма

$$x_{n,n+\tau} e^{2\pi i \nu_{n,n+\tau} t} + x_{n,n-\tau} e^{2\pi i \nu_{n,n-\tau} t}$$

¹⁾ Р. Деbye, *Phys. Zs.* 28, 170, 1927.

переходит как раз в

$$a_{\tau} \cos 2\pi\omega t.$$

Точно таким же образом можно вместо координатной матрицы вычислить матрицу импульсов. Одновременно этот вывод устанавливает связь с первоначальной формой боровского принципа соответствия.

Путём суперпозиции нескольких собственных функций в области больших квантовых чисел можно легко построить волновой пакет, который совершает периодическое движение вблизи классического пути. Этот пакет описывает состояние, при котором приближённо существует траектория частицы^{1,2)}. Пусть пакет охватывает состояния от $n-k$ до $n+k$. Время t , в течение которого пакет проходит мимо определённого места, обладает неточностью Δt , задаваемой выражением

$$\omega \Delta t \sim \frac{1}{k},$$

а так как

$$\Delta E = \frac{\partial E}{\partial J} \Delta J = \omega k h,$$

то

$$\Delta E \Delta t \sim h. \quad (282)$$

С другой стороны, если ввести в качестве циклической переменной $\omega t + \delta_0 = w$, то

$$\Delta J \Delta w \sim h. \quad (282')$$

Здесь, мы предположили, что в волновой пакет входит большое число состояний, иначе фаза w совсем потеряет свой смысл.

Следует, однако, отметить, что для системы подобного рода можно ввести в качестве оператора (функция от p и q), если не w , то, во всяком случае, $e^{i w}$ и точно так же J^3). При этом J является эрмитовым, а $e^{i w}$ уни-

¹⁾ P. Debye, *Phys. Zs.*, 28, 170, 1927.

²⁾ C. G. Darwin, *Proc. Roy. Soc.*, London (A), 117, 258, 1927, и, в частности § 8.

³⁾ P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.*, London (A), 111, 279, 1926.

тарным оператором. Оба оператора удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$Je^{i\omega} - e^{i\omega}J = e^{i\omega}h \quad \text{или} \quad Je^{i\omega} = e^{i\omega}(J+h), \quad (283a)$$

откуда при умножении слева на $e^{-i\omega}$, равно как и при умножении справа на $e^{-i\omega}$, следует

$$e^{-i\omega}J - Je^{-i\omega} = e^{-i\omega}h, \quad \text{или} \quad Je^{-i\omega} = e^{-i\omega}(J-h). \quad (283b)$$

Мы, однако, не будем использовать эти операторы в приложениях.

Существенно, что знание фазы периодического движения частицы и знание стационарного состояния взаимно исключают друг друга. Фаза движения частицы (на траектории) в стационарном состоянии не существует, ибо каждая попытка обнаружить её перебрасывает систему в другое стационарное состояние. Только в предельном случае больших квантовых чисел плотность группы волн из многих стационарных состояний может изменяться с течением времени в согласии с классической траекторией. Эта возможность вытекает уже из следующих простых соображений. Вследствие соотношений неопределённости волновой пакет в фазовом пространстве занимает по крайней мере площадь h , тогда как классическая траектория с энергией E_n , n -го состояния, охватывает в фазовом пространстве площадь nh . Только если n большое число, эта площадь велика по сравнению с h . Только в этом случае, следовательно, действительно может существовать пакет плотности, совершающий обращение по классическому пути.

Мы должны ещё разобрать, как ведёт себя подобный пакет за длительный промежуток времени. При этом существенно, что частоты, входящие в выражение плотности пакета

$$\frac{E_{n+\tau} - E_{n+\sigma}}{h},$$

где $-k \leq \tau \leq +k$, $-k \leq \sigma \leq +k$ в общем случае не равны точно целым кратным $(\tau - \sigma)\omega$ основной частоты, как это было бы при классической периодической траектории, ибо классическая частота, вообще говоря, зависит от зна-

чения фазового интеграла. Мы можем приближённо положить

$$\frac{1}{h} (E_{n+\tau} - E_n) = \tau \omega + \frac{1}{2} h \frac{\partial \omega}{\partial J} \tau^2,$$

$$\frac{1}{h} (E_{n+\tau} - E_{n+\sigma}) = (\tau - \sigma) \omega + \frac{1}{2} h \frac{\partial \omega}{\partial J} (\tau^2 - \sigma^2).$$

Как показал Дарвин, из этого следует, что к неопределённости $1/k$ фазы добавляется ещё новая неопределённость $kh \frac{\partial \omega}{\partial J} t$. Итак, за время

$$\Delta t \sim \frac{1}{kh \frac{\partial \omega}{\partial J}} \quad (284)$$

пакет целиком размазывается по всей орбите, и фаза полностью теряется. Это происходит после

$$N = \omega \Delta t \sim \frac{\omega}{kh \frac{\partial \omega}{\partial J}} \quad (284')$$

оборотов. Волновой пакет может длительно удерживаться, не размазываясь, только для специальных систем, когда частота ω совершенно не зависит от начальных условий. Так, например, это соблюдается для гармонического осциллятора или при движении электрона в плоскости под влиянием однородного магнитного поля, перпендикулярного к этой плоскости. Первый из этих случаев был рассмотрен Шредингером¹⁾, второй — Кеннардом²⁾ и Дарвином³⁾. В обоих случаях были даны точные решения для волновых групп с такими свойствами.

В заключение следует указать, что прежняя квантовая теория вообще могла сделать определённые высказывания о стационарных состояниях только в частном случае многократно периодических систем, тогда как в волновой механике проблема собственных значений имеет решение всегда. Даже и в этом общем случае, как мы видели, всегда можно построить волновые пакеты, которые движутся вдоль траекторий классической механики. С те-

¹⁾ E. Schrödinger, *Naturwissensch.*, 14, 664, 1926.

²⁾ E. H. Kennard, *Zs. f. Phys.*, 44, 326, 1927.

³⁾ C. G. Darwin. *l. c.* прим. 3, стр. 174.

чением времени, однако, всегда проходит диффузия волнового пакета (волновой пакет расплывается). По этой причине тот факт, что плотность такого пакета содержит только дискретные частоты, не связан непосредственно с простой периодичностью траекторий классической механики за большие промежутки времени. Периодические соотношения классической механики, как известно, очень сложны (например, для проблемы трёх тел). Для применений волновой механики к атомным системам это в силу вышеизложенного не имеет, очевидно, никакого значения, что явилось счастливым обстоятельством для волновой механики.

§ 13. Функция Гамильтона, допускающая группу преобразований. Момент количества движения и спин.

Если оператор Гамильтона инвариантен относительно некоторой группы преобразований (трансформаций) переменных, то из каждого решения $u_n(q)$ волнового уравнения можно получать новые решения, применяя к $u_n(q)$ преобразования этой группы. Пусть T — преобразование группы, H — оператор Гамильтона, f — любая функция, $u_n(q)$ — решение уравнения

$$Hu(q) = Eu(q).$$

Равенство

$$T(Hf) = H(Tf)$$

справедливо для любого f , откуда следует, что функция

$$v(q) = Tu(q)$$

¹⁾ О связи волновой механики с теорией групп имеются обширные руководства: Н. Weyl, *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, 2 Aufl., Leipzig, 1931; E. Wigner, *Gruppentheorie und ihre Anwendungen auf die Quantenmechanik der Atome*, Berlin, 1931; Ван-дер-Варден, *Метод теории групп в квантовой механике*, Харьков, 1938. Мы даём здесь лишь весьма сжатый очерк этого предмета и ссылаемся при всех доказательствах и во всех частных вопросах на эти учебники.

тоже удовлетворяет уравнению

$$Hv(q) = Ev(q).$$

Если определённому значению энергии соответствует конечное число, например, h собственных функций (h -кратное вырождение), то h -мерное векторное пространство, принадлежащее собственному значению E , имеет базис u_1, u_2, \dots, u_h , так что каждое решение уравнения

$$Hv = Ev$$

можно представить в форме

$$v = \sum_k c_k v_k.$$

Преобразования T нашей группы, применённые к u_1, u_2, \dots, u_h , преобразуют это векторное пространство *линейно* таким образом, что последовательное применение двух различных преобразований T равносильно двум соответствующим отображениям. Чтобы сохранить согласие с законом матричного умножения, целесообразно при этом принять следующее определение. Если над переменными q функции $u(q)$ производится преобразование T , определяемое переходом к новым переменным $q'_p = f_p(q_1, \dots, q_f)$, то этому преобразованию переменных q сопоставляется оператор T , преобразующий функцию $u(q_1, \dots, q_f)$ в функцию $u'(q_1, \dots, q_f)$:

$$Tu \equiv u',$$

причём $u'(q'_1, \dots, q'_f) = u(q_1, \dots, q_f)$, и следовательно,

$$u'(Tq) = u(q)$$

или

$$u'(q) = u(T^{-1}q).$$

Только при таком определении применению двух операторов в последовательности: сначала T_2 , потом T_1 соответствует *такая же* последовательность преобразований переменных q . Действительно, пусть

$$T_2 u(q) = u'(q) = u(T_1^{-1}q),$$

заменяя q на $T_1^{-1}q$, получаем

$$(T_1 T_2)u = u' (T_1^{-1}q) = u (T_2^{-1} T_1^{-1}q) = u ((T_1 T_2)^{-1}q),$$

как и должно быть.

Введём матричную запись

$$(Tu_l) = \sum_{k=1}^n u_k c_{kl}. \quad (285)$$

Тогда

$$c_{kl}(T_1 T_2) = \sum_m c_{km}(T_1) c_{ml}(T_2) \quad (286)$$

и соответственно в матричной записи

$$c(T_1 T_2) = c(T_1) c(T_2). \quad (286')$$

Мы будем говорить, что соответствующие линейные отображения образуют *представление* группы. Различным преобразованиям группы могут, конечно, в представлении соответствовать одинаковые линейные отображения. Если при преобразовании T детерминант новых переменных $q'_r = f_r(q_1, \dots, q_l)$ по отношению к старым q_r равен единице, и, кроме того, все q'_r вещественны одновременно с q , то для преобразования

$$Tv(q_1, \dots, q_l) = v(f_1(q), f_2(q), \dots, f_l(q))$$

получаем

$$\int v_k^* v_l dq \equiv \int (Tv_k)^* (Tv_l) dq.$$

В этом случае матрицы $c(T)$ унитарны для любого T , и представление тогда тоже называют унитарным. Нормированная ортогональная система переходит в этом случае опять в нормированную ортогональную систему.

Существенное значение имеет понятие *редукции* (приведения) представлений. Представление называется *приводимым*, если существует инвариантное подпространство меньшего числа измерений, чем первоначальное пространство представления. Это значит, что при надлежащем выборе базис линейно независимых функций u_1, \dots, u_g ($g < h$), образующих только часть полного базиса u_1, \dots, u_h , трансформируется при преобразованиях сам в себя. Полная

матрица $c(T)$ имеет при таком выборе базиса вид

$$c = \begin{pmatrix} a & r \\ 0 & b \end{pmatrix}, \quad (287)$$

где a g -мерно, а b $(h-g)$ -мерно. Если не существует таких инвариантных подпространств, то представление называется *неприводимым*. Изменение базиса означает трансформацию $c' = ScS^{-1}$ матрицы представления. Два представления, которые различаются друг от друга только такой трансформацией, называются эквивалентными. Если c — унитарная матрица, то из уравнения (287) следует, что, изменяя базис, можно обратить r в нуль, и тогда говорят, что представление c *распадается*. Для конечных групп можно показать, что каждое представление эквивалентно унитарному представлению, и поэтому каждое приводимое представление распадается. Для непрерывных групп это удаётся не всегда и выполнимо только для определённого класса непрерывных групп: так называемых полупростых групп. Группа вращений принадлежит к этому классу, так же как и группа всех линейных преобразований с детерминантом, равным единице, причём последнее ограничение существенно. В квантовой механике мы имеем дело только с унитарными представлениями и поэтому не будем рассматривать усложнений, возникающих в общем случае.

Каждое представление (D) группы распадается на неприводимые представления

$$(D) = (D_1) + (D_2) + \dots,$$

причём можно показать, что это разложение однозначно. Степень вырождения собственного значения энергии E совпадает со степенью неприводимого представления. Вырождение, соответствующее неприводимому представлению, не может быть снято с помощью непрерывного изменения оператора Гамильтона, пока он инвариантен по отношению к группе (в отличие от случайных вырождений, соответствующих более высоким степеням приводимого представления). Если, однако, изменить оператор Гамильтона так, чтобы он был инвариантен только по отношению к некоторой подгруппе основной группы, то по отношению к этой меньшей группе представление будет

в общем случае приводимо. Для того чтобы представление при этом распалось, необходимо изменить выбор базиса. Этот процесс называют также приведением первоначального представления по отношению к подгруппе. Ему соответствует (в общем случае) распадение исходного уровня энергии E на различные уровни, если в гамильтониан введена возмущающая функция, которая инвариантна только по отношению к подгруппе.

Из двух представлений (D_1) и (D_2) степени h_1 и h_2 можно образовать произведение $(D_1 \times D_2)$ —представление степени $h_1 h_2$, которое строится следующим образом. Из базиса u_k ($k=1, 2, \dots, h_1$), принадлежащего (D_1) , и базиса v_l ($l=1, 2, \dots, h_2$), принадлежащего (D_2) , образуют $h_1 h_2$ произведений $u_k v_l$. Когда u_k испытывает линейное отображение $D_1(T)$, а v_l —линейное отображение $D_2(T)$, то произведения $u_k v_l$ также подвигаются линейному отображению, которое и определяет произведение $(D_1 \times D_2)$. В частности, может быть $(D_1) = (D_2)$. Произведение $(D_1 \times D_2)$ в общем случае, разумеется, приводимо, даже если (D_1) и (D_2) были неприводимы. Изменением выбора базиса $h_1 h_2$ -мерного пространства можно тогда добиться распада $(D_1 \times D_2)$, причём неприводимые составные части могут быть отличны от (D_1) и (D_2) . Такое образование произведения представлений осуществляется всегда при соединении независимых систем.

Для непрерывных групп особое значение имеют бесконечно малые преобразования, близкие к тождественному отображению. Эти преобразования образуют линейное многообразие—векторное пространство с числом измерений, равным числу независимых параметров группы (например, для группы вращений в трёхмерном пространстве—трёхмерное векторное многообразие). Действительно, из $T(0, \dots, 0) = I$ следует

$$T(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_r) = I + \varepsilon_1 \vec{\omega}_1 + \varepsilon_2 \vec{\omega}_2 + \dots + \varepsilon_r \vec{\omega}_r,$$

поскольку зависимость T от ε непрерывна. Здесь $\vec{\omega}_1, \vec{\omega}_2, \dots, \vec{\omega}_r$, так же как и T , являются операторами, которые применяются к аргументам q собственных функций. Поскольку эти преобразования образуют группу, скобка Пуассона $[\vec{\omega}_p, \vec{\omega}_q] = \vec{\omega}_p \vec{\omega}_q - \vec{\omega}_q \vec{\omega}_p$ может быть выра-

жена через сами $\vec{\omega}$ с характерными для данной группы коэффициентами:

$$[\vec{\omega}_p, \vec{\omega}_q] = \sum_{s=1}^r c_{pq,s} \vec{\omega}_s. \quad (288)$$

Эти коэффициенты должны только удовлетворять известным соотношениям, вытекающим из тождества

$$[[\vec{\omega}_p, \vec{\omega}_q] \vec{\omega}_r] + [[\vec{\omega}_q, \vec{\omega}_r] \vec{\omega}_p] + [[\vec{\omega}_r, \vec{\omega}_p] \vec{\omega}_q] \equiv 0.$$

При введённом выше правиле расположения трансформаций переменных и соответствующих операторов, действующих на собственные функции, они удовлетворяют одинаковым перестановочным соотношениям, и можно поэтому не делать между ними никакого различия в обозначениях. Инвариантность оператора Гамильтона по отношению к рассматриваемой группе находит своё выражение в коммутативности $\vec{\omega}$ и H :

$$\vec{\omega}_p H - H \vec{\omega}_p = 0,$$

точно так же, как и для оператора T в случае конечных трансформаций. Это равносильно тому, что $\vec{\omega}_p$, как матрицы, не зависят от времени, т. е. являются интегралами движения. Если T унитарны, то матрицы $\vec{\omega}_p$ эрмитовы с точностью до множителя i (ср. § 10, стр. 131). Каждому представлению группы принадлежит система матриц для $\vec{\omega}_k$, которые удовлетворяют соотношениям (288).

Приведём пример. Для группы преобразований, сдвигающих координаты $x_k^{(a)}$ ($k=1, 2, 3$) на величину A_k $x_k^{(a)} = x_k^{(a)} + A_k$ (A_1, A_2, A_3 — непрерывные параметры), имеем:

$$\vec{\omega}_k = \sum_a \frac{\partial}{\partial x_k^{(a)}},$$

что соответствует с точностью до множителя \hbar/i полному импульсу системы. Действительно, инвариантность функции Гамильтона по отношению к этой группе означает, что потенциальная энергия системы зависит только от взаимных расстояний частиц.

Теперь мы перейдём к рассмотрению группы вращений координатного пространства, выполняемых одновре-

менно для всех частиц системы. Здесь можно применить два различных метода. Можно исходить сначала из бесконечно малых преобразований, найти форму для операторов $\vec{\omega}_k$, описывающих бесконечно малые вращения, и, основываясь на их перестановочных соотношениях, построить чисто алгебраическим путём соответствующие матрицы представления. Или же можно попытаться найти представление посредством анализа группы конечных вращений. Оба метода дополняют друг друга. Мы рассмотрим сначала первый метод.

В качестве трёх независимых бесконечно малых вращений трёхмерного пространства мы выберем вращения вокруг координатных осей

$$\delta x_1 = 0, \quad \delta x_2 = -\varepsilon_1 x_3, \quad \delta x_3 = \varepsilon_1 x_2; \quad (289)$$

два других бесконечно малых вращения получаются из записанного циклической перестановкой. С помощью элементарных кинематических соображений (предельный переход от конечных вращений к бесконечно малым) получаем перестановочные соотношения, характерные для бесконечно малых вращений

$$\vec{\omega}_1 \vec{\omega}_2 - \vec{\omega}_2 \vec{\omega}_1 = \vec{\omega}_3, \dots, \quad (290)$$

причём операторы $\vec{\omega}$, или соответствующие линейные отображения определяются так, чтобы, например, к преобразованиям (289) принадлежал оператор $I + \varepsilon_1 \vec{\omega}_1$. Эти соотношения должны выполняться для всех представлений группы вращений. Так как в дальнейшем мы будем рассматривать также зеркальные отображения, то подчеркнём, что $\vec{\omega}$ ведут себя по отношению к этим преобразованиям, как антисимметричные тензоры, а не как векторы.

Вводя обозначения $\vec{\omega}_{23}, \vec{\omega}_{31}, \vec{\omega}_{12}$ вместо $\vec{\omega}_1, \vec{\omega}_2, \vec{\omega}_3$, причём $\omega_{ik} = -\omega_{ki}$, мы можем переписать (290) в виде

$$\vec{\omega}_{ik} \vec{\omega}_{lm} - \vec{\omega}_{lm} \vec{\omega}_{ik} = \delta_{kl} \vec{\omega}_{im} + \delta_{lm} \vec{\omega}_{ki} - \delta_{il} \vec{\omega}_{km} - \delta_{km} \vec{\omega}_{il} \quad (290')$$

($\delta_{ik} = 0$ при $i \neq k$ и $\delta_{ik} = 1$ при $i = k$). Такая форма перестановочных соотношений для бесконечно малых вращений верна также и для n -мерного пространства, и мы будем

ею пользоваться ниже при рассмотрении группы преобразований Лоренца.

Рассмотрим одну частицу. В соответствии с нашими предыдущими определениями бесконечно малому вращению (289) принадлежит оператор $1 + \epsilon \vec{\omega}_1$ (или $1 + \epsilon \vec{\omega}_{23}$), который переводит $u(x_1, x_2, x_3)$ в $u(x_1, x_2 + \epsilon x_3, x_3 - \epsilon x_2)$, так что

$$\vec{\omega}_1 u = - \left(x_2 \frac{\partial u}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial u}{\partial x_2} \right).$$

В случае многих частиц координаты всех частиц должны претерпевать одинаковое вращение:

$$\vec{\omega}_1 u = - \sum_r \left(x_2^{(r)} \frac{\partial u}{\partial x_3^{(r)}} - x_3^{(r)} \frac{\partial u}{\partial x_2^{(r)}} \right),$$

где суммирование производится по всем частицам. Поскольку поступательный импульс $p_k^{(r)}$ представляется оператором $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k^{(r)}}$, $\vec{\omega}$ связано простым соотношением с суммарным моментом количества движения

$$\begin{aligned} P_1 &= \sum_r x_2^{(r)} p_3^{(r)} - x_3^{(r)} p_2^{(r)} = \\ &= \frac{\hbar}{i} \sum_r \left(x_2^{(r)} \frac{\partial}{\partial x_3^{(r)}} - x_3^{(r)} \frac{\partial}{\partial x_2^{(r)}} \right), \end{aligned} \quad (291)$$

а именно

$$\vec{\omega}_k = - \frac{i}{\hbar} P_k. \quad (292)$$

Это снова подтверждает, что $\vec{\omega}$ отличается от эрмитова оператора множителем i . Из перестановочных соотношений (103) для p_k и q_k следует

$$P_1 P_2 - P_2 P_1 = - \frac{\hbar}{i} P_3. \quad (293)$$

При этом, однако, особенно существенно указать на то, что существование интегралов трёх компонент момента количества движения, которые с точностью до чисто мнимого множителя совпадают с операторами бесконечно малых вращений $\vec{\omega}$, может быть доказано независимо от перестановочных соотношений (103), причём перестановочные соотношения для $\vec{\omega}$ вытекают непосредственно

из кинематики группы вращения. Это справедливо также относительно следующих перестановочных соотношений:

$$[\vec{\omega}_k, C] = 0 \text{ и } [P_k, C] = 0 \quad (294)$$

для любого скаляра C , а также

$$[\vec{\omega}_1, A_2] = -[\vec{\omega}_2, A_1] = A_3 \quad (295)$$

и соответственно

$$[P_1, A_2] = -[P_2, A_1] = -\frac{\hbar}{i} A_3 \quad (295')$$

для компонент любого векторного оператора \vec{A} . При этом предполагается, что C и \vec{A} суть функции только от P_k и q_k , причём эти функции не содержат постоянных векторов. Эти перестановочные соотношения можно получить из более общих соотношений, справедливых для конечных вращений:

$$TC = CT \text{ или } TCT^{-1} = C \quad (296)$$

и

$$TA'_k = A_k T \text{ или } A'_k = T^{-1} A_k T, \quad (297)$$

в качестве предельного случая, считая вращения бесконечно малыми. Первое соотношение означает *инвариантность* C (как в случае оператора Гамильтона), второе — *ковариантность* A относительно вращений. Существование такой унитарной трансформации T следует уже из того, что совокупность компонент A'_k имеет те же собственные значения и удовлетворяет тем же перестановочным соотношениям, как и A_k . На основании (291) и фундаментальных перестановочных соотношений (103) можно показать, что из них следует также (296). В частности, эти соотношения верны для $A_k = p_k^{(r)}$ или $A_k = q_k^{(r)}$, далее, (294) справедливо для $C = P^2 = P_1^2 + P_2^2 + P_3^2$, что следует также непосредственно из (293):

$$P^2 P_k - P_k P^2 = 0. \quad (298)$$

Отсюда следует, что P^2 и одна из компонент P_k могут быть одновременно приведены к диагональному виду.

Легко найти элементарным, чисто алгебраическим путём все конечные эрмитовы матрицы, которые удовле-

творяют соотношениям (293)¹⁾. Приводя P^2 и P_3 к диагональной форме, находим, что собственные значения P^2 равны

$$P^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad (299)$$

где j — целые ($j=0, 1, 2, \dots$) или полуцелые ($j=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$) неотрицательные числа. Данному собственному значению P^2 принадлежит $2j+1$ различных собственных значений компоненты P_3 , а именно:

$$P_3 = \hbar m, \quad \text{где} \quad -j \leq m \leq j, \quad (300)$$

причём m изменяется от одного собственного значения к другому на одну единицу и является одновременно с j целым или полуцелым. При фиксированном j получаем следующие матрицы для P_1 и P_2 :

$$\left. \begin{aligned} (P_1 + iP_2)_{m+1, m} &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} = \hbar \sqrt{(j-m)(j+1+m)}, \\ (P_1 - iP_2)_{m, m+1} &= (P_1 + iP_2)_{m+1, m}, \quad (P_3)_{m, m} = m\hbar. \end{aligned} \right\} \quad (301)$$

Остальные матричные элементы матриц $(P_1 - iP_2)$ и $(P_1 + iP_2)$ равны нулю. Каждому значению j соответствуют матрицы (301) некоторого представления бесконечно малых вращений. Это представление неприводимо.

Из (295) вытекают следующие выражения для координатных матриц любого вектора \vec{A} (не зависящего от векторов с определёнными численными компонентами)²⁾.

$$\left. \begin{aligned} (A_1 + iA_2)_{j+1, m+1; j, m} &= -A_{j+1, j} \sqrt{(j+m+2)(j+m+1)}, \\ (A_1 - iA_2)_{j+1, m-1; j, m} &= A_{j+1, j} \sqrt{(j-m+2)(j-m+1)}, \\ (A_3)_{j+1, m; j, m} &= A_{j+1, j} \sqrt{(j+m+1)(j-m+1)}; \end{aligned} \right\} \quad (301'a)$$

¹⁾ Ср., например: М. Born и Р. Jordan, *Elementare Quantenmechanik*, Berlin, 1931.

²⁾ Доказательство см. в книге: П. А. М. Дирак, *Основы квантовой механики*, ОНТИ, 1937 (второе издание); или М. Born и Р. Jordan, *Elementare Quantenmechanik*.

$$\left. \begin{aligned} (A_1 + iA_2)_{j, m+1; j, m} &= A_{j, j} \sqrt{(j+m+1)(j-m)}, \\ (A_1 - iA_2)_{j, m-1; j, m} &= A_{j, j} \sqrt{(j+m)(j-m-1)}, \\ (A_3)_{j, m; j, m} &= A_{j, j} m; \end{aligned} \right\} (301' b)$$

$$\left. \begin{aligned} (A_1 + iA_2)_{j-1, m+1; j, m} &= A_{j-1, j} \sqrt{(j-m)(j-m-1)}, \\ (A_1 - iA_2)_{j-1, m-1; j, m} &= -A_{j-1, j} \sqrt{(j+m)(j+m-1)}, \\ (A_3)_{j-1, m; j, m} &= A_{j-1, j} \sqrt{(j+m)(j-m)}. \end{aligned} \right\} (301' c)$$

Матричные элементы для всех остальных пар значений j, m в начальном и конечном состояниях обращаются в нуль. Эти формулы содержат правила отбора для j и m и соотношения интенсивностей мультиплетных термов ¹⁾:

Следует добавить ещё одно замечание о соединении двух систем с моментами количества движения j_1 и j_2 в одну сложную систему. Допустим, сначала, что соответствующие компоненты $P_z^{(1)}$ и $P_z^{(2)}$ одновременно приведены к диагональной форме и имеют собственные значения m_1 и m_2 , которые пробегают значения от $-j_1$ до j_1 и от $-j_2$ до j_2 . Образует суммарный импульс $P_r = P_r^{(1)} + P_r^{(2)}$

и его квадрат $P^2 = \sum_{k=1}^3 P_k^2$. При этом P_z уже имеет диа-

гональную форму, а каждое из его собственных значений

$$m = m_1 + m_2$$

имеет кратность, равную числу комбинаций, с помощью которых оно может быть представлено в виде суммы двух чисел, лежащих в интервале $(-j_1, j_1)$ и $(-j_2, j_2)$. Полагая $j_1 \geq j_2$, мы находим следующие выражения для краткости $Z(m)$ собственного значения m : для

$$\begin{aligned} j_1 - j_2 \leq m \leq j_1 + j_2, & \quad Z(m) = j_1 + j_2 - m + 1, \\ -(j_1 - j_2) \leq m \leq j_1 - j_2, & \quad Z(m) = 2j_2 + 1, \\ -(j_1 + j_2) \leq m \leq -(j_1 - j_2), & \quad Z(m) = j_1 + j_2 + m. \end{aligned}$$

¹⁾ Ср. Бете, Квантовая механика простейших систем.

Если мы теперь приведём к диагональной форме P^2 ¹⁾, т. е. j , для каждого m вместо m_1 и m_2 , то, как нам уже известно, получится ряд состояний с различными j , так что для каждого j величина m пробегает значения от $-j$ до $+j$. Если j имеет кратность $N(j)$, то общее число состояний $Z(m)$ с определённым m получается из

$$Z(m) = \sum_{j \geq m} N(j),$$

Формула справедлива при $m \geq 0$. Мы можем этим ограничиться, так как случай $m \leq 0$ не вносит ничего нового. Отсюда, далее, следует

$$N(j) = Z(j) - Z(j+1).$$

Это приводит в нашем случае к тому, что осуществляются все различающиеся между собой на единицу значения j , которые лежат в интервале

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2. \quad (302)$$

причём каждое из них встречается *только один раз*, а остальные не встречаются вовсе, что соответствует «векторной модели» старой квантовой механики. Отсюда может быть легко получена с помощью введённого ранее определения произведений двух представлений следующая форма представления группы конечных вращений

$$(D_{j_1}) \times (D_{j_2}) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (D_j). \quad (302')$$

До сих пор случаи целых и полуцелых j были совершенно равноправны. В § 6 было, однако, доказано, что обозначенное там через l вместо j квантовое число момента количества движения одной частицы в центральном поле сил имеет всегда целочисленное значение. Из (302) следует то же самое для многих частиц, причём положение не изменяется также и при включении любых сил вза-

¹⁾ Это получается для каждого m с помощью унитарной матрицы $S(m, j)$, которую можно вычислить явно. Ср. Ван-дер-Варден, *Метод теории групп в квантовой механике*, § 18; а также Н. А. Крамерс и Н. С. Бринкманн, цит. в прим. 2 на стр. 177.

имодействия между частицами (благодаря непрерывности этого включения). При обобщении, необходимым для введения спина, однако, существенно, что перестановочные соотношения матриц момента количества движения (293) так же, как и перестановочные соотношения (294), (295) допускают полуцелые значения j и m . Целочисленность j и m вытекает только из определения (291) момента количества движения в соединении с перестановочными соотношениями для координат и импульсов ¹⁾. По этой причине мы должны обобщить определение (291).

Построим теперь неприводимые представления группы конечных вращений ²⁾ (второй метод), соответствующие целым и полуцелым значениям j . При этом, однако, целесообразно вместо группы вращений в трёхмерном пространстве рассмотреть сперва группу унитарных преобразований U_2 двух комплексных переменных ξ_1, ξ_2 с детерминантом, равным единице:

$$\left. \begin{aligned} \xi'_1 &= \xi_1 \alpha - \xi_2 \beta^*, \\ \xi'_2 &= \xi_1 \beta + \xi_2 \alpha^*, \end{aligned} \right\} \quad (303)$$

где

$$\alpha \alpha^* + \beta \beta^* = 1. \quad (304)$$

Соответствующее преобразование a_1, a_2 , которое оставляет линейную форму

$$a_1 \xi_1 + a_2 \xi_2$$

инвариантной, имеет вид

$$\left. \begin{aligned} a'_1 &= \alpha a_1 + \beta a_2, \\ a'_2 &= -\beta^* a_1 + \alpha^* a_2. \end{aligned} \right\} \quad (303')$$

В силу (303), $v+1$ произведений степеней

$$\xi_1^v, \xi_1^{v-1} \xi_2, \dots, \xi_2^v$$

преобразуются между собой линейно. Они образуют тем самым представление рассматриваемой группы степени

¹⁾ Доказательство этого следствия с помощью матричного исчисления см. М. Вогн и Р. Жордан, *Elementare Quantenmechanik* стр. 164, Berlin, 1930.

²⁾ Кроме цитированных в прим. на стр. 186 учебников см. также Н. А. Крамерс, *Proc. Amsterdam*, 33, 953, 1930 и Н. С. Бринкманн, *Dissert.* Utrecht, 1932, где разобраны применения к расчёту различных матричных элементов.

$v+1$. Это представление неприводимо. Выбирая

$$\Xi_r = \frac{\xi_1^r \xi_2^{v-r}}{\sqrt{r!(v-r)!}} \quad (r=0, 1, \dots, v) \quad (305)$$

в качестве нового базисного вектора, мы получаем даже унитарное представление, так как одновременно с $\xi_1 \xi_1^* + \xi_2 \xi_2^*$ является инвариантом и $(\xi_1 \xi_1^* + \xi_2 \xi_2^*)^v$, т. е. $\sum_r \Xi_r \Xi_r^*$.

Полагая $v=2j$ и $r=j-m$, мы получим связь с прежними обозначениями. Таким образом построено представление D_j степени $2j+1$ группы унитарных преобразований с детерминантом 1. D_0 — тождественное представление, $D_{1/2}$ — сами первичные преобразования.

Связь с группой вращений в трёхмерном пространстве получается при рассмотрении D_1 . При $j=1$, $v=2$ коэффициенты c_0 , c_1 , c_2 преобразуются так, что

$$\frac{1}{2} c_0 \xi_1^2 + c_1 \xi_1 \xi_2 + \frac{1}{2} c_2 \xi_2^2$$

остаётся инвариантным. При этом определитель

$$\begin{vmatrix} c_1 & c_0 \\ c_2 & c_1 \end{vmatrix} = c_1^2 - c_0 c_2$$

является инвариантом, так как детерминант преобразования равен 1. Если положить

$$x+iy=c_2, \quad x-iy=-c_0, \quad z=c_1, \quad (306)$$

то

$$x^2+y^2+z^2=|x+iy||x-iy|+z^2=c_1^2-c_0c_2,$$

и, следовательно, отображение D_1 представляет собой обыкновенное вращение в пространстве (x, y, z) . Легко показать, что (x, y, z) преобразуются как

$$a_1 a_2^* + a_2 a_1^*, \quad i(a_1 a_2^* - a_2 a_1^*), \quad a_1 a_1^* - a_2 a_2^*,$$

если a_1 , a_2 преобразуются согласно (303'). Поскольку эти числа вещественны, речь идёт, очевидно, о вещественных вращениях. Для вращения с эйлеровыми углами θ , φ , ψ получаем следующие значения коэффициентов пре-

образования, входящих в (303) и (303'):

$$\alpha = \cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}, \quad \beta = -i \sin \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}. \quad (307)$$

В частности, при $\theta=0$ получаем вращение вокруг оси z на угол $\varphi+\psi$, причём матрица диагональна. Тожественному «вращению» соответствует не только тождественное преобразование (303), но также и преобразование

$$\xi'_1 = -\xi_1, \quad \xi'_2 = -\xi_2.$$

Следовательно, вращения представляют собой сокращённое представление U_2 , и наоборот, $D_{1/2}$ есть двузначное представление группы вращений. Рассматривая величины E_r , определённые в (305), можно с помощью (307) вычислить также общие матрицы представлений для D_l , как функции углов θ, φ, ψ ¹⁾. Они уже приведены относительно подгруппы вращений вокруг оси z . Для полных j получаются двузначные представления, для целых j — однозначные. Шаровые функции порядка l преобразуются с помощью представления D_l .

Следует отметить, что функция Гамильтона инвариантна также относительно зеркальных отображений от центра тяжести системы

$$x'_k = -x_k. \quad (308)$$

Эти зеркальные отображения перестановочны со всеми вращениями. Поэтому каждая собственная функция должна при таких отображениях просто умножаться на постоянный множитель. (Можно также представить себе, что благодаря введению внешнего магнитного поля, вырождение, связанное с группой вращений, совершенно снимается без нарушения инвариантности функции Гамильтона относительно зеркальных отображений.) Двукратное зеркальное отображение даёт тождественное преобразование. Поэтому фактор ε , определяемый равенством

$$u(-q, \dots, -q_f) = \varepsilon u(q, \dots, q_f), \quad (309)$$

¹⁾ P. Güttinger, Zs. f. Phys., 73, 169, 1931.

может быть равен только ± 1 :

$$\varepsilon = \pm 1. \quad (310)$$

Мы назовём этот множитель *характером* или *сигнатурой зеркального отображения* (Das Spiegelungsmoment или die Signatur). Терм называется чётным при $\varepsilon = +1$ и нечётным при $\varepsilon = -1$. Для одной частицы в центральном поле сил из свойств шаровых функций получается

$$\varepsilon = (-1)^l;$$

а для многих частиц:

$$\varepsilon = (-1)^{l_1 + l_2 + \dots + l_f}. \quad (311)$$

Это получается сперва только для невзаимодействующих частиц, однако, включение сил взаимодействия не может, благодаря его непрерывности, ничего изменить. Элементы матрицы координат частиц только тогда отличны от нуля, когда ε имеет различные знаки в начальном и конечном состояниях (правило Лапорта).

С этими вспомогательными средствами уже легко установить *обобщённые волновые уравнения для частиц со спином*. При этом мы сперва займёмся элементарными частицами (электроны, протоны)¹⁾. Мы будем понимать под *спином частицы её момент количества движения, не сводимый к поступательному движению материальной точки*. Модуль спина (в отличие от его отдельных компонент) мы будем считать постоянным числом. Такая точка зрения, повидимому, необходима, так как при современном состоянии квантовой теории мы вынуждены трактовать подобным образом не только спин элементарных частиц, но и спин атомных ядер (если он отличен от нуля). Повидимому, невозможно описывать состояние ядра с помощью собственной функции, содержащей пространственные координаты находящихся внутри ядра электронов. Можно, однако, описывать реакцию ядра как целого по отношению к внешним силам с помощью волновой функции, которая содержит в качестве независимой переменной, кроме координаты ядра, ещё его спино-

¹⁾ W. Pauli, Zs. f. Phys., 43, 601, 1927.

вую координату, причём ядро может пребывать в определённом возбуждённом состоянии.

Описание спина основывается на следующих предположениях: 1) Кроме орбитального момента

$$l_1 = \frac{1}{i} \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \quad (312)$$

имеется спиновый момент с компонентами s_1, s_2, s_3 , которым соответствуют операторы, действующие на волновую функцию. Эти операторы должны быть коммутативны с координатами и импульсами частиц. При этом мы считаем, что оба момента импульса измеряются в единицах \hbar . 2) Бесконечно малым вращениям соответствует применение операторов

$$\vec{\omega}_k = -i(l_k + s_k) \quad (313)$$

к собственным функциям, так что

$$P_k = \hbar(l_k + s_k) \quad (313')$$

играет роль суммарного момента импульса. Действительно: этот суммарный оператор коммутирует со всеми инвариантами вращения, если функция Гамильтона инвариантна относительно вращений и не зависит от времени. Если функция Гамильтона инвариантна только по отношению к вращениям вокруг одной оси, например оси x_3 , то остаётся всегда постоянным только P_3 . Из этих предположений чисто кинематически вытекают перестановочные соотношения (290) для $\vec{\omega}_k$, и следовательно, поскольку l_k коммутативно с s_k , перестановочные соотношения ¹⁾

$$s_1 s_2 - s_2 s_1 = i s_3, \quad (314)$$

аналогичные (293). Мы всегда рассматриваем

$$s_1^2 + s_2^2 + s_3^2$$

¹⁾ Первоначально эти перестановочные соотношения основывались просто на аналогии с перестановочными соотношениями для l_k , которые выводились из канонических перестановочных соотношений для p_k и q_k . Возможность кинематического вывода перестановочных соотношений для s_k из группы вращений была указана впервые Нейманом и Вигнером: J. v. Neumann u. E. Wigner, *Zs. f. Phys.*: 47, 203, 1927.

как заданное постоянное число, которое, как мы видели, может принимать, согласно (314), только значения $s(s+1)$ с целым или полуцелым s

$$s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 = s(s+1) \cdot I. \quad (315)$$

Поэтому мы можем ввести в волновую функцию в качестве независимой переменной, кроме пространственных координат частиц, ещё только одну из компонент s_k , например s_3 . Волновая функция приобретает тогда следующую форму:

$$\psi(x, s_3; t). \quad (316)$$

Переменная s_3 принимает здесь, как мы видели, только дискретные значения $-s, -(s-1), \dots, +s$, так что мы можем вместо (316) писать также

$$\psi(x, s_3; t) = \sum_{\mu} c_{\mu}(s_3) \psi_{\mu}(x, t); \quad (316')$$

$c_{\mu}(s_3)$ не зависят от x и t и определяются равенствами

$$c_{\mu}(s_3) = \begin{cases} 1 & \text{при } s_3 = \mu, \\ 0 & \text{при } s_3 \neq \mu. \end{cases} \quad (317)$$

$c_{\mu}(s_3)$ нормированы и ортогональны, т. е. удовлетворяют соотношениям

$$\sum_{s_3=-s}^{+s} c_{\mu}^*(s_3) c_{\mu'}(s_3) = \begin{cases} 1 & \text{при } \mu = \mu', \\ 0 & \text{при } \mu \neq \mu'. \end{cases} \quad (317')$$

В приложениях, впрочем, специальный выбор $c_{\mu}(s_3)$ в уравнениях (317) не играет роли, а существенны только соотношения (317'), которые сохраняются при вращениях системы координат.

Вообще $\psi_{\mu}^* \psi_{\mu}$ является попрежнему вероятностью в пространстве конфигураций и спина. Плотность в пространстве одних координат положения равна, таким образом,

$$\rho = \sum_{s_3} \psi^*(x, s_3; t) \psi(x, s_3; t) = \sum_{\mu} \psi_{\mu}^*(x, t) \psi_{\mu}(x, t). \quad (318)$$

Объёмный интеграл плотности не зависит от времени. Условия нормировки и ортогональности для собственных функций стационарного состояния

$$u(x, s_s) = \sum_{\mu} c_{\mu}(s_s) u_{\mu}(x)$$

имеют вид:

$$\begin{aligned} \sum_{s_s} \int dx u_n(x, s_s) u_m(x, s_s) &= \\ &= \sum_{\mu} \int u_{n\mu}^*(x) u_{m\mu}(x) dx = \begin{cases} 1 & \text{при } m=n, \\ 0 & \text{при } m \neq n. \end{cases} \quad (318') \end{aligned}$$

Компоненты тока рассматриваются в релятивистской теории.

Результат применения операторов s_1 , s_2 , s_3 к волновой функции может быть проще всего получен из их матричного представления, аналогичного (301):

$$\left. \begin{aligned} (s_1 + i s_2)_{\mu+1, \mu} &= \sqrt{(s-\mu)(s+1+\mu)}, \\ (s_1 - i s_2)_{\mu-1, \mu} &= \sqrt{(s-\mu+1)(s+\mu)}, \\ (s_3)_{\mu, \mu} &= \mu. \end{aligned} \right\} \quad (319)$$

Мы получаем вообще

$$(s_k) \psi_{\mu}(x, t) = \sum_{\mu'} \psi_{\mu'}(s_k)_{\mu', \mu}, \quad (320)$$

причём, однако, не более двух матричных элементов $(s_k)_{\mu', \mu}$ отличны от нуля. Например:

$$\begin{aligned} s_1 \psi_{\mu} &= \frac{1}{2} (s_1 + i s_2) \psi_{\mu} + \frac{1}{2} (s_1 - i s_2) \psi_{\mu} = \\ &= \frac{1}{2} \psi_{\mu-1} \sqrt{(s-\mu+1)(s+\mu)} + \\ &\quad + \frac{1}{2} \psi_{\mu+1} \sqrt{(s-\mu)(s+1+\mu)}, \end{aligned}$$

причём при $\mu = s$ исчезает второй член, при $\mu = -s$ первый. С другой стороны, имеем просто

$$s_3 \psi_{\mu} = \psi_{\mu} \mu.$$

Функция Гамильтона в общем случае содержит, кроме x , ещё s_k . Например во внешнем магнитном поле с компо-

нентами H_1, H_2, H_3 функция Гамильтона получает добавок $K(s_1 H_1 + s_2 H_2 + s_3 H_3)$, где численный множитель K обозначает отношение магнитного момента к моменту импульса частицы. Вообще форма оператора Гамильтона должна быть определена на основании аналогии с классической теорией¹⁾.

c_μ и ψ_μ в (316') преобразуются при пространственных вращениях как коэффициенты c_μ и переменные Ξ_μ инвариантной формы

$$\sum c_\mu \Xi_\mu,$$

причём, согласно (305),

$$\Xi_\mu = \frac{\xi_1^{s+\mu} \xi_2^{s-\mu}}{\sqrt{(s+\mu)!(s-\mu)!}},$$

где положено $v=2s$, $r=s-\mu$, а ξ_1, ξ_2 преобразуются согласно (303). Таким образом, преобразование ψ_μ определяется непосредственно представлением (D_s) группы вращений, которое однозначно или двужначо в зависимости от того, является ли s полуцелым или целым числом. При зеркальном отражении индексы функции ψ_μ могут оставаться неизменными, так как s , представляющее собой антисимметрический тензор, остаётся инвариантным. В случае $s=1$ функции $\psi_1, \psi_0, \psi_{-1}$ преобразуются при вращении D^{-1} их аргументов так, как преобразуются $-(x_1 - ix_2)$, x_3 , $x_1 + ix_2$ при вращении D , так что соответствующие линейные комбинации ψ_μ могут рассматриваться как компоненты векторов.

Особый интерес представляет, однако, случай $s=1/2$, потому что, как показывает опыт, он осуществляется для элементарных частиц (электронов, протонов). Согласно (317), мы получаем в этом случае

$$(s_1 + is_2)_{+1/2, -1/2} = (s_1 - is_2)_{-1/2, +1/2} = 1,$$

или, в матричной записи,

$$s_1 + is_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_1 - is_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_3 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix},$$

¹⁾ Ср. по этому вопросу Г. Бете, Квантовая механика простейших систем, § 22.

т. е., обозначая

$$s_k = \frac{1}{2} \vec{\sigma}_k, \quad (321)$$

$$\vec{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (322)$$

Если писать вместо $\psi_{+1/2}(x, t)$, $\psi_{-1/2}(x, t)$ соответственно $\psi_+(x, t)$, $\psi_-(x, t)$, а вместо $C_{+1/2}$ и $C_{-1/2}$ просто C_+ и C_- , то получается

$$\psi(x, s_s; t) = C_+ \psi_+(x, t) + C_- \psi_-(x, t). \quad (316'')$$

Далее, на основании (320), можем записать

$$\begin{aligned} \vec{\sigma}_1 \psi_+ &= \psi_-, & \vec{\sigma}_1 \psi_- &= \psi_+, \\ \vec{\sigma}_2 \psi_+ &= \psi_- i, & \vec{\sigma}_2 \psi_- &= \psi_+ (-i), \\ \vec{\sigma}_3 \psi_+ &= \psi_+, & \vec{\sigma}_3 \psi_- &= \psi_-, \end{aligned}$$

и «компоненты плотности вероятности спинового момента»

$$\left. \begin{aligned} d_1 &= \psi_+^* \vec{\sigma}_1 \psi_+ + \psi_-^* \vec{\sigma}_1 \psi_- = \psi_+^* \psi_- + \psi_-^* \psi_+, \\ d_2 &= \psi_+^* \vec{\sigma}_2 \psi_+ + \psi_-^* \vec{\sigma}_2 \psi_- = i(\psi_+^* \psi_- - \psi_-^* \psi_+), \\ d_3 &= \psi_+^* \vec{\sigma}_3 \psi_+ + \psi_-^* \vec{\sigma}_3 \psi_- = \psi_+^* \psi_+ - \psi_-^* \psi_-, \end{aligned} \right\} \quad (323)$$

преобразуются как компоненты вектора, тогда как

$$\rho = \psi_+^* \psi_+ + \psi_-^* \psi_- \quad (318')$$

остаётся инвариантным. Эти матрицы $\vec{\sigma}_k$ удовлетворяют соотношениям

$$\left. \begin{aligned} \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 &= -\vec{\sigma}_2 \vec{\sigma}_1 = i \vec{\sigma}_3, \dots, \\ \vec{\sigma}_i^2 &= \vec{\sigma}_j^2 = \vec{\sigma}_k^2 = I, \end{aligned} \right\} \quad (324)$$

которые являются частным случаем (314), (315) и обозначают, что $\vec{\sigma}_k$ перемножаются как единицы кватернионов; умноженные на i . ψ_+ , ψ_- преобразуются при пространственных вращениях, как ξ_1 , ξ_2 , введённые в (303), т. е. с помощью матрицы

$$\begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix},$$

которая выводится из (307). Как уже упоминалось,

$$\vec{\omega}_k = -i s_k = -\frac{1}{2} \vec{\sigma}_k$$

определяет преобразование (ψ_a, ψ_p) при бесконечно малых вращениях.

Обобщение на случай многих взаимодействующих между собой частиц, обладающих спином, не представляет затруднений. Вводятся собственные функции

$$\psi(x_{r1}, x_{r2}, x_{r3}, s_{r3}), \quad (325)$$

причём индекс r обозначает здесь номер частицы и пробегает значения от 1 до N , где N — число частиц. При этом каждое s_{r3} изменяется от $-s_r$ до s_r . В индексной записи собственные функции имеют вид

$$\begin{aligned} \psi(x_{rk}, s_{r3}, t) = \\ = \sum_{\mu_1, \dots, \mu_N} C_{\mu_1}(s_{13}) \dots C_{\mu_N}(s_{N3}) \psi_{\mu_1, \dots, \mu_N}(x_{11}, \dots, x_{N3}), \end{aligned} \quad (325')$$

где μ_r пробегает значения от $-s_r$ до $+s_r$. В случае одних лишь электронов каждое μ принимает только два значения $+1/2$ и $-1/2$, и соотношения (325') определяют 2^N функций. Оператор s_{rk} действует только на индекс μ_r с тем же номером r , причём совершенно так же, как в рассмотренном выше случае.

Существенное различие между сложными и элементарными частицами (электронами и протонами), так же как и обоснование значения $1/2$ для спина последних, было выяснено впервые в релятивистской квантовой механике (ср. часть II, § 2).

§ 14. Собственные функции многих одинаковых частиц¹⁾. Перестановки. Принцип Паули.

Если мы имеем дело со многими одинаковыми частицами, то появляются некоторые особенности, которые связаны с тем, что оператор Гамильтона инвариантен

¹⁾ Ср. учебники, цитированные в прим. 1, стр. 186. Обращаясь к истории вопроса, заметим следующее. Проблема многих одинаковых частиц в волновой механике была рассмотрена впервые Дираком (P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. London (A), 112, 661, 1926) (здесь ещё без спина) и Гейзенбергом (W. Heisenberg, Zs. f. Phys., 40, 501, 1926) (здесь впервые сделано важное

при любых перестановках частиц. Если частицы имеют спин, то спиновые координаты s_k должны при этом переставляться одновременно с пространственными координатами x_{rk} ($k=1, 2, 3$). Если оператор Гамильтона содержит только пространственные координаты, то, конечно, инвариантность относительно одних пространственных координат уже существует, и если зависящая от спина часть функции Гамильтона относительно мала, то такая инвариантность осуществляется приближённо. К этому обстоятельству мы вернёмся позже; сначала мы рассмотрим одновременную перестановку спиновых и пространственных переменных, по отношению к которой осуществляется *точная* инвариантность. Итак, пусть P — перестановка N чисел $1, 2, \dots, r, \dots, N$, нумерующих N одинаковых частиц; тогда из каждой собственной функции $\psi(x_{11}, \dots, x_{N3}, s_{13}, \dots, s_{N3}, t)$, применяя перестановку P , мы получим новую собственную функцию, которая принадлежит к тому же самому наблюдаемому состоянию:

$$\psi'(x_{11}, \dots, s_{N3}, t) = P\psi(x_{11}, \dots, s_{N3}, t).$$

применение к спектру He, включая спин). В обеих названных работах имеется также общая волномеханическая формулировка принципа Паули (W. Pauli, *Zs. f. Phys.*, **31**, 765, 1925). Статистика частиц с симметричными состояниями была установлена впервые Бозе (S. N. Bose, *Zs. f. Phys.*, **26**, 178, 1924) и Эйнштейном (A. Einstein, *Berl. Ber.*, 1924, стр. 261, 1925, S. 1). Статистика частиц с антисимметричными состояниями — Ферми (E. Fermi, *Zs. f. Phys.*, **36**, 902, 1926) и Дираком (l. c.). Общий случай N частиц и его связь с теорией групп разобрал полностью впервые Вигнер (E. Wigner, *Zs. f. Phys.*, **40**, 883, 1927). Применение к ядрам имеется у Гейзенберга (*там же*, **41**, 239, 1927) и Хунда (*там же*, **42**, 93, 1927). Деннисон (D. M. Dennison, *Proc. Roy. Soc. London*, (A), **115**, 483, 1927), исходя из данных о спаде ротационной теплоёмкости водорода, доказал, что протоны, так же как и электроны, имеют спин $\frac{1}{2}$ и подчиняются принципу Паули. Мотт (N. F. Mott, *там же* (A), **125**, 222, 1929) и Оппенгеймер (R. Oppenheimer, *Phys. Rev.*, **32**, 361, 1928) показали, что тип симметрии волновых функций существенен для проблемы соударений. Наряду с расчётами Мотта для удара двух одинаковых заряженных частиц, известно эмпирически из других данных, что ядра He (α -частицы) имеют симметричные состояния (ср. G. Wentzel, *NB. d. Phys.*, т. 24/1, гл. 5, Ziff. 4; Мотт, Волновая механика и физика ядра, § 5).

Действительно, для каждого оператора, симметричного относительно переменных этих частиц, и, в частности, для оператора энергии мы получим одно и то же среднее значение, если один раз вычислим его для ψ' , а другой раз для ψ . Но только такие симметричные операторы и соответствуют наблюдаемым величинам для одинаковых частиц. Вследствие полной неразличимости одной частицы от другой имеет смысл спрашивать, например, только о вероятности того, что одна из частиц находится в точке x_{1k} и имеет спин s_{1s} , другая — в точке x_{2k} и имеет спин s_{2s} , и т. д., но нельзя говорить о вероятности того, что первая частица имеет пространственные координаты и спин x_{1k} , s_{1s} , вторая — x_{2k} , s_{2s} . Первая из этих вероятностей равна

$$\sum_P P |\psi(x_{11}, \dots, s_{Ns})|^2 dx_{11} \dots dx_{Ns}, \quad (326)$$

если мы всюду считаем пространственные координаты x_{rk} определёнными с точностью до dx_{rk} , а спиновые координаты пробегают значения от $-s$ до $+s$ (для электронов значения $-1/2$ и $+1/2$).

Из общих теорем предыдущего параграфа вытекает, что стационарные состояния составной системы должны распадаться на различные системы — серии термов, которые соответствуют различным неприводимым представлениям группы перестановок. Кроме того, матричные элементы симметричных величин отличны от нуля только, если начальное и конечное состояние принадлежит одной и той же серии термов. Если представление имеет степень 1, то термы не вырождены (случайное вырождение или такое вырождение, которое связано с инвариантностью гамильтоновой функции относительно другой группы, отличной от группы перестановок, мы пока не рассматриваем); собственные функции при каждой перестановке умножаются на численный множитель. В более общем случае, когда представление имеет степень h , соответствующие уровни энергии h -кратно вырождены. В соответствующем h -мерном линейном векторном пространстве собственных функций можно найти базис из ортогональных друг другу и нормированных собственных функций

u_1, u_2, \dots, u_h , которые при перестановке P , соответствующей линейному отображению $c(P)$ представления, переходят в новые собственные функции

$$Pu_s = \sum_{r=1}^h u_r c_{rs}(P). \quad (327)$$

Представление унитарно, так как

$$\sum_{s,r} \int u_r^* u_s dx = \sum_{s,r} \int (Pu_r)^* (Pu_s) dx$$

(здесь по каждому s_r производится суммирование от $-s$ до $+s$), и функции Pu_s также ортогональны и нормированы, если таковыми были u_r . Из любой функции $f(q_1, \dots, q_N)$ (где q_r объединяет x_{1r}, x_{2r}, x_{3r} и s_{3r}) можно получить специальную функцию $v(q_1, \dots, q_N)$, которая преобразуется согласно представлению (327). Действительно, для этого достаточно образовать

$$v(q_1, \dots, q_N) = \sum_P A_P \cdot P f(q_1, \dots, q_N), \quad (328)$$

где коэффициенты A_P выбраны подходящим образом.

Специальные представления степени 1 соответствуют симметричным и антисимметричным собственным функциям. В первом случае

$$Pu(q_1, \dots, q_N) = u(q_1, \dots, q_N) \quad (329)$$

представление тождественно. Это означает, что каждому элементу группы соответствует тождество. При антисимметричном представлении следует различать чётные и нечётные перестановки. Пусть $\delta_P = 1$ для чётных и $\delta_P = -1$ для нечётных функций; тогда для антисимметричных функций имеем:

$$Pu(q_1, \dots, q_N) = \delta_P u(q_1, \dots, q_N). \quad (330)$$

Поскольку

$$\delta_{PQ} = \delta_P \cdot \delta_Q, \quad \delta_{P^{-1}} = \delta_P, \quad \delta_1 = 1,$$

мы действительно получаем представление, и для выполнения равенства (330) достаточно, чтобы u меняло знак

при перестановке каждых двух переменных. Согласно (328), из произвольной функции f получаем симметричную функцию, если положить все A_p равными 1:

$$v_{\text{symm}}(q_1, \dots, q_N) = \sum P f(q_1, \dots, q_N), \quad (328')$$

или антисимметричную функцию, если положить $A_p = \delta_p$ (т. е. ± 1)

$$v_{\text{antis.}}(q_1, \dots, q_N) = \sum_P \delta_P P f(q_1, \dots, q_N). \quad (328'')$$

Если имеются только две частицы, то симметричное и антисимметричное представления являются единственными неприводимыми и поэтому уровни энергии распадаются просто на эти две серии.

Если однажды система из N частиц находилась в определённой серии термов (которая соответствует известному неприводимому представлению $c(P)$ группы перестановок), то никакое внешнее воздействие (силовое поле, излучение) не может перевести её в другую серию термов, потому что энергия возмущения симметрична относительно частиц и её матричные элементы с начальным состоянием из рассматриваемой серии и конечным — из другой серии, обращаются в нуль. Благодаря волновому уравнению для зависящей от времени волновой функции характер симметрии, который имел место при $t=0$, сохраняется для любого времени. Поэтому говорят также о *некомбинирующих сериях термов*. При этом, однако, требует особого рассмотрения тот случай, когда число частиц N рассматриваемого сорта непостоянно, например, когда система соударяется с новой частицей рассматриваемого рода.

Пусть, например, дана атомная система с N электронами. Мы предположим, что она находится в состоянии с собственными функциями $u_s(q_1, \dots, q_N)$, которые принадлежат к определённому неприводимому представлению $D_{(N)}$ группы \sum_N перестановок N элементов. Пусть, далее, атом соударяется с новым $(N+1)$ -ым электроном, а собственные функции $U_p(q_1, \dots, q_N, q_{N+1})$ всей составной системы до удара выбраны так, что они принадлежат определённому неприводимому представлению

$D_{(N+1)}$ группы перестановок $N+1$ элементов. Тогда U_p имеет вид

$$U_p = \sum_P A_{p,p} P u_1(q_1, \dots, q_N) v(q_{N+1}),$$

где $v(q_{N+1})$ — собственная функция ударяющего электрона, а $A_{p,p}$ — соответствующие численные коэффициенты. Представление D^N для u должно содержаться в представлении $D^{(N+1)}$ для U при редукции по подгруппе \sum_N группы \sum_{N+1} . Так как, кроме того, u быстро исчезает при удалении на большее расстояние R одного из электронов q_1, \dots, q_N , то мы получаем в хорошем приближении

$$U_p(q_1, \dots, q_N, R) = A_{1p} u_1(q_1, \dots, q_N) v(R).$$

После удара получается новая функция

$$U'_p(q_1, \dots, q_{N+1}) = \sum_P A'_{p,p} P u'_1(q_1, \dots, q_N) v'(q_{N+1})$$

с аналогичным свойством. U'_p должно обязательно принадлежать тому же представлению $D^{(N+1)}$ группы \sum_{N+1} , что и U_p . Напротив, u' могут преобразоваться при применении перестановок P группы \sum_N по представлению (приводимому или нет, в зависимости от обстоятельств), которое может содержать любые неприводимые представления D^N , получающиеся из $D^{(N+1)}$ при редукции по подгруппе \sum_N группы \sum_{N+1} . Таких представлений в общем случае несколько, и поэтому атом, сталкиваясь с новым электроном, может перейти из состояния одной серии в состояние другой серии. Только в двух частных случаях, как уже упоминалось, многозначность $D^{(N)}$ исключена. А именно, если мы имеем дело с симметричной или антисимметричной функцией $U(q_1, \dots, q_{N+1})$ $N+1$ частиц, то \bar{u}_s и \bar{u}_a должны быть обязательно тоже симметричны или, соответственно, антисимметричны по отношению к N переменным q_1, \dots, q_N , что следует из разложений

$$\begin{aligned} U_s(q_1, \dots, q_{N+1}) &= \sum_{\substack{P \\ N+1}} P u(q_1, \dots, q_N) v(q_{N+1}) = \\ &= \sum_{k=1} T_{N+1,k} \bar{u}'_s(q_1, \dots, q_N) v(q_{N+1}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 U_a(q_1, \dots, q_{N+1}) &= \sum_P \delta_{Pi}(q_1, \dots, q_N) v(q_{N+1}) = \\
 &= \sum_{k=1}^{N+1} \delta_k T_{N+1,k} \bar{u}_a(q_1, \dots, q_N) v(q_{N+1}).
 \end{aligned}$$

Здесь $T_{N+1,k}$ означает перестановку двух чисел $N+1$ и k ; $T_{N+1, N+1}$, следовательно, — тождество, а $\delta_k = +1$ при $k = N+1$ и $\delta_k = -1$ при $1 \leq k \leq N$.

Опыт показывает, что — коль скоро мы одновременно переставляем пространственные и спинные переменные — для каждого сорта частиц имеется только один единственный класс состояний. Этот класс может быть только либо симметричным, либо антисимметричным. Опыт показывает далее, что элементарные частицы (электроны, протоны) принадлежат к антисимметричному классу, который только и встречается в природе. Для других частиц, например, ядер He (α -частиц), в природе встречается и симметричный класс. Весьма своеобразно то обстоятельство, что волновая механика приводит к большему числу возможностей, чем встречается в природе, и притом к возможностям, равноправным в смысле принципа соответствия. Можно надеяться, что будущая теория электрических элементарных частиц приведёт также и к более глубокому проникновению в сущность этого ограниченного выбора природы ¹⁾.

Свойства классов симметрии выступают более ясно, если рассмотреть частицы, которые в первом приближении не связаны между собой, т. е. свободны от взаимодействия. Они могут, однако, находиться во внешнем силовом поле. Пусть в этом случае $u_1(q), \dots, u_N(q)$ —

¹⁾ Часто пытаются искусственно объяснить такое ограничение возможностей, вводя соответствующие особенности в энергию взаимодействия двух элементарных частиц в случае совпадения спинных и пространственных координат. При этом нужно достигнуть того, чтобы только антисимметричные функции оставались регулярными. Математически безупречным образом достиг этого Яффе (G. Jaffé, *Zs. f. Phys.*, **66**, 748, 1930). Особенности при этом, однако, таковы, что едва ли они могут соответствовать действительности.

собственные функции состояний, в которых находятся N электронов, причём между этими состояниями могут, однако, встречаться также и одинаковые. Тогда симметричной собственной функцией будет сумма произведений:

$$U_s(q_1, \dots, q_N) = \sum_P P u_1(q_1) \dots u_N(q_N). \quad (331)$$

Здесь должны переставляться индексы координат частиц при фиксированных индексах $1, 2, \dots, N$ состояний, между которыми могут также встречаться и одинаковые. (Для нормировки U_s нужно ввести ещё соответствующий численный множитель.) Подобным образом находят антисимметричную собственную функцию:

$$\begin{aligned} U_a(q_1, \dots, q_N) &= \sum_P \delta_P P u_1(q_1) \dots u_N(q_N) = \\ &= \begin{vmatrix} u_1(q_1) & \dots & u_N(q_1) \\ u_2(q_2) & \dots & u_N(q_2) \\ \dots & \dots & \dots \\ u_1(q_N) & \dots & u_N(q_N) \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (332)$$

которая записана также в виде детерминанта. *Антисимметричная функция тождественно обращается в нуль, если два состояния совпадают* ($u_i(q) \equiv u_k(q)$ при $k \neq i$). Таким образом, пока речь идёт о системе частиц с антисимметричными состояниями, то две частицы никогда не могут находиться в одном и том же состоянии. В этом состоит содержание *принципа Паули*, который был сформулирован ещё до установления квантовой механики для электронов. Справедливость этого принципа для протонов стала известна позже. Из справедливости принципа Паули для определённого сорта частиц обратно следует, что эти частицы имеют антисимметричное состояние. Ибо *только* антисимметричные собственные функции имеют свойство всегда обращаться в нуль, если две частицы находятся в одинаковом состоянии.

Для возможности непротиворечивым образом исключить все классы симметрии, кроме одного, существенно то обстоятельство, что в рамках применимости классической механики (геометрической оптики) нельзя установить вид класса симметрии. Рассмотрим для простоты только две частицы. Мы принципиально всегда можем различить эти частицы, используя, например, непрерывность изменения их местоположения, если их волновые функции $\psi_1(q, t)$ и $\psi_2(q, t)$ нигде не перекрываются, т. е. отличны от нуля в совершенно разделённых между собой областях пространства. (Строго говоря, достаточно полного разделения областей в пространстве спинов и обычных координат; мы пишем далее временно $\int dq$ вместо $\sum_{s_2} \int dx_1 dx_2 dx_3$.)

В этом случае имеет место равенство

$$\psi_1^*(q_r; t) \psi_2(q_r, t) = 0 \quad (r = 1, 2)$$

во всём q -пространстве за весь рассматриваемый промежуток времени. Поэтому средние значения любого симметричного относительно частиц оператора $F(p_1, p_2, q_1, q_2)$ для симметричных и антисимметричных функций

$$\left. \begin{aligned} \Psi_s(q_1 q_2 t) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(q_1, t) \psi_2(q_2, t) + \psi_1(q_2, t) \psi_2(q_1, t)], \\ \Psi_a(q_1 q_2 t) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(q_1, t) \psi_2(q_2, t) - \psi_1(q_2, t) \psi_2(q_1, t)] \end{aligned} \right\} \quad (331')$$

совпадают

$$\left. \begin{aligned} \bar{F}(t) &= \int \Psi_s^* F \Psi_s dq_1 dq_2 = \int \Psi_a^* F \Psi_a dq_1 dq_2 = \\ &= \int \psi_1^*(q_1, t) \psi_2^*(q_2, t) [F \psi_1(q_1, t) \psi_2(q_2, t)] dq_1 dq_2 = \\ &= \int \psi_1^*(q_2, t) \psi_2^*(q_1, t) [F \psi_1(q_2, t) \psi_2(q_1, t)] dq_1 dq_2, \end{aligned} \right\} \quad (332')$$

так как в этом случае (по крайней мере, когда F — целая рациональная функция p)

$$\psi_1^*(q_1, t) \psi_2^*(q_2, t) [F \psi_1(q_2, t) \psi_2(q_1, t)] = 0.$$

Часто тот факт, что электроны удовлетворяют принципу Паули, т. е. имеют антисимметричные состояния, представляют наглядным образом, говоря, что все электроны «закljučают между собой договор» или «должны знать друг о друге», чтобы удовлетворять этому принципу. Мы видим, однако, что этот «договор», если можно так выразиться, автоматически вступает в силу только тогда, когда волновые пакеты электронов перекрываются, т. е. когда возможность их совпадения в пространстве спинов и обычных координат не исключена заранее (не учитывая уже класса симметрии).

Мы рассмотрим теперь ещё несколько подробнее поведение многих электронов, возвращаясь к разделению на пространственные и спиновые координаты. Во многих случаях допустимо рассматривать взаимодействие между спином и орбитой и, следовательно, — ту часть оператора Гамильтона, которая содержит операторы спина — как малое по сравнению с взаимодействием электронов. В нулевом приближении (каждый из электронов движется в одинаковом внешнем поле) оператор Гамильтона имеет вид

$$H^{(0)} = \sum_{r=1}^N H_r^{(0)},$$

где каждое $H_r^{(0)}$ действует только на пространственные координаты r -го электрона. В первом приближении добавляется возмущение

$$H^{(1)} = \sum_{r,s} ' \frac{e^2}{r_{r,s}},$$

симметричное по отношению к пространственным координатам частиц. Это есть введённая уже в (98), (99) кулоновская энергия взаимодействия частиц. Только во втором приближении к ней присоединяется энергия взаимодействия между спином и орбитой

$$H^{(2)} = V(x_{rk}, s_{rs}).$$

Если $H^{(2)}$ можно рассматривать не только как малое по сравнению с $H^{(0)}$, но и как малое по сравнению с $H^{(1)}$, то говорят о резель-саундерсовской связи.

Исследуем теперь более подробно на простейшем примере *двух* частиц поведение собственных функций, соответствующих этим предположениям. Согласно (328'') целиком антисимметричные решения (т. е. антисимметричные по отношению к спиновым и пространственным координатам вместе) в нулевом и первом приближении имеют вид

$$U(x_1, x_2, s_{13}, s_{23}) = u(x_1, s_{13}) v(x_2, s_{23}) - \\ - u(x_2, s_{23}) v(x_1, s_{13}), \quad (333)$$

где

$$u(x_1, s_{13}) = u(x) [a_\alpha C_+(s_3) + a_\beta C_-(s_3)], \\ v(x_2, s_{23}) = v(x) [b_\alpha C_+(s_3) + b_\beta C_-(s_3)]$$

(индекс $k = 1, 2, 3$ пространственной координаты каждой из частиц мы опускаем). Эта запись выражает разделение пространственных и спиновых переменных в нулевом и первом приближениях, $u(x)$ и $v(x)$ — пространственные собственные функции одного электрона в *одном* из рассматриваемых состояний. Если оба электрона по отношению к пространственным координатам находятся в одинаковом состоянии, то следует положить $u(x) = v(x)$. Если сначала, как мы предположили, внешнее силовое поле отсутствует, и оператор Гамильтона, следовательно, инвариантен относительно вращений, то при *любом* выборе $a_\alpha, a_\beta, b_\alpha, b_\beta$ мы получим допустимую собственную функцию. Тогда $U(x_1, x_2, s_{13}, s_{23})$ представляет собой линейную комбинацию следующих четырёх (ортгональных друг другу и нормированных) собственных функций: трёх функций

$$U^I(x_1, x_2, s_{13}, s_{23}) = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} [u(x_1) v(x_2) - u(x_2) v(x_1)] A_{m_s}(s_{31}, s_{32}),$$

где $m_s = -1, 0, +1$, а

$$A_{-1}(s_{13}, s_{23}) = C_-(s_{13}) C_-(s_{23}), \\ A_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [C_+(s_{13}) C_-(s_{23}) + C_-(s_{13}) C_+(s_{23})], \\ A_{+1} = C_+(s_{13}) C_+(s_{23})$$

и функции

$$U^{\text{II}}(x_1, x_2, s_{1s}, s_{2s}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u(x_1)v(x_2) + v(x_1)u(x_2)] \times \\ \times \frac{1}{\sqrt{2}} [C_+(s_{1s})C_-(s_{2s}) - C_-(s_{1s})C_+(s_{2s})].$$

Спиновая функция входит здесь как множитель, причём в первом случае она симметрична, а во втором — антисимметрична. Во втором случае применение какого-либо из операторов $S_k = S_{1k} + S_{2k}$ к спиновой собственной функции даёт нуль. Уже из этого следует инвариантность этой функции по отношению к вращениям. Это, однако, видно и непосредственно, так как она при любом линейном преобразовании умножается на такой же детерминант преобразования, как и $C_+(s_{1s})C_-(s_{1s})$ или $C_+(s_{2s})C_-(s_{2s})$; но, как мы видели, детерминант преобразования вращения для C_+ , C_- имеет значение 1. Итак, U^{II} соответствует терм с $S=0$ (сингулет). Даже тогда, когда благодаря инвариантности оператора Гамильтона по отношению к вращениям одному и тому же значению энергии принадлежит несколько u и несколько v^1) (с не равным нулю результирующим вращательным моментом орбитального движения) включение энергии возмущения $H^{(2)}$ не вызывает дальнейшего расщепления терма. В случае $u(x) = v(x)$ первый нормирующий множитель в U^{II} заменяется на $1/2$, так что можно просто писать $u(x)v(x)$. В первом приближении, т. е. пренебрегая $H^{(2)}$, получаем для U^{II} возмущение терма

$$\Delta E_{\text{II}} = J_0 + J_1, \quad (334a)$$

где

$$\left. \begin{aligned} J_0 &= \int |u(x_1)|^2 |v(x_2)|^2 V(x_1, x_2) dx_1 dx_2, \\ J_1 &= \int u^*(x_1)u(x_2)v^*(x_1)v(x_2)V(x_1, x_2) dx_1 dx_2. \end{aligned} \right\} \quad (335)$$

J_1 — так называемый обменный интеграл.

В первом случае, т. е. для U^{I} спиновые собственные функции симметричны. A_{-1}, A_0, A_1 преобразуются при

¹⁾ В этом случае нужно построить соответствующие линейные комбинации различных $u_x(x_1)v_\lambda(x_2) + u_x(x_2)v_\lambda(x_1)$.

вращениях друг в друга. Это происходит в конечном счёте потому, что вращения и перестановки *коммукативны*, и следовательно, при вращениях характер симметрии собственных функций никак не может измениться. Собственные функции одного спина A_{-1} , A_0 , A_1 соответствуют здесь значениям -1 , 0 , 1 квантового числа m_s третьей компоненты $s_3 = s_{13} + s_{23}$ результирующего спинового момента и значению $s = 1$ квантового числа модуля результирующего спинового момента. Соответствующее возмущение энергии равно в первом приближении

$$\Delta E_1 = J_0 - J_1, \quad (334b)$$

где J_0 и J_1 обозначают те же интегралы, что и выше. Если L — орбитальный вращательный момент, то, вообще говоря, из-за энергии возмущения $H^{(2)}$ получается дальнейшее расщепление терма, причём приводимое представление

$$D_1 \times D_s$$

группы вращений распадается на свои неприводимые составные части D_J , где

$$J = L + 1, \quad L, \quad L - 1.$$

Для $L = 0$ (S -терм) расщепления, очевидно, не получается. Таким образом, мы имеем здесь дело с триплетной системой. Следует заметить, что при $u(x) = v(x)$ собственная функция U^I тождественно исчезает.

Мы получаем следующий важный результат: *благодаря принципу Паули, состояниям двух электронов, симметричным относительно перестановки одних пространственных координат, соответствуют синглетные термы; состояниям же, антисимметричным относительно пространственных координат, соответствуют триплетные термы. Даже если пренебречь силами взаимодействия между спином и пространственными координатами, эти термы энергетически различаются обменными интегралами. При не встречающихся в природе целиком симметричных состояниях соотношения мультиплетности для различных классов симметрии относительно одних только пространственных координат были бы как раз обратны.*

Это утверждение составляет сущность содержания гейзенберговой теории спектра гелия¹⁾. Благодаря неразличимости электронов перемена мест электронов принципиально не может наблюдаться. Что же касается «обмена» электронов, то в принципе в атоме He может *самое большее* наблюдаться перестановка спина внешнего и внутреннего электронов с течением времени, если эти спины противоположны.

Теория может быть обобщена со случая двух электронов на любое число N электронов²⁾. Мы не будем, однако, проводить здесь доказательства, а только набросаем результаты. При этом не рекомендуется исходить из общей теории представлений, так как фактически, благодаря принципу Паули, может встретиться лишь небольшая часть всех возможных представлений для симметрии собственных функций относительно перестановок одних координат. Рекомендуется ввести в детерминант (332) выражения вида (333) и для функции $u_n(q)$ соответствующим образом расположить полученные выражения (195). При этом видно, что результат применения оператора

$$s^2 = \sum_{k=1}^3 \sum_{r=1}^N s_{rk}^2$$

к спиновой собственной функции всегда состоит в умножении функции на число вида $s(s+1)$. Характер симметрии спиновых и тем самым—в силу принципа Паули—пространственных собственных функций определяется тогда однозначно.

Из этого, далее, следует, что при рессель-саундерсовской связи (малость взаимодействия $H^{(2)}$ по сравнению с $H^{(1)}$) термы различной мультиплетности также и для N электронов разделяются друг от друга; энергетически они отличаются линейными комбинациями «обменных интегралов».

Следует ещё заметить, что применение предыдущих рассуждений о столкновении к вопросу о симметрии соб-

¹⁾ Ср. Г. Бете, *Квантовая механика простейших систем*.

²⁾ Ср. Р. А. М. Dirac, *Proc. Roy. Soc. London (A)*, **123**, 714, 1929; J. C. Slater, *Phys. Rev.*, **34**, 1293, 1929. Общие обзоры в *Rapport du Congrès de Solvay*, 1930, Referat W. Payli, в о обенности 1 § 4; далее M. Born; *Zs. f. Phys*, **64**, 729, 1930; *Ergebn. d. exakt, Naturwissenschaft*, **10**, 387, 1931.

ственных функций при перестановке одних пространственных координат показывает, что, даже если пренебречь спинowymi силами при соударении электрона с атомом, этот последний может перейти в терм с иной мультиплетностью, чем исходный терм. Ибо здесь, кроме симметричного и антисимметричного, могут встретиться и другие классы симметрии.

Нам осталось ещё обсудить статистические применения теории, которые характерны для системы из многих одинаковых частиц с определённым классом симметрии (симметричным или антисимметричным). Представим себе большое число невзаимодействующих свободных частиц, заключённых в замкнутом объёме V , так что собственные функции имеют вид плоских стоячих волн. Число стационарных состояний частицы, лежащих в элементе объёма $p_k, p_k + dp_k$ ($k = 1, 2, 3$) пространства импульсов, тогда равно

$$Z = V \frac{1}{h^3} dp_1 dp_2 dp_3.$$

Для частиц со спином сюда следует добавить ещё весовой фактор $g = 2s + 1$ ($g = 2$ для электронов и протонов), однако, мы для простоты пока его опустим. При этом целесообразно рассматривать не одно состояние, а группу из Z состояний рассматриваемого рода, причём Z должно быть большим числом. С другой стороны, энергия частицы внутри группы должна изменяться так мало, чтобы множитель Больцмана

$e^{-\frac{E}{kT}}$ для группы состояний оставался почти постоянным. Тогда возникает вопрос об априорной вероятности W того, что N частиц лежат в рассматриваемой группе состояний. Согласно общим принципам она задаётся числом стационарных состояний составной системы из N частиц, при которых каждая частица имеет импульс между p_k и $p_k + dp_k$. Это число зависит от класса симметрии и отличается от априорной вероятности для независимых частиц, которая равна просто

$$W = Z^N. \quad (336)$$

Для частиц с симметричными состояниями дело обстоит совершенно иначе. Тому случаю, когда первая частица находится в состоянии 1, а вторая—в состоянии 2, и дру-

тому случаю, когда первая частица находится в состоянии 2, а вторая—в состоянии 1, соответствует только *одно* состояние для системы из двух частиц; следовательно, здесь *a priori* равновероятно, что одна из двух имеющихся частиц находится в состоянии 1, а другая—в состоянии 2, или что обе они находятся в одинаковом состоянии 1, или же в одинаковом состоянии 2. Для независимых частиц, напротив, вероятность каждой из двух последних возможностей равна только половине вероятности первой. Вообще для N частиц каждая симметричная функция однозначно охарактеризована, если задано, *сколько* молекул из общего числа N находится в каждом из Z -состояний группы. Такое задание мы будем называть «распределением». Для симметричных собственных функций число таких распределений равно

$$W = \frac{(N+Z-1)!}{N!(Z-1)!} \quad (\text{симметричные состояния}). \quad (336a)$$

В случае антисимметричных собственных функций (принцип Паули) нужно из этих распределений вычеркнуть все те, при которых более чем одна частица находится в одинаковом состоянии. Тогда получается

$$W = \frac{Z!}{N!(Z-N)!} \quad (\text{антисимметричные состояния}), \quad (336b)$$

причём обязательно должно быть $N \leq Z$. Если имеется несколько групп состояний отдельных частиц, то общее число соответствующих состояний составной системы равно произведению чисел W для отдельных групп. (При независимых частицах здесь входит ещё множитель $N!/N_1!N_2!\dots$, где N_n обозначают число частиц в отдельной группе, а $N = \sum_n N_n$ —полное число частиц. Для частицы со спи-

ном эти W нужно просто возвести в степень g , если под N понимается число частиц с определённым спиновым состоянием.)

До того, как были исследованы свойства симметрии собственных функций N одинаковых частиц, эти статистические соотношения казались особым гипотетическим пред-

писанием, особенно в случае симметричных состояний. Они были введены Бозе¹⁾, так как при толковании света как газа, состоящего из корпускулярных световых квантов, они приводят к правильным результатам. (Мы вернёмся к этому в части II, § 6.) Эйнштейн¹⁾ перенёс эти соотношения на материальные газы. Поэтому часто говорят о *статистике Бозе-Эйнштейна*. Здесь речь идёт, однако, не о новом роде статистики, ибо, как мы теперь знаем, априорная вероятность всегда пропорциональна числу соответствующих стационарных состояний составной системы. Мы предпочитаем поэтому говорить о статистике симметричных состояний. Она должна применяться к таким материальным частицам, которые обладают симметричными состояниями, например к α -частицам. Для частиц, которые удовлетворяют принципу Паули, соответствующие статистические следствия были получены Ферми¹⁾ и независимо от него Дираком¹⁾, который уже основывал свои рассуждения на антисимметрии собственных функций. Поэтому часто говорят также о *статистике Ферми-Дирака*, мы предпочитаем, однако, говорить о статистике антисимметричных состояний²⁾.

Мы обсудим ещё одно из применений этих статистик, которое можно формулировать, не вдаваясь в вопросы теории теплоты. Речь идёт о флуктуациях числа частиц и энергии в выделенной части объёма для рассматриваемой здесь совокупности N свободных частиц, лежащих внутри определённого интервала скоростей. Мы рассмотрим сначала более простые соотношения для числа частиц. Пусть x_r — сокращённое обозначение для трёх пространственных координат n -й частицы, тогда число пространственных координат x_r , лежащих в рассматриваемой части объёма, равно

$$n(x_1, \dots, x_N) = \sum_{r=1}^N \int_V dx \delta(x - x_r), \quad (337)$$

¹⁾ L. с., см. прим. 1, стр. 186.

²⁾ О дальнейших термодинамических следствиях и применениях см. также монографию Бриллюэна, *Квантовая статистика*, ОНТИ, 1934; П. Иордан, *Статистическая механика на основе квантовой теории*.

где интегрирование выполняется по объёму v . Далее имеем

$$\bar{n} = \int n(x_1, \dots, x_N) |U(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \dots dx_N,$$

$$\bar{n}^2 = \int n^2(x_1, \dots, x_N) |U(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \dots dx_N,$$

где $U(x_1, \dots, x_N)$ обозначает собственную функцию. Интегрирование здесь возможно. Если в рассматриваемой группе Z состояний, где Z — большое число, каждое состояние составной системы рассматривается как равновероятное, и если для простоты ограничиться случаем частичного объёма v , малого по сравнению с полным объёмом, то для числа частиц в v получается известный результат ¹⁾:

$$(\overline{\Delta n})^2 = \bar{n}^2 - (\bar{n})^2 = \bar{n} + \frac{\bar{n}^2}{z} \text{ для симметричных состояний,} \quad (338a)$$

$$(\overline{\Delta n})^2 = \bar{n}^2 - (\bar{n})^2 = \bar{n} - \frac{\bar{n}^2}{z} \text{ для антисимметричных состояний,} \quad (338b)$$

где $z = Z \frac{v}{V}$. Напротив, для независимых частиц, как известно, $(\overline{\Delta n})^2 = \bar{n}$. При этом важно заметить, что здесь мы пренебрегаем величинами порядка $1/z$ по сравнению с выписанными членами.

Аналогичный вопрос об энергии выделенного объёма требует известной осторожности, так как знание импульса частицы влечёт за собой неопределённость в знании её положения. Измерение числа частиц в выделенной области можно осуществить просто, определяя координаты всех частиц, численное значение которых лежит в требуемых границах. Наоборот, для определения энергии нужно обязательно ввести стены (потенциальные барьеры) или включить аналогичные внешние влияния, которые осуществляют ограничение объёма. После такого включения энергия в общем совпадает с энергией, находившейся до включения в некотором объёме. Однако, границы этого объёма определены с точностью

¹⁾ Выполнением вычислений этим методом я обязан Р. Пайерсу.

до величины порядка длины волны материи. Только когда выделенная область велика по сравнению с такой средней длиной волны, вопрос об энергии выделенной области вообще получает определённый смысл. Следует заметить, что если записать энергию выделенной области в форме

$$E = \frac{1}{2m} \sum_r p_r D(x_r) p_r, \quad D(x) = \int_v \delta(x-x') dx',$$

то появляются известные особенности, которых можно, однако, как заметил Гейзенберг¹⁾, избежать, если заменить функцию $D(x)$ непрерывной функцией, т. е. ввести весовую функцию, которая вне рассматриваемой области v хотя и спадает круто, но всё же исчезает непрерывно.

$$\int G(x') \delta(x-x') dx' = G(x), \quad E = \frac{1}{2m} \sum_r p_r G(x_r) p_r.$$

Тогда аналогично (338) получаем:

$$(\overline{\Delta E})^2 = \overline{E^2} - \overline{E}^2 = \frac{1}{2m} p^2 \overline{E} + \frac{\overline{E}^2}{z} \text{ для симметричных состояний,} \quad (339a)$$

$$(\overline{\Delta E})^2 = \overline{E^2} - \overline{E}^2 = \frac{1}{2m} p^2 \overline{E} - \frac{\overline{E}^3}{z} \text{ для антисимметричных состояний.} \quad (339b)$$

Здесь следует обсудить своеобразный математический метод, развитый Иорданом и Клейном²⁾ (случай симметричных состояний) и Иорданом и Вигнером³⁾, который может быть назван вторичным квантованием волн в обычном трёхмерном пространстве. Этот метод возник исходя из аналогии между материальными частицами (состояния которых симметричны), с одной стороны, и световыми квантами излучения, с другой стороны. (Ср. часть II, § 6.) Представляется сомнительным, чтобы речь шла здесь действительно о глубоко идущей физической аналогии. Кроме того, известно, что все результаты волновой механики могут быть получены и без применения этого метода. Однако, он должен быть приведён, по крайней мере, как метод вычислительный.

¹⁾ W. Heisenberg, *Leipziger Akad., math.—phys. Kl.*, 83, 3, 1931.

²⁾ P. Jordan и O. Klein, *Zs. f. Phys.*, 45, 751, 1927.

³⁾ P. Jordan и E. Wigner, *Zs. f. Phys.*, 47, 631, 1928.

В § 9 мы описывали посредством $c_n^* c_n$ вероятность того, что частица находится в состоянии, характеризуемом собственной функцией $u_n(x)$. Введём теперь (зависящие от времени) операторы (матрицы) a_n^* и a_n , которые удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$a_n a_m^* - a_m^* a_n = \begin{cases} 0 & \text{при } n \neq m, \\ 1 & \text{при } n = m, \end{cases} \quad (340)$$

тогда как

$$a_n a_m - a_m a_n = 0, \quad a_n^* a_m^* - a_m^* a_n^* = 0. \quad (340')$$

При этом a^* всегда обозначает оператор, эрмитовски сопряжённый оператору a . Тогда легко видеть, что собственные значения

$$a_m^* a_m = N_m \quad (341)$$

представляют собой целые числа 0, 1, 2, ... Если записать N_m в виде диагональной матрицы, то матрицы a_m^* и a_m примут следующий вид

$$(a_m^*)_{N_m N'_m} = \begin{cases} \sqrt{N_m} & \text{при } N'_m = N_m - 1, \\ 0 & \text{при } N'_m \neq N_m - 1. \end{cases} \quad (342a)$$

$$(a_m)_{N_m N'_m} = \begin{cases} \sqrt{N_m + 1} & \text{при } N'_m = N_m + 1, \\ 0 & \text{при } N'_m \neq N_m + 1. \end{cases} \quad (342'a)$$

Следовательно, a_m^* как оператор, действующий на функцию $f(N_m)$, переводит последнюю в $\sqrt{N_m + 1} f(N_m + 1)$, тогда как a_m переводит $f(N_m)$ в $\sqrt{N_m} f(N_m - 1)$. Положим:

$$a_m^* = \sqrt{N_m} \vec{\Delta}_m^*, \quad a_m = \vec{\Delta}_m \sqrt{N_m}, \quad (343)$$

где

$$\vec{\Delta}_m^* \vec{\Delta}_m = 1^1); \quad (344a)$$

тогда

$$\left. \begin{aligned} \vec{\Delta}_m^* f(N_m) &= f(N_m + 1), \\ \vec{\Delta}_m f(N_m) &= f(N_m - 1). \end{aligned} \right\} \quad (345a)$$

Совершенно аналогичные перестановочные соотношения могут быть по Йордану и Вигнеру, установлены для частиц с антисимметричными состояниями, где N_n имеют значения только 0 и 1. Согласно этим авторам здесь можно положить

$$a_n a_m^* + a_m^* a_n = \begin{cases} 0 & \text{при } n \neq m, \\ 1 & \text{при } n = m, \end{cases} \quad (340b)$$

причём

$$a_n a_m + a_m a_n = 0, \quad a_n^* a_m^* + a_m^* a_n^* = 0 \quad \text{при } m \neq n, \quad (340'b)$$

¹⁾ Часто пишут $\Delta_m = e^{\frac{i}{\hbar} \theta_m}$, чтобы (344a) выполнялось тождественно.

и снова

$$a_n^* a_n = N_n. \quad (341)$$

Теперь матрицы a имеют вид

$$(a_n^*)_{1,0} = \varepsilon_n, \quad (a_n)_{0,1} = \varepsilon_n, \quad (a_n^*)_{N_n N_n'} = (a_n)_{N_n' N_n}, \quad (342b)$$

где $\varepsilon_n = \pm 1$; знак зависит от n и подлежит ещё определению. Чтобы установить этот знак, нужно представить себе состояния n распределёнными в определённой последовательности. Тогда можно положить

$$\varepsilon = \prod_{m \leq n} (1 - 2N_m). \quad (346)$$

Это выражение равно $+1$ или -1 , в зависимости от того, является ли число лежащих *перед* рассматриваемым состоянием занятых состояний чётным или нечётным. Далее следует положить

$$\left. \begin{aligned} a_n^* f(N_1, \dots, 0_n, \dots) &= \varepsilon_n (N_1, \dots, 0_n, \dots) f(N_1, \dots, 1_n, \dots) = \\ &= -\varepsilon_n (N_1, \dots, 1_n, \dots) f(N_1, \dots, 1_n, \dots), \end{aligned} \right\} \quad (345b)$$

$$\left. \begin{aligned} a_n^* f(N_1, \dots, 1_n, \dots) &= 0, \\ a_n f(N_1, \dots, 0_n, \dots) &= 0, \\ a_n f(N_1, \dots, 1_n, \dots) &= \varepsilon_n (N_1, \dots, 0_n, \dots) f(N_1, \dots, 0_n, \dots) = \\ &= -\varepsilon_n (N_1, \dots, 1_n, \dots) f(N_1, \dots, 1_n, \dots). \end{aligned} \right\} \quad (345'b)$$

От $a_n a_n^*$ легко перейти к самым функциям ψ согласно соотношениям:

$$\vec{\psi}(q) = \sum_n a_n(t) u_n(q), \quad \vec{\psi}^*(q) = \sum_n a_n^*(t) u_n^*(q), \quad (346)$$

где q объединяет пространственные и спиновые координаты, а u_n и u_n^* представляют собой обыкновенные числа, образующие нормированную ортогональную систему. Последнее обстоятельство влечёт за собой перестановочные соотношения, аналогичные (342a, b):

$$\left. \begin{aligned} \vec{\psi}(q) \vec{\psi}^*(q') \mp \vec{\psi}^*(q') \vec{\psi}(q) &= \delta(q - q') \cdot 1, \\ \vec{\psi}^*(q) \vec{\psi}^*(q') \mp \vec{\psi}^*(q') \vec{\psi}^*(q) &= 0, \\ \vec{\psi}(q) \vec{\psi}(q') \mp \vec{\psi}(q') \vec{\psi}(q) &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (347')$$

где верхний знак соответствует симметричным состояниям, а нижний — антисимметричным. Здесь стоит $\delta(q - q')$ вместо $\delta(x - x') \delta_{\mu\mu'}$, причём $\delta_{\mu\mu'}$ — обыкновенный δ -символ для дискретной спиновой координаты.

В качестве применения этого метода можно прежде всего снова вычислить флуктуации энергии и флуктуации плотности, причём следует построить

$$n = \sum_{s_3} \int_V \vec{\psi} \vec{\psi}^* dx,$$

$$E = \sum_{s_3} \int_V \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x} \frac{\partial \vec{\psi}^*}{\partial x} dx,$$

и образовать средние значения (математические ожидания) величины n , n^2 и E , E^2 для рассматриваемой группы состояний. Результат получается такой же, как и при вычислении в конфигурационном пространстве¹⁾.

Это есть частный случай *общей эквивалентности метода квантованных собственных колебаний и метода конфигурационного пространства*, которая, как показали названные авторы, распространяется даже на проблему одинаковых взаимодействующих частиц. Пусть

$$H = \frac{1}{2m} \sum_r \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_r^2} + \sum_r V_r(q_r) + \sum_{r < s} \Omega(q_r, q_s) \right] \quad (348)$$

оператор Гамильтона. Здесь внешние силы представлены потенциалом $V(q_r)$, а функции Ω , зависящие от пары частиц, описывают взаимодействие. Для кулоновских электростатических сил было $H_{rs} = \frac{e^2}{r_{rs}}$. Имея в виду дальнейшее обобщение, которое касается магнитного взаимодействия частиц, мы допустим, что V и Ω зависят от спиновых координат. Рассматривая $\rho(q) = \psi^*(q) \psi(q)$ как классическую плотность заряда электронного облака, можно записать энергию взаимодействия частиц s и r классически

$$\iint dq_r dq_s \Omega(q_r, q_s) \rho(q_r) \rho(q_s).$$

По аналогии с этим можно определить оператор Гамильтона как

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{s_3 r} \int \left[\hbar^2 \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial x_r} \frac{\partial \vec{\psi}^*}{\partial x_r} + V(q_r) \vec{\psi}^* \vec{\psi} \right] dx_r +$$

$$+ \sum_{s_3 r} \sum_{s_3 s} \iint \vec{\psi}^*(q') \vec{\psi}^*(q) \Omega(q, q') \vec{\psi}(q') \vec{\psi}(q) dx dx', \quad (348')$$

¹⁾ При таком методе рассмотрения плотность энергии свободных частиц формально аналогична плотности энергии колеблющейся струны с проквантованными собственными колебаниями. Флуктуационные свойства этой последней системы были исследованы уже в работе М. Борн, W. Heisenberg и P. Jordan, *Zs. f. Phys.*, 35, 557, 1925.

где $\psi^* \psi$ точно так же операторы, которые, согласно (346), могут быть выражены через $a_r^* a_\lambda$, появляющиеся при разложении ψ по подходящей системе ортогональных функций. Введём число частиц N_n в определяемых этой системой состояниях n в качестве переменных волновой функции $\Phi(N_1, N_2, \dots, t)$, на которую действует оператор (348'). Тогда мы можем установить волновое уравнение

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = H \Phi(N_1, N_2, \dots, t). \quad (349)$$

Можно показать, что вытекающие из этого уравнения следствия полностью совпадают со следствиями полученного с помощью оператора (348) волнового уравнения в пространстве конфигураций. Это справедливо как для частиц с симметричными состояниями, так и для частиц с антисимметричными состояниями¹⁾. Для этого совпадения существенна последовательность множителей в (348').

Если имеется несколько различных сортов частиц (электроны, протоны), то можно для каждого сорта частиц ввести особый $\vec{\psi}$ -оператор, причём $\vec{\psi}$ -операторы, принадлежащие частицам различного сорта, коммутативны.

Это и есть вкратце метод квантованных собственных колебаний. Следует подчеркнуть, что несмотря на формальную математическую аналогию, имеется существенное физическое различие между переходом от величин p, q классической механики материальной точки к волновомеханическим операторам \vec{p}, \vec{q} , с одной стороны, и переходом от функций ψ^*, ψ в обычном пространстве к операторам $\vec{\psi}^*, \vec{\psi}$, с другой стороны, потому что уже функции ψ^*, ψ являются символическими величинами, которые сами не могут быть непосредственно наблюдаемы и содержат квант действия.

15. Рассмотрение процессов излучения с помощью принципа соответствия

Исторически, как известно, процессы излучения света играли существенную роль при основании матричной механики Гейзенберга, причём была указана прямая и непосредственно примыкающая к классической электродинамике связь матричных элементов электрического момента атома с напряжённостью электрического поля, полученного при соответствующем переходе света. Борн,

¹⁾ Доказательство см. кроме цитированных работ, также в статье Фока (V. Fock, *Zs. f. Phys.* 75, 622, 1932) и в книге Гейзенберга, *Физические принципы квантовой теории*, 1932.

Гейзенберг и Иордан ¹⁾ распространили этот аппарат на явления дисперсии. Соответствующий волномеханический способ рассмотрения был дан Клейном ²⁾. При этом, однако, оказалось, что заключения относительно испущенного атомом света по электрическому моменту атома можно было сделать, если ввести особые предписания, которые, казалось, не могли быть выведены из общих принципов квантовой механики. Этот недостаток был устранён только последовательным квантовомеханическим рассмотрением световых волн, проведённым Дираком. Поскольку, с другой стороны, эта последовательная теория, которая будет более подробно изложена в части II, §§ 6 и 7, приводит к особым трудностям, связанным с нерешённой проблемой строения электрона, представляет известный интерес и первоначальный способ рассмотрения, основывающийся на соответствии с классической теорией, более ограниченный вследствие отказа от квантования электромагнитного поля. Мы сформулируем его ниже таким образом, чтобы обеспечить впоследствии возможно более непосредственный перенос полученных рассуждений и заключений в теорию излучения Дирака. При этом сначала мы не будем вводить ограничивающих предположений о числе электронов в атоме и отношении длины волны к размерам атома.

Рассмотрим сначала *классически* систему частиц, для которых имеются определённые статистические данные. А именно: для каждой конфигурации положения частиц $x_k^{(a)}$ ($k = 1, 2, 3; a = 1, \dots, N$) в интервалах $dx_k^{(a)}$ задана вероятность этой конфигурации и соответствующий средний поток $i_k^{(a)}(x_1^{(1)}, \dots, x_1^{(N)}; t)$ частицы (a) . Тогда плотность $\rho(x_k^{(1)}, \dots, x_k^{(N)}; t)$ и ток частицы (a) в точке $x_k^{(a)}$ в момент времени t , усреднённые по положениям остальных частиц, равны

$$\left. \begin{aligned} \bar{\rho}^{(a)} &= \int \rho dV_1 \dots dV^{(a-1)} dV^{(a+1)} \dots dV^{(N)}; \\ \bar{i}_k^{(a)} &= \int i_k^{(a)} dV_1 \dots dV^{(a-1)} dV^{(a+1)} \dots dV^{(N)}. \end{aligned} \right\} \quad (350)$$

¹⁾ M. Born, W. Heisenberg и P. Jordan, *Zs. f. Phys.*, 35, 557, 1926.

²⁾ O. Klein, *Zs. f. Phys.*, 41, 407, 1927.

Средние значения скалярного потенциала Φ_0 и векторного потенциала Φ_k в точке наблюдения P с координатами x_P в момент времени t по классической электродинамике, как известно, равны

$$\left. \begin{aligned} \Phi_0(x_P; t) &= \sum_{a=1}^N \int \frac{\bar{\rho}^{(a)}\left(x; t - \frac{r_{PQ}}{c}\right)}{r_{PQ}} dV_Q^{(a)}, \\ \Phi_k(x_P; t) &= \sum_{a=1}^N \int \frac{\bar{i}_k^{(a)}\left(x_Q; t - \frac{r_{PQ}}{c}\right)}{r_{PQ}} dV_Q^{(a)}. \end{aligned} \right\} \quad (351)$$

Эти выражения упрощаются, если рассматривать расстояние от точки наблюдения P до точки источника Q , как большое по сравнению с размерами области, в которой $\bar{\rho}^{(a)}$ и $\bar{i}_k^{(a)}$ заметно отличаются от нуля или, короче говоря, по сравнению с размерами системы. В волновой зоне для P , рассмотрением которой мы ограничимся в этом параграфе, можно, как известно, положить

$$r_{PQ} = R_P - (\vec{x}_Q \vec{n}), \quad (352)$$

где R_P — расстояние внешней точки P от закреплённой точки O в системе, \vec{n} — единичный вектор в направлении от Q к P , а \vec{x}_Q — радиус-вектор, проведённый из O в Q . Чтобы быть последовательными, мы должны ограничиться в этой волновой зоне величинами, пропорциональными $1/R_P$ как в выражениях для потенциалов, так и в соответствующих выражениях для напряжённости поля. Из (351) и (352) тогда следует

$$\left. \begin{aligned} \Phi_0(x_P; t) &= \\ &= \frac{1}{R_P} \sum_{a=1}^N \int \bar{\rho}^{(a)}\left(x_Q; t - \frac{R_P}{c} + \frac{1}{c} \vec{x}_Q, \vec{n}\right) dV_Q^{(a)}, \\ \Phi_k(x_P; t) &= \\ &= \frac{1}{R_P} \sum_{a=1}^N \int \frac{1}{c} \bar{i}_k^{(a)}\left(x_Q; t - \frac{R_P}{c} + \frac{1}{c} (\vec{x}_Q, \vec{n})\right) dV_Q^{(a)}. \end{aligned} \right\} \quad (353)$$

При переходе к напряжённости поля следует заметить, что дифференцируя по $(x_P)_k$, нужно R_P в рассматриваемом приближении считать постоянным, причём из соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_{k,P}} \int f\left(x_Q; t - \frac{r_{PQ}}{c}\right) dV_Q = \\ = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int f\left(x_Q; t - \frac{r_{PQ}}{c}\right) \frac{\partial r_{PQ}}{\partial x_{k,P}} dV_Q = \\ = +\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int f\left(x_Q; t - \frac{r_{PQ}}{c}\right) \frac{\partial r_{PQ}}{\partial x_{k,Q}} dV_Q \end{aligned}$$

для волновой зоны, согласно (352), следует:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_{k,P}} \int f\left(x_Q; t - \frac{r_{PQ}}{c}\right) dV_Q = \\ = -n_k \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int f\left(x_Q; t - \frac{r_{PQ}}{c}\right) dV_Q. \end{aligned}$$

Тогда для той части напряжённости поля, которая пропорциональна $1/R_P$, получаем

$$\left. \begin{aligned} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\Phi}}{\partial t} - \text{grad } \Phi_0 = -\frac{1}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \vec{n} \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi_0}{\partial t}, \\ \vec{H} &= \text{rot } \vec{\Phi} = -\left[\vec{n}, \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\Phi}}{\partial t} \right]. \end{aligned} \right\} \quad (354)$$

В то время как \vec{H} перпендикулярно к \vec{n} , кажется на первый взгляд, что \vec{E} содержит и продольную, т. е. параллельную \vec{n} часть. Исходя из уравнения непрерывности для $i^{(a)}$ и $\rho^{(a)}$, легко, однако, получить соотношение ¹⁾

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \Phi_0}{\partial t} = \left(\vec{n} \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\Phi}}{\partial t} \right), \quad (355)$$

справедливое для волновой зоны. Из этого соотношения, в силу (354), следует, что продольная часть электри-

¹⁾ Это связано с тем, что благодаря уравнению непрерывности выражения (351) всегда удовлетворяют условию

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \Phi_0}{\partial t} + \text{div } \vec{\Phi} = 0,$$

которое в волновой зоне переходит в (355).

ческого поля равна нулю

$$(\vec{E}\vec{n}) = 0 \quad (355')$$

в волновой зоне (это означает, что $(\vec{E}\vec{n})$ исчезает с расстоянием быстрее, чем $1/R_P$).

Вводя трансверсальную компоненту векторного потенциала

$$\begin{aligned} \vec{\Phi}_{tr} &= \vec{\Phi} - \vec{n} (\vec{n} \vec{\Phi}) = \\ &= \frac{1}{R_P} \sum_{a=1}^N \frac{1}{c} \int \vec{i}_{tr} \left(x_Q; t - \frac{R_P}{c} + \frac{1}{c} (\vec{x}_Q, \vec{n}) \right) dV_Q^{(a)}, \end{aligned} \quad (356)$$

можно, в силу (355), переписать соотношения (354) в виде

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\Phi}_{tr}}{\partial t}, \quad \vec{H} = -\left[\vec{n} \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\Phi}_{tr}}{\partial t} \right] = [\vec{n} \vec{E}]. \quad (357)$$

Вектор Пойнтинга равен

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} [\vec{E}\vec{H}] = \frac{c}{4\pi} \vec{n} E^2 = \frac{c}{4\pi} \vec{n} H^2. \quad (358)$$

Мы пришли теперь к вопросу о том, как следует перенести эти результаты классической теории в квантовую механику. Ведь в квантовой механике каждое состояние системы описывается принципиально статистически, а именно с помощью какого-либо решения соответствующего волнового уравнения

$$\psi(x_1, \dots, x_{3N}; t) = \sum_n c_n u_n(x_1, \dots, x_{3N}; t),$$

где u_n обозначает какую-нибудь нормированную систему частных решений этого уравнения. На первый взгляд может показаться, что нужно в выражение для тока, билинейное относительно ψ^* и ψ , прямо подставить написанное выражение для ψ и после этого построить $\vec{\Phi}_{tr}$ и \vec{E}, \vec{H} , согласно (356) и (357), которые должны дать среднее значение (математическое ожидание) потенциала и напряжённости поля в рассматриваемой точке. Однако измерение излучения системы отнюдь не заключается в определении среднего значения силы поля. Так, например, это последнее исчезает для

стационарного состояния, при котором \vec{i} не зависит от времени. *Здесь речь идёт всегда об определении средних значений, квадратичных по отношению к напряжённости поля выражений.* Ниже мы увидим даже, что при процессах с ничтожной интенсивностью света, при которых играет роль лишь небольшое и вполне определённое число световых квантов, сама напряжённость поля всегда должна рассматриваться как неизмеримая величина (если пренебречь установлением тривиального факта, что среднее по времени математического ожидания напряжённости равно нулю). В действительности можно, разумеется, не только измерять среднее по времени от квадрата суммарной напряжённости поля в данном месте, но и определять средние по времени значения квадратов амплитуды различных компонент Фурье \vec{E} или \vec{H} , поскольку фотографические пластинки, ионизационные камеры, поглощающие атомы и другие средства для изучения света различно реагируют на различные частицы. Мы имеем в виду здесь разложение \vec{E} и \vec{H} во временной ряд Фурье

$$\vec{E}(x_P; t) = \sum_{(\omega)} \vec{E}(\omega; x_P) e^{i\omega t}, \quad \vec{H}(x_P; t) = \sum_{(\omega)} \vec{H}(x_P; \omega) e^{i\omega t};$$

сумма может быть также заменена интегралом, причём

$$\vec{E}(-\omega) = \vec{E}^*(\omega), \quad \vec{H}(-\omega) = \vec{H}^*(\omega),$$

т. е. для ω и $-\omega$ амплитуды принимают комплексно сопряжённые значения. Мы не будем пока разбирать, сколь подробно можно проследить с помощью измерений изменение среднего значения \vec{E}_ω^2 в пространстве. Это может, во всяком случае, иногда осуществляться в пространственных областях, малых по сравнению с длиной волны, что известно, например, из опытов со стоячими световыми волнами.

Поскольку \vec{i} билинейно относительно ψ и ψ^* , математическое ожидание любой линейной относительно компонент напряжённостей поля величины можно представить в форме

$$F(x_P; t) = \sum_{n,m} c_n^* F_{n,m}(x_P; t) c_m, \quad (359)$$

где $F_{n,m}$ — матричные элементы, получающиеся при подстановке $\psi^* = v_n^*$ и $\psi = v_m$ в \vec{I} . Тогда математическое ожидание F^2 равно

$$\begin{aligned}(F^2) &= \sum_{n,m} c_n^* (F^2)_{n,m} (x_P; t) c_m = \\ &= \sum_{n,m} c_n^* \sum_l F_{n,l} (x_P; t) F_{l,m} (x_P; t) c_m,\end{aligned}$$

как было показано в § 7. Далее, среднее по времени математического ожидания (F^2) равно

$$\begin{aligned}(\overline{F^2}) &= \sum_n c_n^* \sum_l \sum_{\omega} F_{n,l} (\omega; x_P) F_{l,m} (-\omega, x_P) c_m = \\ &= \sum_n c_n^* \sum_l \sum_{\omega > 0} [F_{n,l} (\omega; x_P) F_{l,m} (-\omega; x_P) + \\ &\quad + F_{n,l} (-\omega; x_P) F_{l,m} (\omega, x_P)] c_m. \quad (360)\end{aligned}$$

В этом месте возникает известная двузначность в толковании принципа соответствия, так как $F_{n,m}(\omega; x_P)$ могут быть не эрмитовыми, а в общем случае удовлетворяют только соотношению

$$F_{n,m}^* (-\omega) = F_{m,n} (\omega). \quad (360')$$

Эта двузначность устраняется, если ввести особое предписание, сформулированное Клейном. Смысл этого предписания при таком способе рассмотрения неясен, однако, оно необходимо, чтобы сохранить согласие с опытом, или даже хотя бы с законом сохранения энергии при отдельном процессе излучения или рассеяния. Для волновой зоны, т. е. для области, внешней по отношению к самой излучающей или рассеивающей системе, это предписание гласит:

Предписание I: Рассматриваемую величину F следует разделить на части $F^{(+)}$ и $F^{(-)}$, согласно¹⁾

$$F = F^{(+)} + F^{(-)}, \quad (361)$$

¹⁾ Мы опустили здесь $F^{(0)} = \bar{F}$, так как мы не интересуемся здесь статическими полями.

$$\left. \begin{aligned} F^{(+)} &= \sum_{\omega > 0} F(\omega; x_p) e^{i\omega t}, \\ F^{(-)} &= \sum_{\omega < 0} F(\omega; x_p) e^{i\omega t} = \sum_{\omega > 0} F(-\omega; x_p) e^{-i\omega t}, \end{aligned} \right\} \quad (362)$$

следовательно

$$\left. \begin{aligned} F_{n,m}^{+} &= \sum_{\omega > 0} F_{n,m}(\omega; x_p) e^{i\omega t}, \\ F_{n,m}^{-} &= \sum_{\omega < 0} F_{n,m}(\omega; x_p) e^{i\omega t} = \sum_{\omega > 0} F_{n,m}(-\omega; x_p) e^{-i\omega t}, \end{aligned} \right\} \quad (362')$$

и заменить среднее по времени от математического ожидания классической величины F^2 выражением $2F^{+}F^{-}$:

$$\overline{(F^2)} \rightarrow 2 \overline{(F^{+}F^{-})} \quad (363)$$

и соответственно

$$\begin{aligned} F(\omega)F(-\omega) + F(-\omega)F(\omega) &\rightarrow 2F(\omega)F(-\omega) = \\ &= 2 \sum_{n,m} c_n^* \sum_l F_{n,l}(\omega) F_{l,m}(-\omega) c_m. \end{aligned} \quad (363')$$

Это предписание одинаковым образом применяется при излучении и при рассеянии, причём в первом случае следует подставлять для v_n ортогональные решения волнового уравнения невозмущённой системы, а во втором — ортогональные решения¹⁾ системы, возмущённой внешним излучением. Сама (зависящая от времени) ортогональная система остаётся пока совершенно произвольной.

В качестве применения этих общих рассуждений мы рассмотрим более подробно излучение света. Для v_n мы выберем решения

$$u_n(x_1, \dots, x_{3N}) e^{-\frac{iE_n}{\hbar} t},$$

¹⁾ Согласно § 8, ортогональность и нормировка системы решений волнового уравнения сохраняются с течением времени и для зависящей от времени функции Гамильтона, если только она вещественна.

которые соответствуют стационарным состояниям невозмущённой системы и зависят от времени экспоненциально. Согласно (356) матричные элементы поперечной слагающей векторного потенциала для излучённого света тогда равны

$$(\vec{\Phi}_{tr})_{n,m} = \frac{e^{i\nu_{n,m}t}}{R} \frac{(-e)}{c} \sum_{a=1}^N \int \vec{i}_{tr}^{(a)}(u_n^*, u_m) e^{i(\vec{k}_{n,m} \cdot \vec{x}^{(a)})} dV^{(a)}. \quad (364)$$

Здесь введена частота излучения

$$\nu_{n,m} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (365)$$

и волновой вектор $\vec{k}_{n,m}$ излучённого света:

$$\vec{k}_{n,m} = \frac{\nu_{n,m}}{c} \vec{n}.$$

Множитель $(-e)$, равный заряду электрона, введён, чтобы при решениях, нормированных к единице, установленное выше выражение для \vec{i} обозначало поток частиц. В силу (77) и (100),

$$\begin{aligned} i_k^{(a)}(u_n^*, u_m) &= \\ &= \frac{\hbar}{2m} \int dV^{(1)} dV^{(2)} \dots dV^{(a-1)} dV^{(a+1)} \dots dV^{(N)} \frac{1}{i} \times \\ &\quad \times \left(u_n^* \frac{\partial u_m}{\partial x_k^{(a)}} - u_m \frac{\partial u_n^*}{\partial x_k^{(a)}} \right), \end{aligned} \quad (366)$$

если для простоты предположить, что постоянное магнитное поле отсутствует. В релятивистской теории мы должны будем использовать другое выражение для тока, но (364) остаётся справедливым и там. Подставляя (364) в (366), убедимся в эрмитовости матриц $(\vec{\Phi}_{tr})_{n,m}$, причём существенно, что берутся поперечные компоненты.

Согласно (364), разложение $\vec{\Phi}$ на $\Phi^{(+)}$ и $\Phi^{(-)}$ весьма просто, а именно:

$$\left. \begin{aligned} (\vec{\Phi}_{tr})_{n,m}^{(+)} &= (\vec{\Phi}_{tr})_{n,m} && \text{при } \nu_{n,m} > 0 && (E_n > E_m), \\ (\vec{\Phi}_{tr})_{n,m}^{(+)} &= 0 && \text{при } \nu_{n,m} < 0, \\ (\vec{\Phi}_{tr})_{n,m}^{(-)} &= 0 && \text{при } \nu_{n,m} > 0 && (E_n > E_m), \\ (\vec{\Phi}_{tr})_{n,m}^{(-)} &= (\vec{\Phi}_{tr})_{n,m} && \text{при } \nu_{n,m} < 0 && (E_n < E_m). \end{aligned} \right\} \quad (367)$$

Для энергии, излучённой в направлении \vec{n} на единицу телесного угла $d\Omega$ в единицу времени, мы получаем, следовательно, согласно (358), (364), (366), (367) на основании предписания (363) выражение

$$(\vec{S}) = \frac{c}{4\pi} \sum_m 2[\vec{E}^{(+)} \times \vec{H}^{(-)}]_{m;m} = \frac{e^2}{c^3} \frac{1}{4\pi} 2 \sum_{m(E_m < E_n)} |C_{n,m}|^2, \quad (368)$$

где сокращённо обозначено

$$\vec{C}_{n,m} = \frac{\hbar}{2m} i v_{n,m} \int dV^{(1)} \dots dV^{(N)} \sum_{a=1}^N e^{i\vec{k}_{n,m} \cdot \vec{x}^{(a)}} \frac{1}{i} \times \\ \times \left(u_n^* \frac{\partial u_m}{\partial x_{tr}^{(a)}} - u_m \frac{\partial u_n^*}{\partial x_{tr}^{(a)}} \right). \quad (364')$$

Это есть излучаемая энергия, если сначала имело место только состояние n . Таким образом, то обстоятельство, что здесь приходится суммировать только по таким состояниям m , для которых $E_m < E_n$, существенно связано с особым предписанием (363). Если бы мы взяли также $[E^{(-)} \times H^{(+)}]$, то, в противоречии с законом сохранения энергии, получилось бы излучение, которое соответствует переходу в состояние с энергией, большей, чем энергия начального состояния.

Если вначале имеется не только одно единственное стационарное состояние, а волновой пакет

$$\sum_{(n)} c_n u_n,$$

то согласно (354) нужно построить следующее образование:

$$(\vec{S}) = \frac{e^2}{c^3} \frac{1}{4\pi} \sum_{n,m} 2c_n^* \left(\sum_l C_{n,l} C_{l,m} \right) e^{i v_{n,m} t} c_m, \quad (369)$$

где $E_l < E_n$, $E_l < E_m$. При образовании среднего по времени исчезают, однако, все члены, для которых $v_{n,m} \neq 0$, т. е. E_n и E_m различны. Вырожденная система может, конечно, иметь несколько состояний с одинаковой энергией $E_n = E_m$.

Упомянем также, что из (364) вытекает простое правило отбора, которое строго справедливо для произвольно коротких длин волн (мультипольное излучение). Если как в начальном, так и в конечном состоянии собственные функции инварианты относительно вращений, что согласно § 13 соответствует равному нулю моменту количества движения, то $S_{n,m}$ обращается в нуль и вместе с тем исчезает излучение. Действительно, если вращать

координатную систему вокруг оси, параллельной $\vec{k}_{n,m}$, то в этом случае подинтегральное выражение сохраняет своё значение и свою форму; с другой стороны, благодаря

дифференцированию по \vec{x}_{tr} оно преобразуется как вектор (например меняет знак при повороте на 90°); то и другое

совместимо только при $\vec{S}_{n,m}$, равном нулю. Скачок момента количества движения J от значения 0 к значению 0 при спонтанном излучении, следовательно, строго исключается. Легко видеть, что это остаётся справедливым и при учёте спина (ср. § 13), если под J понимать суммарный вращательный момент спина и орбиты. Для одного результирующего вращательного момента орбиты L это правило справедливо только лишь, когда можно пренебречь взаимодействием орбитального момента со спиновым.

До сих пор мы не делали никаких предположений об отношении размеров системы к длине волн излучаемого света. Если это отношение мало, то собственные функции заметно отличны от нуля только при малых значениях

$(\vec{k}_{n,m} \vec{x})$ и тогда целесообразно разложить экспоненциаль-

ную функцию $e^{-i(\vec{k}_{n,m} \vec{x}^{(a)})}$ в степенной ряд. Отдельные члены этого разложения соответствуют дипольному, квадрупольному, ... излучениям. В частности, если за-

менить $e^{-i(\vec{k}_{n,m} \vec{x}^{(a)})}$ единицей, получается дипольное излучение. Такая замена равносильна полному пренебрежению

членом $\frac{1}{c}(\vec{x}_Q \vec{n})$, учитывающим запаздывание в аргументе времени для тока. Поскольку матричные элементы коор-

динат $\vec{x}_{n,m}$ связаны, в силу уравнения непрерывности, с матричными элементами тока соотношением

$$i v_{n,m} \vec{x}_{n,m} = \vec{i}_{n,m}$$

[ср. § 5 уравнения (75')], для дипольного излучения можно также положить

$$(\vec{C}_{n,m})_{\text{дипольн.}} = -v_{n,m}^2 \vec{x}_{n,m} \quad (370)$$

и, согласно (368), получаем

$$(\vec{S})_{n, \text{дипольн.}} = \frac{e^2}{c^3} \frac{1}{4\pi} 2 \sum_{m (E_m < E_n)} v_{n,m}^4 |\vec{x}_{tr,n,m}|^2. \quad (371)$$

Это соотношение Гейзенберг первоначально использовал для определения матриц.

Подобным образом можно трактовать также дисперсию. Но в этом случае прежде всего необходим аппарат теории возмущений, чтобы учесть влияние внешнего поля на собственную функцию атома. Мы введём это возмущение в вычисления так, как будто бы речь шла о классическом, изменяющемся во времени, электромагнитном поле с заданной зависимостью от времени, и будем описывать его векторным потенциалом $\Phi_k(x, y, z; t)$. Разумеется, поле падающей световой волны вовсе не может быть классически измеримой величиной, однако, получаемые следствия так же, как и обсуждаемое ниже квантование поля излучения, оправдывают такой способ рассмотрения. В случае плоской волны

$$\Phi_k = \varphi_k^{(+)} e^{i(vt - \vec{k}\vec{x})} + \varphi_k^{(-)} e^{-i(vt - \vec{k}\vec{x})}, \quad (372)$$

причём

$$\varphi_k^{(-)} = (\varphi_k^{(+)})^*, \quad (373)$$

т. е. $\varphi_k^{(-)}$ комплексно сопряжено с $\varphi_k^{(+)}$. Среднее по времени значение квадрата силы поля равно

$$\bar{E}^2 = v^2 2\varphi_k^{(+)} \varphi_k^{(-)} = 2v^2 |\varphi_k|^2. \quad (374)$$

Для световых волн всегда можно положить скалярный потенциал равным нулю, а векторный потенциал нормировать согласно

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial \Phi_k}{\partial x_k} = 0, \quad (372')$$

т. е. выбрать его трансверсальным. Тогда, согласно (97), оператор возмущений функций имеет вид¹⁾:

$$\vec{\Omega} = \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \sum_{c=1}^N \left\{ \frac{e}{c} 2 \sum_{h=1}^3 \Phi_k \left(x^{(a)} \frac{\partial}{\partial x_h^{(a)}} + \frac{1}{2m} \frac{e^2}{c^2} \sum_{h=1}^3 \Phi_h^2(x^{(a)}) \right) \right\}.$$

Если

$$\vec{i}_{a,h}^{(0)} = \frac{\hbar}{2m} \frac{1}{i} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_h^{(a)}} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_h^{(a)}} \right)$$

— невозмущённый ток, то матрица пропорциональной Φ_k части возмущающей функции даётся выражением

$$\Omega_{n,m}^{(1)} = \frac{e}{c} \left\{ \sum_{a=1}^N \sum_{k=1}^3 \Phi_k(x^{(a)}) \vec{i}_k^{(a)} \right\}_{n,m}. \quad (373)$$

Далее, согласно (100), к \vec{i} добавляется член возмущения:

$$\vec{i}_a^{(1)} = \frac{e}{mc} \vec{\Phi}(x^{(a)}) \psi^* \psi, \quad (374)$$

пропорциональный Φ_k . Оба добавочных члена — первый в функции Гамильтона, второй в векторном потенциале — являются согласно (356) причиной появления матричных элементов векторного потенциала излучаемого света, пропорциональных амплитуде падающего света. Членов высших порядков мы здесь не касаемся²⁾. (Следует только отметить, что выражение (373) для возмущающей функции сохраняется также и в релятивистской теории, несмотря на то, что оператор тока там иной; (374), напротив, там несправедливо.)

Применение аппарата теории возмущений к общей формуле (356) даёт следующее общее выражение для матричного элемента рассеянного излучения

$$(\vec{\Phi}_{tr})'_{n,m} = \sum_{k=1}^3 \{ \varphi_k^{(+)} \vec{a}_{k;n,m} e^{i(\nu_{n,m} + \nu)t} + \varphi_k^{(-)} \vec{b}_{k;n,m} e^{i(\nu_{n,m} - \nu)t} \}, \quad (359)$$

¹⁾ Мы заменяем введённый там заряд $e^{(a)}$ или e_k зарядом электрона ($-e$).

²⁾ О проведении вычислений см. кроме цитированной работы Клейна, особенно для случая малых длин волн: I. Waller, *Naturwissenschaften*, 15, 969, 1927; *Phil. Mag.*, 4, 1228, 1927.

если ограничиться выражениями, линейными по отношению к потенциалу Φ_k падающей волны. Величины, относящиеся к рассеянному свету, отмечены здесь штрихами в отличие от величин, относящихся к падающему свету. Напряжённости поля получаются отсюда дифференцированием по времени (с последующим делением на c). В силу эрмитовости оператора Гамильтона, матрица $(\vec{\Phi}_{tr})'_{n,m}$ сама тоже эрмитова; следовательно [ср. (373)],

$$\vec{b}_{k; n, m} = \vec{a}_{k; n, m}^* \quad (360)$$

или, иначе говоря, \vec{a}_k не является эрмитовой матрицей, но \vec{b}_k есть матрица, эрмитовски сопряжённая \vec{a}_k .

Применим теперь общее предписание (363) для получения выражения излучённой энергии. Если начальное состояние было n , то с частотой $\nu' = \nu_{n, m} + \nu$ излучается энергия:

$$S_n = \frac{c}{4\pi} \nu'^2 2 |\varphi_k|^2 \vec{a}_{k; n, m} \vec{b}_{k; n, m} = \frac{c}{4\pi} \nu'^2 2 |\varphi_k|^2 |\vec{a}_{k; n, m}|^2, \quad (361_1)$$

если $\nu' = \nu_{n, m} + \nu > 0$, а с частотой $\nu' = \nu_{n, m} - \nu$ энергия:

$$S_n = \frac{c}{4\pi} \nu'^2 2 |\varphi_k|^2 \vec{b}_{k; n, m} \vec{a}_{k; n, m} = \frac{c}{4\pi} \nu'^2 2 |\varphi_k|^2 |\vec{a}_{k; n, m}|^2, \quad (362_2)$$

если $\nu' = \nu_{n, m} - \nu > 0$.

Если бы мы не применяли особых правил разделения величин на члены, пропорциональные $e^{i\omega t}$, и члены, пропорциональные $e^{-i\omega t}$ ($\omega > 0$), то состояние m и состояние n ничем не отличались бы друг от друга, и для обоих состояний мы получили бы излучение $\frac{1}{2} (S_n + S_m)$. Однако в особом случае $n = m$, $\nu = \nu'$, предписание, о котором идёт речь, не даёт ничего нового, так что случай рассеяния без изменения частоты может быть рассмотрен и без применения этого предписания.

Что же касается общей формы для $\vec{a}_{k; n, m}$ и её обсуждения, то мы отсылаем к статье Вентцеля¹⁾. Укажем только на один частный случай ввиду его принципиального значения. Мы рассмотрим падающее излучение, ча-

¹⁾ G. Wentzel, *Handb. d. Phys.*, 24/I, гл. 5.

стота которого ν велика по сравнению с работой выхода электрона из системы. Можно показать, что в этом случае в (359) играют существенную роль члены, обязанные своим происхождением смешанным членам (374) тока, в то время как членами, связанными с изменением собственных функций благодаря внешнему возмущению, можно пренебречь. Согласно (356), первые члены дают следующее выражение для векторного потенциала рассеянного излучения:

$$(\vec{\Phi}_{tr})'_{n,m} = \frac{e}{mc} \vec{\Phi}_{tr}^{(+)} e^{i(\nu_{n,m} + \nu)t} \times \\ \times \sum_{a=1}^N \int e^{-i(\vec{K}x^{(a)} + i(\vec{K}'x^{(a)})} u_n^* u_m dV^{(1)} \dots dV^{(N)}, \quad (375)$$

где \vec{K} и \vec{K}' — волновые векторы падающей и рассеянной световых волн:

$$\vec{K} = \frac{\nu}{c} \vec{n}, \quad \vec{K}' = \frac{\nu'}{c} \vec{n}'.$$

Рассмотрим несколько более общий случай, когда падающий свет с частотой ν каким-либо образом составлен из плоских волн различных направлений, и векторный потенциал его задан в виде

$$\Phi_k = \Phi_k^{(+)}(x_1, x_2, x_3) e^{i\nu t} + \Phi_k^{(-)}(x_1, x_2, x_3) e^{-i\nu t}.$$

Тогда вместо (376) получаем

$$(\vec{\Phi}_{tr})'_{n,m} = \frac{e}{mc} e^{i(\nu_{n,m} + \nu)t} \times \\ \times \sum_{a=1}^N \int \vec{\Phi}_{tr}^{(+)}(x_1^{(a)}, x_2^{(a)}, x_3^{(a)}) e^{i(K'x)} u_n^* u_m dV^{(1)} \dots dV^{(N)}. \quad (376)$$

Суммарная интенсивность света всех частот ν' , рассеянного в одном направлении, если заменить \vec{K}' одним единственным средним значением, в силу условия полноты, может быть тогда написана в виде:

$$S = \frac{1}{4\pi} \frac{\nu'^2}{m^2 c^3} \times \\ \times 2 \int \left| \sum_{a=1}^N \vec{\Phi}_{tr}^{(+)}(x_1^{(a)}, x_2^{(a)}, x_3^{(a)}) e^{i(\vec{K}'x^{(a)})} \right|^2 u_n^* u_n dV^{(1)} \dots dV^{(N)}, \quad (377)$$

а для плоской падающей волны

$$S = \frac{1}{4\pi} \frac{e^2}{m^2 c^2} 2 \left| \sum_{a=1}^N e^{i(-\vec{k} + \vec{k}') \cdot \vec{x}^{(a)}} \right|^2 u_n^* u_n dV^{(1)} \dots dV^{(N)}. \quad (377')$$

В это выражение входит только плотность начального состояния $u_n^* u_n$, а остальные состояния не входят вовсе. Поэтому в границах применимости этой формулы принципиально возможно измерить плотность распределения частиц в этом состоянии, применяя, например, сходящийся пучок света, интенсивность которого в одном месте много больше, чем во всем остальном пространстве. Точно так же можно с помощью исследования спектрального распределения интенсивности рассеянного света в плоской падающей волне измерить распределение импульсов связанных частиц в начальном состоянии, используя (376). Об этом была уже речь в § 2 и § 11. Однако справедливость рассматриваемых формул и вместе с тем возможность простого и прямого определения плотности частиц в пространстве координат и в пространстве импульсов ограничивается релятивистскими поправками, которыми мы здесь пренебрегаем. Когда частота рассеянного света делается сравнимой с mc^2/\hbar , возможность прямого определения плотности и распределения токов по многим причинам утрачивается (ср. раздел в § 5).

В предыдущих рассуждениях речь шла только об излучении и рассеянии света, но не о сопровождающем эти процессы изменении стационарных состояний атома. От полной теории, однако, следует потребовать, чтобы она давала также способ расчёта для нарастающей во времени вероятности найти атом при излучении в менее возбуждённом состоянии. Для того чтобы установить возможно ли это, мы исследуем снова влияние падающей плоской волны на атом, пользуясь возмущающей функцией (373); но будем искать в этом случае зависящее от времени решение, которое при $t=0$ совпадает с невозмущённым решением. Таким образом мы представим возмущённую собственную функцию в виде

$$\psi = \sum c_n(t) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} u_n$$

и разложим $c_n(t)$ по степеням амплитуды падающей волны

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots,$$

где $c_n^{(0)}$ не зависят от времени, а $c_n^{(1)}$, $c_n^{(2)}$ обращаются в нуль при $t=0$, причём верхний значок при коэффициентах $c_n^{(k)}$ указывает, в какой степени в них входит амплитуда падающей волны (ср. § 10). Тогда

$$c_m^{(1)} = i \sum_n T_{m,n} c_n^{(0)}, \quad (378)$$

где T , как показывают вычисления, — эрмитова матрица¹⁾. Для плоской падающей волны с напряжённостью поля

$$\vec{E} = \vec{E}^{(+)} e^{i(\nu t - \vec{K} \vec{x})} + \vec{E}^{(-)} e^{-i(\nu t - \vec{K} \vec{x})}$$

T имеет вид

$$\begin{aligned} T_{m,n} = & \frac{e^{i(-\nu_{n,m} + \nu)t} - 1}{-\nu_{n,m} + \nu} \vec{V}_{n,m} \vec{E}^{(+)} + \\ & + \frac{e^{-i(\nu_{n,m} + \nu)t} - 1}{\nu_{n,m} + \nu} \vec{V}_{n,m}^* \vec{E}^{(-)}. \end{aligned} \quad (379)$$

Матрица $V_{n,m}$ здесь не обязательно эрмитова. Особый интерес представляет здесь поведение решений при резонансе, т. е. при таких ν , когда один из знаменателей в (379) исчезает ($\nu = -\nu_{n,m} = \nu_{m,n}$ или $\nu = \nu_{n,m}$). Это приводит к таким членам в $|c_m^{(1)}(t)|^2$, которые после суммирования по малому интервалу ν линейно возрастают со временем. Эти члены равны (остальные опускаем):

$$\begin{aligned} |c_m^{(1)}(t)|^2 = & c_m^{*(1)}(t) c_m^{(1)}(t) = \\ = & \sum_n \left| \frac{e^{i(-\nu_{n,m} + \nu)t} - 1}{-\nu_{n,m} + \nu} \right|^2 (\vec{V}_{m,n}^* \vec{E}^{(-)}) (\vec{V}_{m,n} \vec{E}^{(+)}) + \\ & + \sum_n \left| \frac{e^{i(\nu_{n,m} + \nu)t} - 1}{\nu_{n,m} + \nu} \right|^2 (\vec{V}_{n,m} \vec{E}^{(+)}) (\vec{V}_{n,m}^* \vec{E}^{(-)}). \end{aligned} \quad (380)$$

Мы получаем в точке резонанса $\nu = \nu_{n,m}$ (энергия конечного состояния меньше энергии начального) после сум-

¹⁾ Ср. G. Wentzel, *Handb. d. Phys.*, 24/1, Kap. 5.

мирования по ν

$$|c_m^{(1)}(t)|^2 = t \cdot B_m^n \rho_\nu,$$

где B_m^n зависит ещё от направления и поляризации падающей волны. Аналогично при $\nu = \nu_{m,n}$ (энергия конечного состояния больше энергии начального)

$$|c_m^{(1)}(t)|^2 = t \cdot B_n^m \rho_\nu,$$

где ρ_ν — плотность энергии падающего излучения. Первый случай соответствует индуцированному излучению, второй — поглощению. *Спонтанное излучение при этом не получается.* Чтобы получить его, нужно ввести новое, на первый взгляд произвольное предписание, аналогичное предписанию I.

Предписание II. Нужно формально записать $|c_m^{(1)}(t)|^2$ с последовательностью множителей $c_m^{(1)} c_m^{(1)}$ и обратить внимание на последовательность множителей $E^{(+)}$ и $E^{(-)}$; смешанные члены, в которых $E^{(+)}$ стоит впереди $E^{(-)}$, нужно отбрасывать и сохранять члены, в которых $E^{(-)}$ стоит впереди $E^{(+)}$, заменяя при этом ρ_ν на $\rho_\nu + \frac{2\hbar\nu^3}{c^3}$.*

Оправдание введённых здесь ad hoc предписаний получается только из квантования электромагнитного поля по Дираку. С другой стороны, уже предписание I достаточно для того, чтобы иметь возможность обсудить без противоречий интерференционные опыты и вопросы когерентности. Это будет показано в следующем параграфе.

§ 16. Применение к свойствам когерентности излучения ¹⁾

Мы рассмотрим прежде всего спонтанное излучение света и исследуем, когда спонтанно излучённый двумя атомами свет будет когерентным. Пусть начальное состояние описывается коэффициентами разложения c_n и соответственно c'_n волновых функций атомов по собственным функциям этих атомов. Матричные элементы суммарной напряжённости электрического поля в точке P имеют

¹⁾ Здесь речь идёт только о некоторых принципиальных замечаниях общего рода. Отдельные частности и литературные ссылки см. у Вентцеля (*Handb. d. Phys.* 24/1, гл. 5).

тогда вид

$$= \delta_{n',m'} a_{n,m} e^{i\nu_{n,m} \left(t - \frac{R_P}{c}\right)} + \delta_{n,m} a_{n',m'} e^{i\nu_{n',m'} \left(t - \frac{R_P}{c}\right)}. \quad (381)$$

Здесь n, m — квантовые числа рассматриваемых пар состояний для одного атома, а n', m' — для другого атома. Матричные элементы излучённого первым (вторым) атомом поля диагональны по отношению к квантовым числам второго (первого) атома. Если атомы одинаковы, то для подобных переходов $a_{n,m} = a_{n',m'}$, $\nu_{n,m} = \nu_{n',m'}$. Далее, пусть R_P, R'_P — расстояния атомов (которые мы пока считаем фиксированными) от точки наблюдения. Тогда для математических ожиданий квадратов напряжённостей электрического поля в точке P , видоизменённых согласно предписанию 1, мы получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} (\vec{E}^{(+)} \vec{E}^{(-)}) &= \sum_{\substack{n,n' \\ m,m'}} c_n^* c_{n'}^* E_{n,n';1,1}^{(+)} E_{1,1';m,m'}^{(-)} c_m c_{m'} = \\ &= \sum_{\substack{E_l < E_n \\ E_l < E_m}} c_n^* a_{n,1} a_{1,m} c_m e^{i\nu_{n,m} t} + \\ &+ \sum_{\substack{E_{l'} < E_{m'} \\ E_{l'} < E_{n'}}} c_{n'}^* a_{n',1'} a_{1',m'} c_{m'} e^{i\nu_{n',m'} t} + \\ &+ \sum_{\substack{E_m < E_n \\ E_{n'} < E_{m'}}} c_n^* c_{n'}^* a_{n,m} a_{n',m'} c_m c_{m'} \times \\ &\times e^{i \left[(\nu_{n,m} + \nu_{n',m'}) t - \frac{1}{c} (\nu_{n,m} R_P + \nu_{n',m'} R'_P) \right]} + \\ &+ \sum_{\substack{E_m < E_n \\ E_{n'} < E_{m'}}} c_m^* c_{m'}^* a_{m,n} a_{m',n'} c_n c_{n'} \times \\ &\times e^{i \left[(\nu_{n,m} + \nu_{n',m'}) t - \frac{1}{c} (\nu_{m,n} R_P + \nu_{m',n'} R'_P) \right]}. \end{aligned}$$

Первые два члена соответствуют наличию одного только первого или второго атома, оба последние члена

представляют собой интерференционные выражения, которые нас сейчас и интересуют. Принимая во внимание, что $a_{n,m}$, $a_{n',m'}$ представляют собой эрмитовы матрицы, диагональные элементы которых исчезают, можно придать средним по времени величинам очень простую форму, если, как мы здесь будем делать, не рассматривать вырождения. В обеих первых суммах тогда только члены с $m = n$, $m' = n'$ дают отличную от нуля часть, тогда как в обеих последних суммах остаются члены с $m' = n$, $n = m$.

Интенсивность света частоты $\nu_{n,m}$ в точке P равна тогда окончательно

$$J(\nu_{n,m}) = |a_{n,m}|^2 \{ |c_n|^2 + |c'_n|^2 + c_n^* c_m c'_n c'_m e^{-i \frac{\nu_{n,m}}{c} (R_P - R'_P)} + \\ + c_n c_m^* c_n^* c'_m e^{+i \frac{\nu_{n,m}}{c} (R_P - R'_P)} \}.$$

Это выражение можно ещё упростить, если ввести геометрическую разность хода

$$\Delta = \frac{\nu_{n,m}}{c} (R_P - R'_P)$$

и фазы амплитуд вероятностей для атомов согласно:

$$c_n = |c_n| e^{i\delta_n}, \quad c_m = |c_m| e^{i\delta_m}, \quad \delta_{n,m} = \delta_n - \delta_m, \\ c'_n = |c'_n| e^{i\delta'_n}, \quad c'_m = |c'_m| e^{i\delta'_m}, \quad \delta'_{n,m} = \delta'_n - \delta'_m.$$

Тогда

$$J(\nu_{n,m}) = |a_{n,m}|^2 \{ |c_n|^2 + |c'_n|^2 + \\ + 2 |c_n| |c_m| |c'_n| |c'_m| \cos(\delta_{n,m} - \delta'_{n',m'} + \Delta) \}. \quad (382)$$

Отсюда прежде всего видно, что если вначале один из рассматриваемых атомов с достоверностью находился только в возбуждённом состоянии ($c_m = 0$ или $c'_m = 0$), то никакой интерференции не получается. Далее видно, что никогда фаза δ_n отдельной собственной функции атома не может быть доступна наблюдению. Возбуждая оба атома одинаковым светом, можно создать пакет, состоящий из основного и одного возбуждённого состояния с постоянным фазовым соотношением $\delta_{n,m} - \delta'_{n',m'}$ для обоих атомов. В этом смысле, следовательно, резонансное излучение когерентно.

Поучительно разобрать вкратце некоторую модификацию этого случая, которая получается, если рассматривать атомы как подвижные. Мы должны тогда ввести, кроме состояний $n, m \dots$ электронов атома, ещё координаты Q его центра тяжести, так что амплитуды вероятности c_n теперь станут функциями Q . Далее, для того чтобы найти, каким образом видоизменяются матричные элементы напряжённости поля, мы вернёмся обратно к выражениям (352) классической теории. Чтобы сделать возможным переход к содержащемуся в (353) запаздыванию с помощью плоских волн, мы должны предположить, что расстояние точки наблюдения от атома велико также по сравнению с размерами волнового пакета, описываемого $c_n(Q)$ (т. е. по сравнению с неточностью определения места центра тяжести атома), что, несомненно, может осуществиться. Далее влиянием тока самих атомных ядер при излучении света можно всегда пренебречь. В выражениях (353) для запаздывающего тока электронов после интегрирования по относительным координатам частиц, однако, всё же остаются, вследствие запаздывания, координаты центров тяжести, именно \vec{x}_Q , которое представляет собой сумму относительных координат и координат центра тяжести. И, наконец, в матричном элементе излучённого поля для стационарных состояний (n, m) электронной системы, зависимость которого от времени описывается фактором $e^{i\nu_{n,m}t}$, остаётся, следовательно, множитель

$$e^{i\nu_{n,m} \frac{1}{c} (\vec{Q} \vec{n})} = e^{i(\vec{K}_{n,m} \vec{Q})},$$

где $\vec{K}_{n,m} = \frac{\nu_{n,m}}{c} \vec{n}$. Никаким другим образом координаты центра тяжести системы не входят. Итак, всюду вместо матричного элемента $a_{n,m}$ в n -пространстве входит матричный элемент

$$a_{n,m}(Q, Q') = a_{n,m} e^{i(\vec{K}_{n,m} \vec{Q})} \delta(Q - Q') \quad (382')$$

в (n, Q) -пространстве. Поучительно перейти с помощью

$$c_n(P) = \int c_n(Q) e^{-\frac{i}{\hbar} (\vec{P} \vec{Q})} dQ$$

[ср. § 3 уравнение (27)] к импульсному пространству атома. В этом пространстве имеем:

$$a_{n,m}(P, P') = a_{n,m} \delta(-\vec{P} + \vec{P}' + \hbar \vec{k}_{n,m}). \quad (383')$$

Это означает, что испускание света связано с отдачей, которая точно соответствует сохранению импульса, если приписать излучённому свету импульс $\hbar\nu/c$ в направлении его распространения, в согласии с результатом Эйнштейна, полученным из представления о световых квантах. Отдача при испускании света принципиально наблюдается всегда, когда размеры пакета $c_n(P)$ начального состояния в пространстве импульсов малы по сравнению с $\hbar\nu/c$. Отдача должна также проявиться в виде эффекта Доплера, которым мы здесь пренебрегаем, что вполне последовательно, если всюду пренебрегать давлением света. Если сделать такое пренебрежение, то суммарная интенсивность излучённого в направлении \vec{n} света при начальном состоянии атома $c_n(Q)$ равна снова

$$J(\nu_{n,m}) = |a_{n,m}|^2 |c_n|^2,$$

где под $|c_n|^2$ теперь понимается

$$|c_n|^2 = \int |c_n(Q)|^2 dQ = \int |c_n(P)|^2 dP. \quad (384)$$

Применение к интенсивности света, излучённого двумя одинаковыми атомами, приводит теперь к выражению

$$J(\nu_{n,m}) = |a_{n,m}|^2 \{ |c_n|^2 + |c'_n|^2 + 2 |C_{n,m}| |C'_{n,m}| \cos(\delta_{n,m} - \delta'_{n,m'} + \Delta) \}, \quad (382')$$

где для сокращения положено вместо (382)

$$\begin{aligned} C_{n,m} &= |C_{n,m}| e^{-i\delta_{n,m}} = \\ &= \int c_n^*(Q) e^{i(\vec{k}_{n,m}\vec{Q})} c_m(Q) dQ = -C_{m,n}^* \end{aligned} \quad (385)$$

и аналогично для $C'_{n,m}$. При этом в $\Delta = \frac{\nu_{n,m}}{c}(R_P - R'_P)$ R_P и R'_P отсчитывается от фиксированной точки (той же самой, что и для Q в (385) и Q' при аналогичном определении $C'_{n,m}$). Значение полученного результата заключается в следующем: для когерентности резонансного

излучения не только необходимо, чтобы в начальном состоянии обоих атомов были представлены как основное, так и возбуждённое состояния, но необходимо также, чтобы эти состояния могли осуществиться с не исчезающей вероятностью при одинаковом положении центров тяжести атомов. Если же функции $c_n(Q)$ и $c_m(Q)$ нигде не перекрываются, как это имеет место в том случае, когда оба состояния полностью отделены друг от друга внешними силами, то $c_n^*(Q)c_m(Q)$ всюду исчезает, и вместе с тем исчезает также интерференционный член в (382'). Мы имеем здесь пример того, что каждое устройство, позволяющее установить, в каком состоянии находится атом, уничтожает возможность интерференции между излучением этого атома и излучением другого атома¹⁾.

Исследуем, наконец, вопрос об когерентности излучения, испущенного одним атомом в различных направлениях \vec{n}_1 и \vec{n}_2 , так как этот вопрос касается часто обсуждавшегося ранее противоречия между «игольчатым излучением» и «шаровой волной». Всякое устройство для исследования интерференционной способности излучения в этих направлениях основывается на том, что оба световых пучка в конце-концов соединяются в точке P после соответствующих отражений и преломлений. В этой точке, стало быть, классическая напряжённость поля представляет собой линейную комбинацию из $E(\vec{n}_1)$ и $E(\vec{n}_2)$, т. е. из напряжённостей поля пучков, которые первоначально были испущены в направлениях \vec{n}_1 и \vec{n}_2 . Пусть J_0 — сумма тех интенсивностей, излучённых в этом направлении пучков, которые наблюдались бы в точке P при отсутствии интерференции. Тогда действительная интенсивность равна по классической теории

$$J = J_0 + \text{const } E(\vec{n}_1) E(\vec{n}_2).$$

Мы, таким образом, должны вычислить квантовоматематически математическое ожидание

$$E^{(+)}(\vec{n}_1) E^{(-)}(\vec{n}_2) + E^{(+)}(\vec{n}_2) E^{(-)}(\vec{n}_1)$$

¹⁾ См. также W. Heisenberg, *Zs. f. Phys.*, **43**, 172, 1927; в то время вопрос о связи фазы собственных функций атома со свойствами излучённого света оставался ещё неясным.

в качестве меры когерентности пучков. Это последнее пропорционально

$$D = \int dQ c_n^*(Q) \int a_{n,m}(\vec{n}_1; Q, Q'') a_{m,n}(\vec{n}_2; Q'', Q') \times \\ \times dQ'' c_n(Q') dQ' + \dots$$

или также

$$D = \int dP c_n^*(P) \int a_{n,m}(\vec{n}_1; P, P'') a_{m,n}(\vec{n}_2; P'', P') \times \\ \times dP'' c_n(P') dP' + \dots$$

причём $+\dots$ обозначает члены, которые получаются из выписанных перестановкой n_1 и n_2 . На основании (383) и (383') получаем сразу

$$D = 2 \int |c_n(Q)|^2 \cos \frac{v_{n,m}}{c} [(\vec{n}_2 - \vec{n}_1) \vec{Q}] dQ \quad (386)$$

или также

$$D = \int \left\{ c_n^*(P) c_n \left(P + \frac{\hbar v_{n,m}}{c} (n_2 - n_1) \right) + \right. \\ \left. + c_n(P) c_n^* \left(P + \frac{\hbar v_{n,m}}{c} (n_2 - n_1) \right) \right\} dP. \quad (386')$$

Из этих выражений следует, что возможность установить с помощью измерения отдачи, был ли световой квант излучён в направлении \vec{n}_1 , или в направлении \vec{n}_2 , и устройство, которое позволяет получить интерференцию между излучёнными в направлениях \vec{n}_1 и \vec{n}_2 световыми пучками, взаимно исключают друг друга.

Действительно, требуемое измерение отдачи возможно только тогда, когда начальный импульс частицы определён точнее, чем $\frac{\hbar v_{n,m}}{c} |n_2 - n_1|$. Но тогда $c_n(P)$ должно быть отлич-

но от нуля только в области ΔP , меньшей чем $\frac{\hbar v_{n,m}}{c} |n_2 - n_1|$,

а в этом случае D всегда исчезает, что очевидно из (386').

С другой стороны, чтобы иметь возможность с несомненностью определить разность хода между пучками, излучёнными по направлению \vec{n}_1 и \vec{n}_2 , $c_n(Q)$ должно отличаться от нуля лишь в области ΔQ , малой по сравнению с $\frac{c}{v_{n,m}} \frac{1}{|n_2 - n_1|}$.

Оба эти требования противоречат друг другу, что

является непосредственным следствием соотношения неопределённости Гейзенберга, которое проявляется здесь уже в проведённом пересчёте от $c_n(Q)$ к $c_n(P)$.

Подобно тому, как мы сделали это здесь для простейшего случая излучения света, можно также обсудить когерентность *рассеянного* атомом излучения. Следует также ещё отметить, что данный здесь способ рассмотрения не является полным, так как мы пренебрегали затуханием излучения. Оно может быть рассмотрено только с помощью изложенной в части II квантовой теории света Дирака.

ЧАСТЬ II

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ТЕОРИИ

§ 1. Принципиальные замечания о современном состоянии релятивистской квантовой механики

В противоположность нерелятивистской квантовой механике, которая может считаться логически замкнутой, в релятивистской области мы стоим перед нерешёнными ещё принципиальными проблемами, которые упираются в вопросы атомизма электрического заряда, отношения масс электрона и протона и строения ядра. Можно сказать, что в настоящее время мы имеем лишь отдельные части релятивистской волновой механики. Во-первых, это квантовая теория релятивистской проблемы одного тела, описывающая поведение электрической элементарной частицы (электрона или протона, но не произвольной макроскопической частицы) в заданном внешнем электромагнитном потенциальном поле. Во-вторых, это теория поля излучения и его взаимодействия с материей, содержащая предположение об энергии и импульсе излучения, вытекающее из представления о световых квантах. Обе названные теории, обязанные своим происхождением Дираку¹⁾, являются принципиальным успехом волновой механики; однако, последовательное развитие этих теорий приводит к характерным трудностям. Так, теория проблемы одного тела приводит к существованию состояний электрона с отрицательной кинетической энергией (отрицательной массой)

¹⁾ Теория электрона: P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. London*, 117, 610; 118, 341, 1928; Теория излучения, *ibid.*, 114, 243, 710, 1927; см. также книгу П. А. М. Дирака, *Квантовая механика*, ОНТИ, 1937.

и к возможности перехода электронов в эти состояния из обычных состояний с положительной массой, причём эти переходы могут осуществляться как под влиянием соответственного внешнего поля, так и вследствие спонтанной или индуцированной внешним излучением, эмиссии света. (§ 5.) Так как опыт не даёт нам частиц с отрицательной массой, то это следствие нужно рассматривать как недостаток теории. Независимо от этой трудности существует ещё другая трудность, возникающая, когда применяют теорию излучения к взаимодействию электрона со своим собственным полем. Тогда оказывается, что не существует стационарного решения с конечной энергией для общей системы, состоящей из электрона и квантованного электрического поля. Это происходит потому, что та часть оператора Гамильтона, которая описывает взаимодействие частицы с внешним полем, представляет собой, по принципу соответствия, аналогию классического взаимодействия точечной частицы с её собственным полем, а собственная энергия такой частицы будет и по классической теории бесконечно большой. Правда, формально можно, хотя и не без некоторого произвола, избежать появления этой бесконечности, изменив функцию Гамильтона таким образом, чтобы она отражала в духе принципа соответствия взаимодействие частицы *конечного* размера с полем (§ 8); однако, при этом мы не смогли бы сохранить релятивистскую инвариантность теории. Указанная трудность препятствует развитию дираковской теории излучения в строгое и непротиворечивое релятивистское рассмотрение проблемы многих тел.

При таком положении дел во многих случаях трудно точно ограничить физическую область применимости существующих в настоящее время частей релятивистской квантовой механики, тем более, что её результаты охватывают оба известных предельных случая: нерелятивистскую квантовую механику и релятивистскую классическую теорию. Едва ли это ограничение можно провести при современном состоянии наших знаний однозначным образом во всех случаях.

Мы должны в дальнейшем удовольствоваться разработкой обеих релятивистских теорий, чтобы получить из них новые физические представления и затем сравнить

результаты с действительностью. В §§ 2—5 это сделано для релятивистской теории проблемы одного тела, в §§ 6—8 для теории излучения и совокупности обеих теорий.

§ 2. Волновое уравнение Дирака для электрона

а) *Случай свободного электрона.* Фундаментальная связь между импульсом и энергией, с одной стороны, волновым вектором и частотой волны, — с другой, из которой мы исходили в части I, § 1:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad E = \hbar \nu, \quad (1.1)$$

уже является релятивистски инвариантной. Величины $\left(\vec{p}, i \frac{E}{c}\right)$, $\left(\vec{k}, i \frac{\nu}{c}\right)$ образуют четырёхмерные векторы, и следовательно, трансформируются при лоренцовом преобразовании одинаковым образом. Поэтому естественно сохранить соотношения (1.1) в качестве основных положений и в релятивистской квантовой теории. В классической релятивистской механике мы имеем [см. часть I, уравнение (5)] следующее соотношение между энергией и импульсом частицы с массой покоя m :

$$\frac{E}{c^2} = m^2 c^2 + \sum_{i=1}^3 p_i^2. \quad (1)$$

Из этого соотношения и соотношения (1) следует:

$$\frac{\nu^2}{c^2} = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} + \sum_i k_i^2 = \frac{\nu_0^2}{c^2} + \sum_i k_i^2, \quad (2)$$

где

$$\nu_0 = \frac{mc^2}{\hbar}. \quad (3)$$

Наиболее общая сумма плоских волн

$$\psi(x_1, x_2, x_3; t) = \int A(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \nu t)} d\vec{k}, \quad (4)$$

где $A(\vec{k})$ — произвольная функция, а ν и \vec{k} связаны соотношением (2), удовлетворяет дифференциальному уравнению:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \Delta \psi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi, \quad (5)$$

и обратно, (4) является по существу наиболее общим решением (5). При этом заметим, что, согласно (2), данному значению \vec{k} принадлежат два значения v — одно положительное и одно отрицательное:

$$\frac{v}{c} = + \sqrt{\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} + \sum_i k_i^2} \quad \text{и} \quad \frac{v}{c} = - \sqrt{\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} + \sum_i k_i^2}, \quad (2')$$

и что в общем случае оба значения могут быть представлены в (4). Волновое уравнение (5) релятивистски инвариантно, если считать, что ψ скаляр.

До сих пор мы использовали только фундаментальные соотношения де-Бройля (I) и принцип суперпозиции волновой теории. Если мы проследим соответствующее построение нерелятивистской волновой механики; то увидим, что там следующий шаг состоит в введении плотности вероятности, указывающей, какова вероятность найти частицу в момент времени в области $x_1, x_1 + dx_1; \dots; x_s, x_s + dx_s$. Если подобная плотность вероятности $W(x)$ существует, то, во-первых, она должна быть везде положительной (или равной нулю):

$$W(x) \geq 0, \quad (6)$$

и, во-вторых, как следствие волнового уравнения должно соблюдаться равенство:

$$\frac{d}{dt} \int W(x) dx = 0, \quad (7)$$

так что функцию $W(x)$ можно нормировать:

$$\int W(x) dx = 1. \quad (7')$$

Далее следует потребовать инвариантность этой нормировки по отношению к преобразованию Лоренца:

$$\int W(x) dx = \text{inv.} \quad (8)$$

Если мы теперь попытаемся построить из (4) выражение, удовлетворяющее условиям (7) и (8), то мы однозначно получим:

$$\rho(x) \equiv W(x) = -\psi^* \frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{1}{c} \frac{\partial \psi^*}{\partial t}.$$

Далее, если ввести вектор

$$\vec{i} = c(\psi^* \text{grad } \psi - \psi \text{grad } \psi^*), \quad (8')$$

где ψ^* — комплексно сопряжённая ψ -функция, то будет удовлетворяться также уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{i} = 0.$$

ρ и \vec{i} могут быть соединены в один четырёхмерный вектор с компонентами:

$$\begin{aligned} s_v &= \left(\frac{1}{c} \vec{i}, i\rho \right), \\ s_v &= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_v} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_v}, \end{aligned} \quad (8'')$$

откуда следуют (7) и (8)¹⁾. Первоначально различные авторы пытались развивать теорию в намеченном выше направлении²⁾. Однако, при этом не соблюдается требование (6) — ведь ψ и $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ могут быть оба, согласно (5), выбраны произвольно в заданный момент времени — и потому выражение (8'') для четырёхмерного тока с физической точки зрения недопустимо³⁾. На основании этих

¹⁾ В дальнейшем мы всегда будем обозначать греческими буквами индексы, пробегающие значения от 1 до 4, латинскими буквами — индексы, пробегающие значения от 1 до 3, далее через x_4 будем обозначать мнимую временную координату $x_4 = ict$, через x_0 — действительную $x_0 = ct$; таким образом, $x_4 = ix_0$.

²⁾ E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.*, **81**, 129, 1926, особенно § 6; O. Klein, *Zs. f. Phys.*, **37**, 895, 1926; V. Fock, *ibid.*, **38**, 242, **39**, 226, 1926; J. Kudar, *Ann. d. Phys.*, **81**, 632, 1926. Относительно выражения для четырёхмерного тока см. W. Gordon, *Zs. f. Phys.*, **40**, 117, 1925. Все авторы рассматривают сразу общий случай: заряженная частица во внешнем электромагнитном поле, который мы рассматриваем позже (см. § 2d).

³⁾ Если в основу положить только требование (7), без требования (8), то становится возможным допущение:

$$\rho = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + (\text{grad } \psi)^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi^2 \right],$$

так как тогда из (5) следует:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \text{grad } \psi \right) = 0.$$

Это допущение замечательно тем, что при нём можно обойтись одной единственной действительной функцией ψ , и требование (6)

при этом выполняется. Однако, тогда $\int \rho dV$ является 4-й компонентой некоторого вектора, а не скаляром.

результатов можно прежде всего подвергнуть сомнению разумность понятия «плотность вероятности для частицы» в релятивистской волновой механике.

Действительно, во-первых, уже в самом определении плотности вероятности содержится неравноправие времени и пространства: в то время как для пространственных координат допускается погрешность dx_k , время, напротив, устанавливается точно; во-вторых, если мы хотим определить координаты частицы с погрешностью, меньшей чем длина де-бройлевской волны, и в то же время скорость частицы сравнима со скоростью света, то *непосредственное* измерение положения частицы уже более невозможно [см. ч. I, § 2, уравнение (16)]; в-третьих, для светового кванта не существует, как мы увидим позже, плотности вероятности, удовлетворяющей требованиям (6), (7) и (8).

Тем не менее, Дирак показал, что можно составить удовлетворяющее требованиям (6), (7) и (8) выражение для $W(x)$, если ввести несколько ψ -функций, ψ_r , $r = 1, 2, \dots$, которые все, в случае свободного электрона, удовлетворяют уравнению (5). Несмотря на большой успех этого предположения, заключающийся в том, что автоматически получается спин электрической элементарной частицы, всё же необходимо проследить за всеми следствиями, вытекающими из него, и затем снова вернуться к исследованию упомянутых соображений, поскольку мы наталкиваемся далее на принципиальные трудности теории Дирака (состояния отрицательной энергии).

Основное положение теории Дирака заключается в том, что устанавливается следующее выражение для $W(x)$:

$$\rho = W(x) = \sum_r \psi_r^* \psi_r, \quad (9)$$

которое уже само обеспечивает положительно definite характер $W(x)$. Поскольку должно выполняться соотношение:

$$\frac{d}{dt} \int \sum_r \psi_r^* \psi_r dV = \int \left(\sum_r \frac{\partial \psi_r^*}{\partial t} \psi_r + \psi_r^* \frac{\partial \psi_r}{\partial t} \right) dV = 0, \quad (9')$$

$\frac{\partial \psi_r}{\partial t}$ и $\frac{\partial \psi_r^*}{\partial t}$ не могут быть выбраны произвольно в опре-

делённый момент времени; таким образом, ψ_σ должны удовлетворять дифференциальным уравнениям первого порядка относительно $\frac{\partial}{\partial t}$. Тогда, чтобы уравнения были релятивистски инвариантны, необходимо предположить, что они линейны также относительно производных по пространственным координатам $\frac{\partial}{\partial x_k}$. Мы полагаем вместе с Дираком, что эти дифференциальные уравнения имеют следующий вид:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi_\rho}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \sum_{(\sigma)} \left(\alpha_{\rho\sigma}^k \frac{\partial \psi_\sigma}{\partial x_k} + i \frac{mc}{\hbar} \beta_{\rho\sigma} \psi_\sigma \right) = 0. \quad (10)$$

Пока оставим открытым вопрос о числе значений, которое принимает каждый из индексов ρ и σ , и численные значения $\alpha_{\rho\sigma}^k$ и $\beta_{\rho\sigma}$. Чтобы (9') следовало из (10), достаточно принять:

$$\alpha_{\rho\sigma}^{*k} = \alpha_{\sigma\rho}^k, \quad \beta_{\rho\sigma}^* = \beta_{\sigma\rho}. \quad (11)$$

Тогда из (10) следует:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi_\sigma^*}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \sum_{(\rho)} \left(\frac{\partial \psi_\rho^*}{\partial x_k} \alpha_{\rho\sigma}^k - i \frac{mc}{\hbar} \beta_{\rho\sigma}^* \psi_\rho^* \right) = 0. \quad (10^*)$$

Умножим (10) на ψ_ρ^* и просуммируем по ρ , а (10*) умножим на ψ_σ и просуммируем по σ ; если положить теперь

$$\vec{i} = c \sum_{\rho} \sum_{\sigma} \psi_\rho^* \alpha_{\rho\sigma} \psi_\sigma, \quad (12)$$

то получим уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{i} = 0. \quad (13)$$

Чтобы упростить запись и не писать индексов, целесообразно ввести обозначения матричного исчисления. При этом α^k и β будут квадратные, эрмитовы матрицы — их эрмитовость обеспечивается требованием (11); ψ рассматривается как прямоугольная матрица с одним столбцом (элемент ψ_ρ), а ψ^* — как прямоугольная матрица с одной строкой (элемент ψ_ρ^*). Чтобы, в соответствии

с правилом умножения матриц, получать разумные образования, следует всегда писать ψ^* *слева*, а ψ — *справа* от матриц α^h и β . Тогда выражения (10), (10*), (9) и (13) можно записать в более простой форме:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \sum_{h=1}^3 \alpha^h \frac{\partial \psi}{\partial x_h} + i \frac{mc}{\hbar} \beta \psi = 0, \quad (10')$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \sum_{h=1}^3 \frac{\partial \psi^*}{\partial x_h} \alpha^h - i \frac{mc}{\hbar} \psi^* \beta = 0, \quad (10*'')$$

$$\rho = (\psi^* \psi), \quad (9) \quad \vec{i} = c (\psi^* \vec{\alpha} \psi). \quad (12')$$

Подобно тому, как из уравнений Максвелла первого порядка для напряжённостей поля следует волновое уравнение второго порядка для каждой из напряжённостей, здесь из уравнений (10) должно следовать уравнение (5) для каждой из компонент ψ

$$-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_k^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (5)$$

Чтобы это проверить, подействуем оператором:

$$-\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \sum_l \alpha^l \frac{\partial}{\partial x_l} + i \frac{mc}{\hbar} \beta$$

на (10) слева. Это единственная операция, в результате которой выпадают члены первого порядка относительно $\frac{\partial}{\partial t}$. Отсюда получаем:

$$-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \sum_l \sum_k \alpha^l \alpha^k \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_l \partial x_k} + \\ + i \frac{mc}{\hbar} \sum_h (\alpha^h \beta + \beta \alpha^h) \frac{\partial \psi}{\partial x_h} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \beta^2 \psi = 0,$$

или, симметризуя второй член относительно l и k :

$$-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \sum_l \sum_k \frac{1}{2} (\alpha^h \alpha^l + \alpha^l \alpha^h) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_h \partial x_l} + \\ + i \frac{mc}{\hbar} \sum_k (\alpha^h \beta + \beta \alpha^h) \frac{\partial \psi}{\partial x_k} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \beta^2 \psi = 0.$$

Из сравнения с (5) следует, что, для того чтобы последнее выражение совпадало с (5), необходимо и достаточно:

$$\frac{1}{2}(\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k) = \delta_{l,k}, \quad \alpha^k \beta + \beta \alpha^k = 0, \quad \beta^2 = I \quad (1)$$

(в последнем члене под I понимается единичная матрица). Первые из этих соотношений эквивалентны следующим:

$$(\alpha^k)^2 = I, \quad \alpha^k \alpha^l = -\alpha^l \alpha^k \quad \text{при } k \neq l. \quad (1')$$

Таким образом, соотношения (1) совершенно симметричны относительно всех четырёх матриц α_k и β , и матрица β не является выделенной.

Теперь следует выяснить, как и сколькими способами можно удовлетворить соотношениям (1) и требованию эрмитовости. Можно показать, что число строк матриц, удовлетворяющих (1), должно быть по меньшей мере равно четырём. Одно из решений с *четырёхрядными* матрицами получается тогда с помощью употребляемых в нерелятивистской теории спина двурядных матриц:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Эти матрицы удовлетворяют соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_1 \sigma_2 &= -\sigma_2 \sigma_1 = i \sigma_3, \dots, \\ \sigma_1^2 &= I, \dots \end{aligned} \right\} \quad (14')$$

(Многоточие обозначает, что остальные соотношения получаются циклической перестановкой индексов у написанных.)

Одно из решений системы уравнений (1), при котором β диагонально, даётся следующими матрицами:

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Здесь применён «расщеплённый» («gespaltene») способ написания четырёхрядных матриц α_k и β ; под I понимается двурядная единичная матрица, а под 0 — двурядная нулевая матрица; четырёхрядные матрицы получаются, если вписать в (15) двурядные матрицы полностью. Матрицы (15) удовлетворяют требованию эрмитовости.

Что касается дальнейшего вопроса о существовании других решений уравнения (I), то во всяком случае матрицы

$$\alpha'_k = S\alpha_k S^{-1}, \quad \beta' = S\beta S^{-1}, \quad (16)$$

образованные из α_k и β с помощью унитарной (чтобы сохранить эрмитовость), но в остальном произвольной матрицы S , также являются решениями (I). Далее возможно тривиальное обобщение решения (15) посредством следующего перехода от четырёхрядных к многорядным матрицам:

$$A_k = \begin{pmatrix} \alpha_k & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \alpha_k & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \alpha_k & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \beta & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \beta & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \beta & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Здесь все написанные элементы в свою очередь являются четырёхрядными матрицами. Наконец, A и B можно преобразовать при помощи «большой» унитарной матрицы S :

$$A'_k = S A_k S^{-1}, \quad B' = S B S^{-1}.$$

Теперь более не видно непосредственно распада A' и B' на отдельные матрицы. Можно показать, что, кроме указанных тривиальных обобщений данного решения, других решений не существует ¹⁾.

До сих пор мы показали, что положенные в основу уравнения (10) вместе с выражениями (9) и (12) для плотности и тока удовлетворяют уравнению непрерывности и что первоначальные уравнения (5) являются следствием (10). Мы должны ещё показать, что уравнения (10) также релятивистски инвариантны и что плотность и ток

¹⁾ Это основано, как можно здесь коротко указать, на следующем: 16 линейно независимых элементов γ_μ , $\gamma_\gamma\gamma_\nu$, μ, ν, γ, ν , $\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$ (причём μ, ν, ρ могут быть отличны друг от друга) образуют базис гиперкомплексной системы чисел, которая входит в класс «полупростых» систем. Центр, т. е. совокупность элементов, коммутирующих со всеми элементами, имеет состоящий из одного элемента базис 1. Так как вообще число неэквивалентных неприводимых представлений «полупростой системы» совпадает с числом элементов базиса центра, то в нашем случае имеется одно неприводимое представление. Квадрат его степени f равен числу n элементов базиса $f^2 = n$; таким образом, в нашем случае $f = 4$.

соединяются в один четырёхмерный вектор. Из последнего обстоятельства сама собой будет следовать требуемая соотношением (8) инвариантность нормировки ψ , посредством $\int \rho dv$.

б) *Релятивистская инвариантность.* Для исследования релятивистской инвариантности системы уравнений (10) целесообразно преобразовать эту систему так, чтобы четыре координаты x_μ ($\mu=1, \dots, 4$), где $x_4=ict$, были равноправны. Для этой цели умножим (10) слева на $-i\beta$; в результате получим (так как $\beta^2=1$)

$$\sum_{\mu=1}^4 \gamma^\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} + \frac{mc}{\hbar} \psi = 0, \quad (II)$$

где положено:

$$\gamma^4 = \beta, \quad -i\beta\alpha^k = \gamma^k; \quad (17)$$

следовательно,

$$\beta = \gamma^4, \quad \alpha^k = i\gamma^4\gamma^k. \quad (17')$$

Как и α^k и β , матрицы γ^μ эрмитовы и вследствие (I) удовлетворяют аналогичным соотношениям:

$$\frac{1}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) = \delta_{\mu\nu} \cdot I. \quad (I')$$

Вставив (17') в уравнение (10*) и сократив на i , получим:

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial x_4} + \sum_k \frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} \gamma^4 \gamma^k - \frac{mc}{\hbar} \psi^* \gamma^4 = 0.$$

Положим далее

$$\psi^* = i\psi^* \gamma^4, \quad \psi^* = -i\psi^* \gamma^4. \quad (18)$$

Тогда будем иметь:

$$\sum_\mu \frac{\partial \psi^*}{\partial x_\mu} \gamma^\mu - \frac{mc}{\hbar} \psi^* = 0. \quad (II')$$

Введение множителя i в определение ψ^* (18) целесообразно потому, что тогда четырёхмерный вектор s_μ с компонентами

$$s_\mu = \left(\frac{\vec{s}}{c}, i\rho \right)_\mu \quad (19)$$

принимает в соответствии с (9) и (12) следующий вид:

$$S_\mu = \psi^* \gamma^\mu \psi. \quad (20)$$

Из выражений (II) и (II') ψ^* определяется при заданном ψ с точностью до множителя, который нормируется соотношением (18). Употреблённый здесь способ написания уравнения Дирака удобен при исследовании свойств релятивистской инвариантности, в то время как употреблённый ранее способ обладает тем преимуществом, что делает более наглядным вещественность функции ψ .

Мы рассмотрим теперь ортогональные преобразования координат:

$$\left. \begin{aligned} x'_\mu &= \sum_\nu a_{\mu\nu} x_\nu, & a_{\mu\tau} a_{\mu\sigma} &= \delta_{\tau\sigma}, \\ x_\nu &= \sum_\mu a_{\mu\nu} x'_\mu, & a_{\rho\mu} a_{\rho\nu} &= \delta_{\mu\nu}, \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

и положим

$$\psi' = (S\psi), \quad (22)$$

где S — четырёхмерная матрица, которую следует ещё найти. Из уравнения

$$\sum_\mu \gamma^\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} + \frac{mc}{\hbar} \psi = 0$$

должно следовать:

$$\sum_\mu \gamma^\mu \frac{\partial \psi'}{\partial x'_\mu} + \frac{mc}{\hbar} \psi' = 0,$$

или

$$\sum_\mu \sum_\nu \gamma^\mu S a_{\mu\nu} \frac{\partial \psi}{\partial x_\nu} + \frac{mc}{\hbar} S \psi = 0,$$

или

$$\sum_\mu \sum_\nu (S^{-1} \gamma^\mu S) a_{\mu\nu} \frac{\partial \psi}{\partial x_\nu} + \frac{mc}{\hbar} \psi = 0.$$

Поставленное условие выполняется, если

$$\sum_\mu (S^{-1} \gamma^\mu S) a_{\mu\nu} = \gamma^\nu,$$

или

$$S^{-1}\gamma^\mu S = \sum_\nu a_{\mu\nu}\gamma^\nu. \quad (A)$$

Тогда, если положить:

$$\psi^{+'} = (\psi^+ S^{-1}), \quad (22^*)$$

то из (II₊) следует:

$$\frac{\partial \psi^{+'}}{\partial x_\mu'} \gamma^\mu - \frac{mc}{\hbar} \psi^{+'} = 0. \quad (23)$$

Далее, очевидно, что если имеет место (A), то выражения (20) для S_μ действительно образуют четырёхмерный вектор, и

$$J = (\psi^+ \psi)$$

является инвариантом. С помощью элементарных выкладок далее получаем, что

$$M_{\mu\nu} = -M_{\nu\mu} = i\psi^+ \gamma^\mu \psi \quad (\mu \neq \nu) \quad (24)$$

— антисимметричный тензор второго ранга,

$$K_{\mu\nu\rho} = i\psi^+ \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \psi \quad (\mu = \rho \neq \nu) \quad (25)$$

— антисимметричный тензор третьего ранга относительно всех трёх индексов и

$$N = \psi^+ \gamma^5 \psi \quad (26)$$

— псевдоскаляр, если

$$\gamma^5 = \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 \gamma^4. \quad (27)$$

Действительно, при преобразовании координат:

$$N' = N |a_{\mu\nu}|,$$

причём детерминант ортогонального преобразования $|a_{\mu\nu}|$ равен $+1$ при собственном вращении и равен -1 при зеркальном отражении ¹⁾. Отметим ещё, что матрица γ^5 удовлетворяет соотношениям:

$$(\gamma^5)^2 = 1, \quad \gamma^5 \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^5 = 0. \quad (28)$$

¹⁾ См. J. v. Neumann, Zs. f. Phys., 48, 868, 1928

Таким образом, существует пять независимых четырёхрядных матриц, удовлетворяющих (1) ¹⁾.

Матрица S вследствие мнимого характера четвёртой координаты не унитарна; действительно, a_{4k} и a_{k4} (где $k=1, 2, 3$) чисто мнимы, и лишь a_{ki} и a_{44} действительны. Поэтому матрицу \tilde{S} , эрмитовски сопряжённую S , следует положить равной не S^{-1} , а

$$\tilde{S} = \gamma^4 S^{-1} \gamma^4 \quad \text{или} \quad \tilde{\gamma}^4 = \gamma^4 S^{-1}, \quad (29)$$

тогда имеем:

$$\psi^{*'} = \psi^* \tilde{S}.$$

Таким образом, и в новой системе координат, аналогично (18):

$$\psi^{*'} = i \psi^{*'} \gamma^4.$$

Теперь всё сводится к тому, чтобы доказать, что для каждого ортогонального преобразования (21) существует матрица S , являющаяся функцией $a_{\mu\nu}$ и удовлетворяющая соотношению (A). Так как матрицы $\sum_{\nu} a_{\mu\nu} \gamma_{\nu}$, вследствие (21), удовлетворяют тем же соотношениям (1), что и γ_{μ} , то существование матриц S следует уже из упомянутой на стр. 244 однозначности (с точностью до эквивалентности) неприводимого представления γ_{μ} . Второе независимое доказательство можно получить, используя групповые свойства ортогональных преобразо-

¹⁾ Между величинами J , $S_{\nu} M_{\mu\nu}$, $K_{\mu\nu\rho}$, N имеются различные квадратичные тождества, как, например,

$$-\sum_{\nu} (S_{\nu})^2 = J^2 + N^2 + K_{12}^2 + K_{13}^2 + K_{21}^2 + K_{23}^2,$$

$$K_{123} S_4 + K_{412} S_3 + K_{341} S_2 + K_{243} S_1 = 0.$$

См. V. Fock, *Zs. f. Phys.*, 57, 261, 1929; C. G. Darwin, *Proc. Roy. Soc. London*, 120, 621, 1928; G. E. Uhlenbeck и O. Laporte, *Phys. Rev.*, 37, 1380, 1931. Эти соотношения, которые должны соблюдаться независимо от специального выбора матриц, до сих пор проверялись с помощью частных предположений при вычислении. Их прежний вывод является неудовлетворительным и не выясняет их настоящего смысла.

ваний, показав, что равенство (А) выполнимо для бесконечных малых преобразований. Такое преобразование даётся выражением:

$$x'_\mu = 1 + \sum_\nu \varepsilon_{\mu\nu} x_\nu, \quad \text{где} \quad \varepsilon_{\mu\nu} = -\varepsilon_{\nu\mu}, \quad (30)$$

причём антисимметричность $\varepsilon_{\mu\nu}$ обеспечивает выполнение условий ортогональности. Мы предположим, что S линейно относительно $\varepsilon_{\mu\nu}$:

$$S = I + \frac{1}{2} \sum_\mu \sum_\nu \varepsilon_{\mu\nu} T^{\mu\nu}, \quad T^{\mu\nu} = -T^{\nu\mu}, \quad (31)$$

где $T^{\mu\nu}$ — матрицы, которые будем нумеровать парой индексов. Теперь вставим (31) в (А) и пренебрежём в этом выражении величинами порядка выше первого относительно $\varepsilon_{\mu\nu}$. Тогда получим:

$$\begin{aligned} \gamma^\mu \frac{1}{2} \sum_\lambda \sum_\nu \varepsilon_{\lambda\nu} T^{\lambda\nu} - \frac{1}{2} \sum_\lambda \sum_\nu \varepsilon_{\lambda\nu} T^{\lambda\nu} \gamma^\mu = \\ = \sum_\nu \varepsilon_{\mu\nu} \gamma^\nu = \frac{1}{2} \sum_\lambda \sum_\nu \varepsilon_{\lambda\nu} (\delta_{\lambda\mu} \gamma^\nu - \delta_{\nu\mu} \gamma^\lambda). \end{aligned}$$

Приравнявая написанные в антисимметричной форме коэффициенты при $\varepsilon_{\lambda\nu}$, имеем:

$$\gamma^\mu T^{\lambda\nu} - T^{\lambda\nu} \gamma^\mu = \delta_{\lambda\mu} \gamma^\nu - \delta_{\nu\mu} \gamma^\lambda. \quad (A')$$

Этому равенству действительно можно удовлетворить четырёхрядными матрицами $T^{\lambda\nu}$ и доказать, таким образом, релятивистскую инвариантность уравнения Дирака и векторный характер s_ν . Действительно,

$$T^{\lambda\nu} = \frac{1}{2} \gamma^{\lambda\nu} \quad \text{для} \quad \lambda \neq \nu \quad (T^{\lambda\nu} = 0 \quad \text{для} \quad \lambda = \nu) \quad (32)$$

есть антисимметричное относительно λ и ν решение (А'), что легко проверить, пользуясь (I").

Мы должны ещё проверить выполнение условия (29), устанавливающего соотношения вещественности. Оно даёт:

$$\sum_{\mu\nu} \varepsilon_{\mu\nu}^* \tilde{T}^{\mu\nu} = - \sum_{\mu\nu} \gamma^4 \varepsilon_{\mu\nu} T^{\mu\nu} \gamma^4. \quad (33)$$

Учитывая, что ε_{4k} чисто мнимо, а ε_{ik} действительно, если i, k пробегает значения от 1 до 3, имеем:

$$\tilde{T}^{4k} = +\gamma^4 T^{4k} \gamma^4, \quad \tilde{T}^{ik} = -\gamma^4 T^{ik} \gamma^4 \quad (i, k = 1, 2, 3). \quad (33')$$

Так как из (32) следует, что $\tilde{T}^{\lambda\nu} = -T^{\lambda\nu}$, то легко проверить, пользуясь (1'), что (33') действительно выполняется.

Нетрудно установить, насколько однозначно решение уравнений (A') и (33). Уравнение (A') допускает ещё аддитивный дополнительный член в выражении для $T^{\lambda\nu}$, который должен коммутировать со всеми γ^μ . Этот член необходимо должен быть вида:

$$\Delta_{\lambda\nu} \cdot I,$$

где $\Delta_{\lambda\nu}$ — обыкновенные числа. Из уравнения (33) вытекает далее требование, чтобы выражение

$$\Delta = \sum_{\lambda\nu} \varepsilon_{\lambda\nu} \Delta_{\lambda\nu}$$

было чисто мнимым. Так как, учитывая величины лишь первого порядка,

$$1 + i|\Delta| = e^{i|\Delta|},$$

то мы имеем здесь дело с дополнительным фазовым множителем (бесконечно малым изменением фазы), общим для всех четырёх компонент ψ . Такой множитель, действительно, всегда остаётся произвольным. Его нормировка посредством выражения (32) соответствует утверждению, что

$$\text{Spur}(T^{\lambda\nu}) = 0, \quad (34)$$

если, как обычно, понимать под шпуром матрицы сумму её диагональных элементов. При конечных преобразованиях это приводит к следствию, что

$$\text{Det}(S) = 1, \quad (34')$$

причём под Det понимается детерминант матрицы.

Заметим ещё, что, согласно (32), $T^{\lambda\nu}$ коммутативны с матрицей γ^5 , определённой выражением (27)

$$\gamma^5 T^{\lambda\nu} - T^{\lambda\nu} \gamma^5 = 0, \quad (35)$$

При конечных преобразованиях, которые могут быть получены из бесконечно малых непрерывным продолжением, это ведёт к следствию

$$S^{-1}\gamma^{\mu}S = \gamma^{\mu}.$$

Выше уже было, однако, замечено, что

$$N = \psi^{\dagger}\gamma^5\psi$$

является псевдоскаляром. Это равнозначно вытекающему из (A) утверждению, что

$$S^{-1}\gamma^{\mu}S = \pm\gamma^{\mu}, \quad (36)$$

с положительным или отрицательным знаком для ортогонального преобразования координат с детерминантом, равным $+1$ или -1 . Последний случай соответствует зеркальному отображению. Рассмотрим, например, зеркальное отображение

$$x'_k = -x_k \text{ для } k = 1, 2, 3; \quad x'_4 = x_4. \quad (37)$$

Согласно (A), мы должны найти S , удовлетворяющее следующим соотношениям:

$$\gamma^k S = -S \gamma^k \text{ для } k = 1, 2, 3; \quad \gamma^4 S = S \gamma^4.$$

Отсюда следует [принимая во внимание дополнительные условия (29) и (34')]:

$$S = \gamma^4. \quad (37')$$

С помощью решения (32) уравнений (A') можно в частном случае вращения вокруг одной из координатных осей — при котором будут изменяться лишь две координаты — указать решение уравнений (A) для *конечного* вращения координатной системы¹⁾. Рассмотрим, например, сначала вращение в плоскости (x_1, x_2) , которое даётся следующими уравнениями:

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 \cos \omega - x_2 \sin \omega, \\ x'_2 &= x_1 \sin \omega + x_2 \cos \omega. \end{aligned}$$

Тогда, с учётом того обстоятельства, что здесь матрицы $S(\omega)$ переставимы друг с другом для всех значений

¹⁾ См. П. А. М. Дирак, Квантовая механика,

ω , должно, согласно (32), выполняться соотношение

$$\frac{dS}{d\omega} = ST^{12} = S \frac{1}{2} \gamma_1 \gamma_2.$$

Это дифференциальное уравнение для матрицы S будет иметь следующее решение (учитывая, что $S = I$ для $\omega = 0$):

$$S = e^{\frac{\omega}{2} \gamma_1 \gamma_2} = \cos \frac{\omega}{2} + \gamma_1 \gamma_2 \sin \frac{\omega}{2}. \quad (38)$$

Последнее преобразование основано на том, что

$$(\gamma_1 \gamma_2)^2 = -I,$$

так как в этом случае соотношение

$$e^{i \frac{\omega}{2}} = \cos \frac{\omega}{2} + i \sin \frac{\omega}{2}$$

остаётся справедливым, если заменить i матрицей $\gamma_1 \gamma_2$. Из результата (38) следует, что при полном обороте ($\omega = 2\pi$) матрица S не возвращается к своему первоначальному значению единичной матрицы, но переходит в $-(I)$:

$$S = -(I) \quad \text{для} \quad \omega = 2\pi. \quad (38')$$

Здесь мы имеем дело с *двузначным* представлением группы вращения трёхмерного пространства, с которым мы познакомились уже в нерелятивистской теории спина. Мы ещё вернёмся к связи матриц $T^{(ik)}$ ($i, k = 1, 2, 3$) и операторов момента количества движения.

Аналогично получается закон преобразования ψ , т. е. матрица S , в частном случае лоренцовского преобразования, соответствующего относительному движению координатной системы в направлении x_1 , т. е. вращению в плоскости (x_1, x_4) . Мы должны заменить x_2, γ_2 через x_4, γ_4 . Если мы хотим оперировать с действительной временной координатой $x_0 = ct$ вместо $x_4 = ix_0$, мы должны ещё заменить угол вращения ω через $\omega = i\chi$ с действи-

тельными χ . Тогда мы будем иметь:

$$x'_1 = x_1 \operatorname{ch} \chi - x_0 \operatorname{sh} \chi, \quad \operatorname{th} \chi = \frac{v}{c},$$

$$x'_0 = -x_1 \operatorname{sh} \chi + x_0 \operatorname{ch} \chi, \quad \operatorname{ch} \chi = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}, \quad \operatorname{sh} \chi = \frac{v/c}{\sqrt{1-v^2/c^2}},$$

$$dx'_1 = -d\chi x'_0, \quad dx'_0 = -d\chi x'_1,$$

$$S = e^{\frac{\chi}{2} \gamma_1 \gamma_4} = \operatorname{ch} \frac{\chi}{2} - i \gamma_1 \gamma_4 \operatorname{sh} \frac{\chi}{2}.$$

Подводя итог, подчеркнём ещё раз, что *существование четырёхмерного тока с надлежащими релятивистскими инвариантными свойствами, с одной стороны, и положительной дефинитной плотности, с другой, является важнейшей чертой теории Дирака*. При попытке переписать волновое уравнение Дирака в векторной или тензорной форме это свойство теории теряется.

При исследовании поведения ψ относительно преобразования Лоренца мы не вводили никаких специальных представлений матриц γ^μ . Однако в зависимости от рассматриваемых проблем бывает целесообразно вводить различные представления. Чтобы установить связь с математической литературой, мы выберем теперь такое представление, в котором γ^5 диагонально. (Оно отличается от данного в (15), где диагональным выбрано $\beta = \gamma^4$.) Мы можем тогда положить, употребляя «расцеплённый» способ описания, при котором написанные величины сами являются двурядными матрицами:

$$\gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_k \\ -i\sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad \text{для } k = 1, 2, 3; \quad \gamma^4 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^5 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (15')$$

[I — двурядная единичная матрица, σ_k определяется уравнениями (14)]. Заметим далее, что матрица S , определяющая преобразование ψ по формуле

$$\psi' = S\psi$$

согласно (36), коммутирует с γ^5 для преобразования координат с детерминантом +1. Отсюда сразу следует, что для этих, так называемых собственных преобразований, S принимает следующую форму:

$$S = \begin{pmatrix} \sum & 0 \\ 0 & \sum' \end{pmatrix}, \quad (39)$$

где \sum и \sum' — двурядные матрицы. Из (29) [со значением γ^4 ,

данным (15'))] следует, что $\sum = \tilde{\sum}^{-1}$. Таким образом:

$$S = \begin{pmatrix} \sum & 0 \\ 0 & \tilde{\sum}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (40)$$

Для случая бесконечно малого вращения будем иметь, согласно (32), (14') и (15'), следующие матрицы $T^{\mu\nu}$:

$$T^{1,2} = \frac{1}{2} i \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}, \dots \quad (41a)$$

$$T^{1,4} = \frac{1}{2} i \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_1 \end{pmatrix}, \dots, \quad (41b)$$

причём ненаписанные матрицы получаются посредством циклической перестановки индексов 1, 2, 3.

Отсюда видно, что четыре компоненты ψ_1, \dots, ψ_4 распадаются на две пары, которые при собственном лоренцовском преобразовании преобразуются только между собой, и именно вторая пара преобразуется контраградиентно к паре, комплексно сопряжённой с первой, т. е.

$$\psi_1^* \psi_3 + \psi_2^* \psi_4$$

является инвариантом. Наше четырёхрядное представление собственной лоренцовской группы (детерминант +1) распадается на два двурядных. Двукомпонентные величины φ_1, φ_2 , трансформирующиеся при лоренцовом преобразовании по закону

$$\psi' = \sum \varphi, \quad (42)$$

называются спинорами или также полувекторами. Матрицы \sum всегда имеют детерминант, равный 1, так как шпур σ_k равен нулю. Подгруппе трёхмерных вращений соответствует *унитарная* матрица \sum (как это имело место также и в нерелятивистской теории спина), в то время как при лоренцовских преобразованиях, не изменяющих четвёртую координату x_4 , вследствие мнимого характера этих преобразований, \sum не унитарно. Подсчётом числа параметров легко показать, что наиболее общие двурядные матрицы \sum с детерминантом 1 действительно соответствуют определённому лоренцовскому преобразованию.

Распад обсуждаемого здесь четырёхрядного представления лоренцовской группы на двурядные уже не имеет места, если мы рассматриваем также зеркальное отображение. Для частного случая рассмотренного ранее зеркального отображения (37)

$$x'_k = -x_k \text{ для } k=1, 2, 3; \quad x'_4 = x_4,$$

где, согласно (37'),

$$\psi' = \gamma^4 \psi,$$

получаем, используя выражение (15') для матрицы γ^4 :

$$\psi'_1 = \varphi_3, \quad \psi'_2 = \varphi_4, \quad \psi'_3 = \varphi_1, \quad \psi'_4 = \varphi_2.$$

Это означает, что обе пары (ψ_1, ψ_2) и (ψ_3, ψ_4) просто меняются местами.

Исчисление величин, которые ведут себя при лоренцовском преобразовании подобно γ_1, γ_2 или подобно γ_3, γ_4 , разработано Ван-дер-Варденом¹⁾ как систематическое «спинорное исчисление», представляющее обобщение обычного тензорного исчисления и допускающее использование возможных неприводимых представлений лоренцовской группы.

Мы хотели бы здесь заметить, что это исчисление, несмотря на свою формальную замкнутость, не всегда выгодно. Расщепление всех четырёхкомпонентных величин на две двухкомпонентные, связанное со специальным диагональным представлением γ^k , иногда приводит к ненужным усложнениям формул. Для некоторых проблем оказываются более удобными представления для γ^k , отличные от данных в (15') — например, такое, при котором γ^4 диагонально [см. (15)].

Упомянем ещё коротко о возможности установления уравнений, инвариантных относительно преобразования Лоренца и содержащих только введённые выше двухкомпонентные величины φ^k . Эта возможность покоится на том, что каждая ковариантная величина, построенная только из матриц, коммутирующих с γ^5 , остаётся ковариантной, если её записывают лишь для отдельной двухкомпонентной составляющей. Возвратимся снова к матрицам, определённым выражениями (17')

$$\alpha^k = i\gamma^k\gamma^4, \quad \beta = \gamma^4.$$

В нашем случае, согласно (15), эти матрицы имеют следующий вид:

$$\alpha^k = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & -\sigma_k \end{pmatrix}, \quad \beta = \gamma^4 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}.$$

Возвратимся также к первоначальной форме уравнения Дирака:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \alpha^k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + i \frac{mc}{\hbar} \beta \psi = 0$$

и выражения для тока:

$$s_k = (\varphi^* \alpha_k \psi), \quad s_4 = i(\varphi^* \psi).$$

Прежде всего видно, что величины, составленные только из двухкомпонентных φ следующим образом:

$$s_k = (\varphi^* \sigma_k \varphi), \quad s_4 = is_0 = i(\varphi^* \varphi), \quad (43)$$

¹⁾ В. L. van der Waerden, *Göttinger Nachr.*, 1929, 100. Дальнейшие применения имеются у G. E. Uhlenbeck и O. Laporte, *Phys. Rev.*, 3, 1380, 1931.

²⁾ Это было указано Вейлем (H. Weyl, *Zs. f. Phys.*, 56, 330, 1929.)

образуют компоненты четырёхмерного вектора. Этот вектор тождественно удовлетворяет соотношению:

$$s_0^2 = \sum_{k=1}^3 s_k^2. \quad (43')$$

Далее мы видим, что не коммутирующая с γ^5 матрица β , которая меняет пары (ψ_1, ψ_2) и (ψ_3, ψ_4) , не должна входить в составленное только из двух компонент φ ковариантное волновое уравнение. Таким образом, член волнового уравнения, содержащий массу покоя, должен отсутствовать в двукомпонентном уравнении. Зачёркивание этого члена физически означает переход к частице с массой покоя 0, скорость которой всегда равна скорости света c , а энергия E и импульс связаны соотношением:

$$\frac{E^2}{c^2} = \sum_k p_k^2, \quad (44)$$

подобно тому, как это имеет место в случае светового кванта. Тогда мы имеем следующее двукомпонентное волновое уравнение:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \sigma_k \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} = 0. \quad (45)$$

Оно релятивистски инвариантно. Для вектора s_k , определённого выражением (43), из уравнения (45) следует уравнение непрерывности:

$$\sum_{\nu=1}^4 \frac{\partial s_{\nu}}{\partial x_{\nu}} = 0.$$

Тем не менее эти волновые уравнения, как яствует из их вывода, не инвариантны относительно зеркального отображения (перемены правого на левое) и вследствие этого неприменимы к физическим объектам. Отсутствие инвариантности волнового уравнения относительно зеркального отображения проявляется в своеобразной связи между направлением спинового момента импульса и тока, однако, мы не будем здесь более детально входить в эти вопросы. Упомянем ещё, что уравнения (45) имеют собственные решения, относящиеся к состояниям как положительной, так и отрицательной энергии. При заданных значениях энергии и импульса, удовлетворяющих соотношению (44), мы имеем, однако, лишь одно собственное решение.

с) *Поведение волнового пакета в случае свободной частицы.* Так же, как и в части I [уравнения (24') и (27)], из собственных функций $\varphi_r(\vec{x}, t)$ пространства координат мы получаем посредством разложения Фурье собственные

функции $\vec{\varphi}_p(\vec{p}, t)$ пространства импульсов:

$$\varphi_p(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi_p(\vec{x}, t) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x})} dx_1 dx_2 dx_3, \quad (46)$$

$$\psi_p(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi_p(\vec{p}, t) e^{+\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x})} dp_1 dp_2 dp_3. \quad (46a)$$

При этом

$$W(p_1, p_2, p_3) dp_1 dp_2 dp_3 = \sum_p |\varphi_p(\vec{p}, t)|^2 dp_1 dp_2 dp_3 \quad (47)$$

интерпретируется как вероятность того, что компоненты импульса частицы находятся между p_k и $p_k + dp_k$. В нерелятивистской волновой механике значение энергии однозначно определяется значением импульса. Однако, в релятивистской механике, согласно (5), возможны оба, отличающиеся друг от друга знаком, значения энергии:

$$\frac{1}{c} E = \pm \sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2}. \quad (1')$$

Для $\varphi_p(p)$ из (10) следует, если снова перейти к матричному способу записи относительно индекса компонент p :

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left(\sum_{k=1}^3 \alpha^k p_k + mc\beta \right) \varphi. \quad (48)$$

Общее решение этого уравнения есть:

$$\varphi_p = C_p^{(+)} e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{m^2 c^2 + \sum p_k^2} ct} + C_p^{(-)} e^{+\frac{i}{\hbar} \sqrt{m^2 c^2 + \sum p_k^2} ct}, \quad (49)$$

где $C_p^{(+)}$ и $C_p^{(-)}$ удовлетворяют уравнениям:

$$+\sqrt{m^2 c^2 + \sum_{k=1}^3 p_k^2} C^{(+)} = \left(\sum_{k=1}^3 \alpha^k p_k + mc\beta \right) C^{(+)}, \quad (50_1)$$

$$-\sqrt{m^2 c^2 + \sum_{k=1}^3 p_k^2} C^{(-)} = \left(\sum_{k=1}^3 \alpha^k p_k + mc\beta \right) C^{(-)}. \quad (50_2)$$

Каждое из этих уравнений имеет ещё два линейно неза-

висимых решения. Вследствие эрмитовости α_k имеем также:

$$+ \sqrt{m^2 c^2 + \sum_{k=1}^3 p_k^2} C^{*(+)} = C^{*(+)} \left(\sum_{k=1}^3 \alpha_k p_k + m c \beta \right), \quad (50_1^*)$$

$$- \sqrt{m^2 c^2 + \sum_{k=1}^3 p_k^2} C^{*(-)} = C^{*(-)} \left(\sum_{k=1}^3 \alpha_k p_k + m c \beta \right). \quad (50_2^*)$$

Умножая уравнения (50_1) слева на $C^{*(-)}$ и уравнения (50_2^*) справа на $C^{(+)}$, получаем условие ортогональности:

$$\sum_p C_p^{*(-)} C_p^{(+)} = \sum_p C_p^{(-)} C_p^{(+)} = 0. \quad (51)$$

Таким образом, вероятность $W(p_1, p_2, p_3)$ постоянна во времени:

$$W(p_1, p_2, p_3) = \sum_p \{ |C_p^{(+)}|^2 + |C_p^{(-)}|^2 \} = \text{const.} \quad (52)$$

Здесь следует заметить, что упомянутые ранее соображения против существования плотности $W(x_1, x_2, x_3)$ в координатном пространстве только в ограниченной степени относятся к соответствующей плотности вероятности в пространстве импульсов. Проблематичным является здесь только то, можно ли точно измерить импульс частицы в произвольно короткий промежуток времени [см. ч. I, уравнение (23)]. Нет сомнения, напротив, что импульс может быть измерен с любой точностью за достаточно продолжительное время. Таким образом, для волнового пакета свободной частицы, когда импульс не меняется со временем, $W(p_1, p_2, p_3)$, несомненно, определимо точно. Больше того: если даже свободная частица подвержена действию каких-либо сил (взаимодействию с другими частицами или излучением) в течение конечного интервала времени, можно измерить с произвольной точностью импульс частицы до и после взаимодействия. Распределение скоростей частиц после соударения является и в релятивистской квантовой теории точным и вполне разумным понятием. То же самое относится, как мы

увидим позже, к распределению интенсивности рассеянного частицей излучения в зависимости от частоты и направления.

После этого отступления рассмотрим следствия для поведения волнового пакета, вытекающие из существования решений $\varphi_p^{(-)}$, принадлежащих к отрицательным энергиям. Прежде всего в отличие от нерелятивистской теории здесь следует, что общий ток, который, согласно (12) и (46), даётся выражением

$$\frac{1}{c} J_k = \int (\psi^* \alpha^k \psi) dV = \int (\varphi^* \alpha^k \varphi) dp, \quad (53)$$

уже непостоянен во времени. Введём в (53) выражение (49) для φ_p :

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} J_k = & \int (C_p^{*(+)} \alpha^k C_p^{(+)}) dp + \int (C_p^{*(-)} \alpha^k C_p^{(-)}) dp + \\ & + \int \left[(C_p^{*(+)} \alpha^k C_p^{(-)}) e^{\frac{2it}{\hbar} \sqrt{m^2 c^2 + \sum p_k^2} ct} + \right. \\ & \left. + (C_p^{*(-)} \alpha^k C_p^{(+)}) e^{-\frac{2it}{\hbar} \sqrt{m^2 c^2 + \sum p_k^2} ct} \right] dp. \end{aligned} \quad (54)$$

Оба первых члена постоянны во времени и соответствуют тому, что можно было ожидать по аналогии с классической релятивистской механикой. Раскроем их значение, умножим (50*) справа на $\alpha^l C$ и (50) слева на $C^* \alpha^l$. Складывая и учитывая перестановочные соотношения (I), получим:

$$\begin{aligned} & \sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2} (C^{*(+)} \alpha^l C^{(+)}) = p_l (C^{(+)*} C^{(+)}), \\ & - \sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2} (C^{*(-)} \alpha^l C^{(-)}) = p_l (C^{(-)*} C^{(-)}). \end{aligned}$$

Используя выражения для энергии

$$E = \pm c \sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2}$$

и скорости частицы, совпадающей с групповой скоростью волн:

$$v_k = \frac{\partial E}{\partial p_k} = \frac{c^2 p_k}{E} = \frac{\pm c p_k}{\sqrt{m^2 c^2 + \sum p_k^2}}, \quad (55)$$

получим, что независящую от времени часть J_k можно записать так:

$$\bar{J}_k = \int v_k^{(+)}(p) (C^{*(+)} C^{(+)}) dp + \int v_k^{(-)}(p) (C^{*(-)} C^{(-)}) dp. \quad (54')$$

Накладывающуюся на это осцилляцию с частотой $2 \frac{|E|}{\hbar}$ Шредингер назвал «дрожанием» («Zitterbewegung»). Это осциллирующее движение является следствием интерференции частей волнового пакета, принадлежащих к положительным и отрицательным энергиям; если волновые пакеты содержат собственные функции, соответствующие только одному знаку энергии, то «дрожание» отсутствует.

Так же как и в токе, «дрожание» проявляется и в движении центра волнового пакета:

$$\bar{x}_k = \int x_k W(x) dx = -\frac{\hbar}{i} \int \sum_p \Phi_p^* \frac{\partial \Phi_p}{\partial p} dp. \quad (56)$$

Из уравнения непрерывности непосредственно следует:

$$\frac{d\bar{x}_k}{dt} = J_k. \quad (57)$$

Постоянной во времени части J_k соответствует равномерное движение \bar{x}_k , осциллирующей части—осцилляции x_k . Прежде всего приходит мысль ввести дополнительное условие в теорию, допускающее лишь такие волновые пакеты, которые содержат собственные функции, принадлежащие исключительно к положительным энергиям. Это действительно возможно, если иметь в виду только случай свободной частицы; однако при наличии сил такое условие не согласуется с релятивистской инвариантностью и принципом соответствия с классической релятивистской механикой (см. § 5).

Математическая формулировка поведения общего волнового пакета и его свойств с течением времени становится более наглядной, если перейти от волновых функций к операторам¹⁾. Этот пе-

¹⁾ E. Schrödinger, *Berl. Ber.*, 1930, стр. 418; 1931, S. 63; V. Fock, *Zs. f. Phys.*, 55, 127, 1929; 68, 527, 1931 (в этой работе имеется такое применение к случаю наличия сил). Далее, дискуссия, см. E. Schrödinger, *ibid.*, 70, 808, 1931; V. Fock, *ibid.*, 70, 811, 1931.

реход производится точно так же, как в случае нерелятивистской волновой механики, только операторы действуют теперь также на индекс p , который пробегает четыре значения и всегда, когда производится интегрирование по координате или импульсу, следует суммировать также по p . Если D —оператор, который действует на функции $u_p(x)$, то

$$(Du)_p = \sum_{\sigma} D_{p\sigma} u_{\sigma}.$$

Оператор будет эрмитов, если для произвольных функций u_p и v_p имеем:

$$\int \sum_p (Dv)_p^* u_p dx = \int \sum_p v_p^* (Du)_p dx. \quad (58)$$

Изменение оператора во времени определяется требованием, что для двух произвольных решений $\psi_p(t)$, $\psi'_p(t)$ волнового уравнения должно соблюдаться соотношение:

$$\int \sum_p \psi_p^*(t) [D(0) \psi'(t)]_p dx = \int \sum_p \psi_p^*(0) [D(t) \psi'(0)]_p dx.$$

Тогда

$$D(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} D(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$$

и, таким образом,

$$\frac{dD}{dt} = \frac{i}{\hbar} (H D - D H). \quad (59)$$

Действительно, так как

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi, \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi'}{\partial t} = H \psi',$$

где H —гамильтонов оператор, являющийся эрмитовым, и принимая во внимание (58), имеем:

$$\frac{d}{dt} \int \sum_p \psi_p^* D \psi'_p dx = \frac{i}{\hbar} \int \sum_p \psi_p^* (H D - D H) \psi_p dx. \quad (59')$$

При этом предполагается, что D не зависит явно от времени.

Напишем теперь оператор гамильтона уравнения Дирака для свободной частицы:

$$H = c \left(\sum_{k=1}^3 \alpha^k p_k + \beta m c \right),$$

причём α^k , β коммутируют с p_k и x_k и удовлетворяют соотношениям (I) и, кроме того, выполняется соотношение:

$$p_i x_i - x_i p_i = \frac{\hbar}{i} \delta_{ik} I. \quad (60)$$

Далее, находим:

$$\dot{x}_\alpha = \frac{i}{\hbar} (H x_\alpha - x_\alpha H) = c \alpha_\alpha, \quad (61_1)$$

$$\dot{p}_k = \frac{i}{\hbar} (H p_k - p_k H) = 0, \quad (61_2)$$

$$\dot{\alpha}^k = \frac{i}{\hbar} (H \alpha^k - \alpha^k H) = \frac{2i}{\hbar} (c p_k - \alpha^k H) = 2 (H \alpha_k - c p_k), \quad (61_3)$$

$$\dot{\beta} = \frac{i}{\hbar} (H \beta - \beta H) = \frac{2i}{\hbar} (m c^2 - \beta H) = 2 (H \beta - m c^2), \quad (61_4)$$

последнее соотношение имеет место вследствие того, что:

$$H \alpha_k + \alpha_k H = 2c p_k, \quad H \beta + \beta H = 2m c^2. \quad (62)$$

Особенно замечательно уравнение (61₁), которое показывает, что α_k формально играют роль скоростей, и что последние не связаны так непосредственно с импульсами, как в классической механике. На это обстоятельство впервые указал Брейт¹⁾. Уравнения (61₃) определяют согласно (59') изменение общего тока во времени.

Отсутствие связи между скоростью и импульсом как раз теснейшим образом связано с возможностью состояний отрицательной энергии. Чтобы в этом убедиться, введём прежде всего по Шредингеру общее разложение волнового пакета на отрицательные и положительные функции. Положительной называется составная часть пакета, образованная исключительно из $C_p^{(+)}$:

$$\psi_p^{(+)} = \int C_p^{(+)}(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} p x} d p. \quad (63)$$

Точно так же

$$\psi_p^{(-)} = \int C_p^{(-)}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} p x} d p. \quad (63')$$

При этом $C_p^{(+)}$ и $C_p^{(-)}$ удовлетворяют соответственно уравнениям (50₁) и (50₂). Введём теперь оператор $\vec{\Lambda}$, определённый следующим образом:

$$\vec{\Lambda} = \frac{\alpha^k p_k + \beta m c}{\sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2}}. \quad (64)$$

¹⁾ G. Breit, *Proc. Nat. Acad. Amer.*, 14, 553, 1928; *ibid.*, 17, 70, 1931.

Этот оператор определён в пространстве импульсов, и ясно, каким образом он действует на функции $\varphi_p(p)$. \vec{A} — эрмитов оператор, квадрат \vec{A} равен 1:

$$\vec{A}^2 = 1. \quad (65)$$

Таким образом, \vec{A} вместе с тем унитарно, далее \vec{A} коммутирует с p_k и с оператором Гамильтона. Очевидно, \vec{A} переводит каждую из функций $\varphi_p^{(+)}$ саму в себя, каждую из функций $\varphi_p^{(-)}$ в ту же функцию, но с отрицательным знаком:

$$\vec{A}\varphi_p^{(+)} = \varphi_p^{(+)}, \quad \vec{A}\varphi_p^{(-)} = -\varphi_p^{(-)}. \quad (66)$$

Таким образом:

$$\vec{A}\varphi_p = \varphi_p^{(+)} - \varphi_p^{(-)}, \quad \text{если} \quad \varphi_p = \varphi_p^{(+)} + \varphi_p^{(-)}. \quad (67)$$

Теперь нетрудно определить \vec{A} так же и в координатном пространстве. Оператор p_k будет просто $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k}$, остаётся лишь опре-

делить оператор $\frac{1}{\sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2}}$. Но для функции

$$\varphi_p(x) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}$$

этот оператор уже определён. Таким образом:

$$\frac{1}{\sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2}} \int A_p(p) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} dp = \int \frac{A_p(p)}{\sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} dp.$$

Далее, так как

$$A_p(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi_p(x') e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}'} dx',$$

то, введя функцию

$$\begin{aligned} D(x) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}}{\sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2}} dp_1 dp_2 dp_3 = \\ &= \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \int \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} pr} - e^{+\frac{i}{\hbar} pr}}{\sqrt{m^2 c^2 + p^2}} p dp, \end{aligned}$$

получаем:

$$\frac{1}{\sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2}} \psi_p(\vec{x}) = \int D(\vec{x} - \vec{x}') \psi_p(\vec{x}') d\vec{x}'.$$

Мы не будем здесь исследовать более детально функцию $D(x)$, которая имеет особенность в $r=0$. Подчеркнём лишь, что $\vec{\Lambda}$ также и в координатном пространстве обладает свойством:

$$\left. \begin{aligned} \vec{\Lambda} \psi_r^{(+)} &= \psi_r^{(+)}, & \vec{\Lambda} \psi_r^{(-)} &= -\psi_r^{(-)}, \\ \psi_r^{(+)} &= \frac{1}{2}(1 + \vec{\Lambda}) \psi_r, & \psi_r^{(-)} &= \frac{1}{2}(1 - \vec{\Lambda}) \psi_r, \end{aligned} \right\} \quad (66')$$

Заметим ещё, что

$$\frac{1}{\sqrt{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2}} \vec{\Lambda} = \frac{\alpha^k p_k + \beta m c}{m^2 c^2 + \sum_k p_k^2} = c H^{-1}, \quad (68)$$

так как, умножив правую и левую части на $\frac{1}{c} H$, получаем тождество.

С помощью оператора $\vec{\Lambda}$ мы можем разложить каждый оператор D на «чётную» и «нечётную» составные части. При этом «чётным» оператором называется такой, который каждую положительную (или отрицательную) функцию преобразует снова в положительную (или отрицательную); «нечётным» — такой, который каждую положительную (или отрицательную) функцию преобразует в отрицательную (положительную). Так как все положительные функции ортогональны ко всем отрицательным, то математическое ожидание для «нечётных» операторов равно нулю во всех состояниях, которые представлены пакетом только с положительными или только с отрицательными энергиями:

$$\begin{aligned} \vec{\Lambda} D \vec{\Lambda} \psi^{(+)} &= \vec{\Lambda} D \psi^{(+)} = (D \psi^{(+)})^{(+)} - (D \psi^{(+)})^{(-)}, \\ \vec{\Lambda} D \vec{\Lambda} \psi^{(-)} &= -\vec{\Lambda} D \psi^{(-)} = -(D \psi^{(-)})^{(+)} + (D \psi^{(-)})^{(-)}. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\frac{1}{2} (D + \vec{\Lambda} D \vec{\Lambda}) = \frac{1}{2} \vec{\Lambda} (\vec{\Lambda} D + D \vec{\Lambda}) = g(D) \quad (69_1)$$

— «чётная» часть, а

$$\frac{1}{2} (D - \vec{\Lambda} D \vec{\Lambda}) = \frac{1}{2} (D \vec{\Lambda} - \vec{\Lambda} D) \vec{\Lambda} = u(D) \quad (62)$$

— «нечётная» часть D , посредством унитарного преобразования

$$D \rightarrow \vec{\Lambda} D \vec{\Lambda}$$

$D = g + u$ переводится в $g - u$.

Теперь легко найти «чётные» части α_k и β . Имеем:

$$g(\alpha_k) = c H^{-1} p_k, \quad g(\beta) = m c^2 H^{-1}. \quad (70)$$

«Чётные» части α_k и β имеют снова классическую связь с импульсом и энергией, которая не выполнялась для первоначальных операторов α_k и β .

Далее находим, принимая во внимание соотношение:

$$\mathbf{x}_k \vec{\Lambda} - \vec{\Lambda} \mathbf{x}_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \vec{\Lambda}}{\partial \mathbf{p}_k},$$

«нечётную» часть \mathbf{x}_k :

$$u(\mathbf{x}_k) = \frac{\hbar}{2i} c H^{-1} (\vec{\alpha}^k - \mathbf{p}_k c H^{-1}) = \frac{\hbar}{2i} c H^{-1} u(\vec{\alpha}_k), \quad (71)$$

что совпадает с выражением, найденным Шредингером.

д) *Волновое уравнение при наличии сил.* В классической релятивистской механике точки мы получаем функцию Гамильтона для заряженной частицы, находящейся под действием внешнего электромагнитного поля посредством замены энергии E через $E_0 + e\Phi_0$, импульса p_k — через $p_k + \frac{e}{c} \Phi_k$. При этом заряд частицы полагается равным $-e$, что удобно, если мы рассматриваем электрон, Φ_0 — электрический скалярный, а Φ_k — магнитный векторный потенциалы внешнего поля. Соединяя $(\Phi_k, i\Phi_0)$ в четырёхмерный вектор потенциала Φ_ν , а $(p_k, i\frac{E}{c})$ — в четырёхмерный вектор импульса и энергии p_ν , можно формулировать замену в инвариантной форме так, что p_ν должно быть заменено через $p_\nu + \frac{e}{c} \Phi_\nu$. Дирак сохранил это положение также и в квантовой теории, допустив, что волновое уравнение (II) следующим образом обобщается для случая заряженной частицы, находящейся под действием внешних сил:

$$\sum_{\mu=1}^4 \gamma^\mu \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{e}{c} \Phi_\mu \right) \psi - imc \psi = 0, \quad (III)$$

или

$$\sum_{\mu} \gamma_\mu \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\mu \right) \psi + \frac{mc}{\hbar} \psi = 0. \quad (III')$$

Для функции $\psi^{(+)}$, определённой выражением (8), тогда имеем:

$$\sum_{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_\mu \right) \psi + \gamma^\mu - \frac{mc}{\hbar} \psi = 0. \quad (III'')$$

Определения (20), (9) и (12) для четырёхмерного вектора тока можно оставить неизменными, так как уравнение непрерывности

$$\sum_{\nu=1}^4 \frac{\partial s_{\nu}}{\partial x_{\nu}} = 0$$

является и здесь следствием волнового уравнения. Также не изменяются рассуждения о релятивистской инвариантности.

Чрезвычайно важным для теории является то обстоятельство, что лишь напряжённости поля:

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial \Phi_{\nu}}{\partial x_{\mu}} - \frac{\partial \Phi_{\mu}}{\partial x_{\nu}} \quad (72)$$

имеют непосредственный физический смысл, тогда как потенциалы определены с точностью до градиента произвольной функции $f(x_1, \dots, x_4)$. Действительно, заменяя Φ_{μ} через

$$\Phi'_{\mu} = \Phi_{\mu} + \frac{\partial f}{\partial x_{\mu}}, \quad (73a)$$

мы оставляем $F_{\mu\nu}$ неизменными. Подстановка (73a) в (III) показывает, что при переходе от Φ_{μ} к Φ'_{μ} волновые функции ψ_{ρ} преобразуются следующим образом:

$$\psi'_{\rho} = \psi_{\rho} e^{-\frac{ie}{\hbar c} f}. \quad (73b)$$

Действительно, тогда

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi'_{\mu} \right) \psi' = \left(\frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\mu} \right) \psi. \quad (74)$$

Имея в виду подобное положение в прежней, развитой Вейлем теории гравитации и электричества, преобразования (73a) и (73b) называют *градиентным преобразованием* («Eich-преобразованиями»), а инвариантность вол-

¹⁾ F. London, *Zs. f. Phys.*, **42**, 375, 1927; H. Weyl, *ibid.*, **56**, 330, 1929

нового уравнения относительно этих преобразований — *градиентной инвариантностью* («Eich-инвариантностью»¹⁾).

Переходя от γ^ν к α^k и β , можно написать волновое уравнение (III) также следующим образом:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{ie}{\hbar c} \Phi_0 \psi + \sum_{k=1}^3 \alpha^k \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_k} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_k \psi \right) + i \frac{mc}{\hbar} \beta \psi = 0. \quad (75)$$

Таким образом оператор Гамильтона, определяемый уравнением

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} + H \psi = 0,$$

имеет следующий вид:

$$H = -e\Phi_0 + c \left[\sum_{k=1}^3 \alpha^k \left(p_k + \frac{e}{c} \Phi_k \right) + mc\beta \right]. \quad (76)$$

Введём далее вместо p_k и H операторы, инвариантные относительно градиентного преобразования:

$$\left. \begin{aligned} \vec{\pi}_k &= p_k + \frac{e}{c} \Phi_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \Phi_k, \\ \vec{\pi}_0 &= \frac{H}{c} + \frac{e}{c} \Phi_0 = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{e}{c} \Phi_0, \\ \vec{\pi}_4 &= i\pi_0 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_4} + \frac{e}{c} \Phi_4. \end{aligned} \right\} \quad (77)$$

Тогда снова имеем:

$$\sum_{\mu=1}^4 \gamma^\mu \vec{\pi}_\mu \psi - imc\psi = 0, \quad (\text{III}') \quad (78)$$

однако, π_μ удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$\vec{\pi}_\mu \vec{\pi}_\nu - \vec{\pi}_\nu \vec{\pi}_\mu = \frac{\hbar}{i} \frac{e}{c} F_{\mu\nu}, \quad (78)$$

в то время как p_μ коммутируют друг с другом.

Требования релятивистской инвариантности, градиентной инвариантности и соответствия с классической механикой не определяют ещё однозначно выбора выра-

жения (III). Остаётся ещё возможность изменить выражение (III), прибавив к нему дополнительный член

$$\frac{1}{c} M \sum_{\mu} \sum_{\nu} F_{\mu\nu} \gamma^{\mu} \gamma^{\nu} \psi,$$

где $F_{\mu\nu}$ означают, как и прежде, напряжённости внешнего поля, а M — вещественную постоянную, размерности произведения заряда на длину. Можно, однако, показать, что, уже исходя из волнового уравнения первого порядка без такого дополнительного члена, мы получаем согласие с опытом. При этом *автоматически получается также спин электрона (или протона), включая абсолютную величину $\frac{e\hbar}{2mc}$ его магнитного момента*. Это следует считать важнейшим успехом теории Дирака. Действительно, перейдём с помощью тех же операций, которые в случае свободного электрона привели к уравнению (5), от (III) к волновому уравнению второго порядка. Действуя на (III') оператором

$$\sum_{\mu=1}^4 \gamma^{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\mu} \right) - \frac{mc}{\hbar}$$

слева, получаем:

$$\sum_{\mu} \sum_{\nu} \gamma^{\mu} \gamma^{\nu} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\mu} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_{\nu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\nu} \right) - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi = 0.$$

Отделим здесь члены с $\mu = \nu$ от членов с $\mu \neq \nu$. Первые, в согласии с прежними релятивистскими теориями, дают

$$-\sum_{\nu} \left(\frac{\partial}{\partial x_{\nu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\nu} \right)^2 \psi,$$

так как $(\gamma^{\mu})^2 = 1$; члены с $\mu \neq \nu$ дают

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\nu} \gamma^{\mu} \gamma^{\nu} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\mu} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_{\nu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\nu} \right) - \right. \\ & \left. - \left(\frac{\partial}{\partial x_{\nu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\nu} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\mu} \right) \right\} \psi = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\nu} \gamma^{\mu} \gamma^{\nu} \frac{ie}{\hbar c} F_{\mu\nu} \psi, \end{aligned}$$

так как $\gamma_{\mu} \gamma_{\nu} = -\gamma_{\nu} \gamma_{\mu}$ для $\mu \neq \nu$. Здесь напряжённости поля снова определяются выражением (72). Таким обра-

зом конечный результат следующий:

$$\sum_{\nu} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x_{\nu}} + \frac{ie}{\hbar c} \Phi_{\nu} \right)^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\nu} \gamma^{\mu} \gamma^{\nu} \frac{ie}{\hbar c} F_{\mu\nu} \psi = 0, \quad (79)$$

или, введя операторы $p_{\nu} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_{\nu}}$:

$$\sum_{\nu} \left(p_{\nu} + \frac{e}{c} \Phi_{\nu} \right)^2 \psi + \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\nu} \gamma^{\mu} \gamma^{\nu} \frac{\hbar e}{ic} F_{\mu\nu} \psi = 0. \quad (79')$$

Из рассуждений следующего параграфа станет ясно, что в последнем характерном дополнительном члене действительно содержится энергия взаимодействия спина с внешним полем; в этом параграфе будет показано в общем виде, что нерелятивистская волновая механика спина, развитая в части I, § 13, является приближением релятивистской теории Дирака.

Трактовка процессов излучения по принципу соответствия может быть непосредственно перенесена на теорию Дирака. Только тогда в формулу (373) (часть I) для возмущающей энергии излучения следует вместо нерелятивистского выражения [часть I, (77)] для тока подставить выражение:

$$i_k = (-e) c (\psi^* \alpha_k \psi).$$

То обстоятельство, что в теории Дирака четырёхмерный вектор-потенциал совсем не входит в выражение для тока и только линейно в оператор Гамильтона, упрощает многие доказательства и выкладки по сравнению с нерелятивистской теорией. Важнейшими приложениями теории Дирака, приводящими к характерным для этой теории эмпирически проверяемым следствиям, являются, во-первых, точные собственные значения электрона в кулоновом центральном поле, совпадающие с выведенными ранее Зомерфельдом в его теории релятивистской тонкой структуры¹⁾, во-вторых, формула Клейна-Ни-

¹⁾ W. Gordon, *Zs. f. Phys.*, 48, 11, 1928; C. G. Darwin, *Proc. Roy. Soc. London (A)*, 118, 654, 1928. См. главу 3 *Handb. d. Phys.*, Bd. XXIV, 1933.

шины¹⁾ для интенсивности рассеяния коротковолнового излучения свободным электроном.

Наряду с законом сохранения заряда имеется ещё закон энергии-импульса. Правда, он утверждает не просто сохранение энергии и импульса одного лишь поля материи. Это имеет место только в случае отсутствия сил. При наличии же электромагнитного поля импульс и энергия будут передаваться системе. В общем случае существует, однако, тензор энергии-импульса $T_{\mu\nu}$, который удовлетворяет соотношению:

$$\sum_{\nu=1}^4 \frac{\partial T_{\mu\nu}}{\partial x_\nu} = \sum_{\nu} F_{\mu\nu} S_\nu = (-e) \sum_{\nu} F_{\mu\nu} (\psi^{(+)} \gamma^\nu \psi). \quad (75)$$

Действительно, посредством элементарного вычисления легко вывести это соотношение из волнового уравнения, если положить²⁾:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} T_{\mu\nu} &= \frac{1}{2} \left\{ \psi^+ \gamma^\nu \left[\left(p_\mu + \frac{e}{c} \Phi_\mu \right) \psi \right] - \right. \\ &\quad \left. - \left[\left(p_\mu - \frac{e}{c} \Phi_\mu \right) \psi^+ \right] \gamma^\nu \psi \right\} = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \left(\psi^+ \gamma^\nu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} - \frac{\partial \psi^+}{\partial x_\mu} \gamma^\nu \psi \right) + \frac{e}{c} \Phi_\mu (\psi^{(+)} \gamma^\nu \psi). \end{aligned} \quad (76)$$

Второй член прибавлен сюда, чтобы придать компонентам $T_{\mu\nu}$ должную вещественность. При этом ещё не были использованы перестановочные соотношения для дираковских матриц. Однако, их можно использовать, чтобы симметризовать тензор энергии-импульса. Чтобы это показать, умножим сначала волновое уравнение (III) слева на $\psi^{(+)} \gamma^\mu \gamma^\nu$, а волновое уравнение (III₊) справа на $\gamma^\mu \gamma^\nu \psi$ и сложим. При этом получаем:

$$\begin{aligned} \sum_{\rho=1}^4 \psi^+ \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \left[\left(p_\rho + \frac{e}{c} \Phi_\rho \right) \psi \right] + \\ + \left[\left(p_\rho - \frac{e}{c} \Phi_\rho \right) \psi^+ \right] \gamma^\rho \gamma^\mu \gamma^\nu \psi = 0. \end{aligned}$$

¹⁾ O. Klein u. Y. Nishina, *Zs. f. Phys.*, 52, 853, 1929; Y. Nishina, *ibid*, 52, 869, 1929; также J. Waller, *ibid*, 58, 75, 1929. См. главу 5. *Handb. d. Phys.*, т. XXIV, 1933.

²⁾ В прежней релятивистской квантовой теории тензор энергии-импульса был введен Е. Шредингером (*Ann. d. Phys.*, 82, 265, 1927). Аналогично проводимые вычисления для дираковской теории можно найти у Ф. Мёглиха (F. Mögliche, *Zs. f. Phys.*, 48, 852, 1928). Более полно рассмотрел вопрос Н. Тетроде (*ibid.*, 49, 858, 1928), показавший возможность симметризации тензора.

Для нас интересен только случай $\mu \neq \nu$, который мы в дальнейшем и рассматриваем. Отделим члены с $\rho = \mu$ и $\rho = \nu$, с одной стороны, и члены с $\rho \neq \mu$, $\rho \neq \nu$, с другой, причём последние будем отмечать штрихом при знаке суммы. Учитывая перестановочные соотношения (I') для матриц γ^μ , получаем:

$$-\frac{2}{c} (T_{\mu\nu} - T_{\nu\mu}) = \sum'_{\substack{\rho \neq \mu \\ \rho \neq \nu}} \psi^+ \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \left[\left(p + \frac{e}{c} \Phi \right) \psi \right] + \\ + \left[\left(p_\rho - \frac{e}{c} \Phi_\rho \right) \psi^+ \right] \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \psi,$$

или

$$\frac{2}{c} (T_{\mu\nu} - T_{\nu\mu}) = \frac{\hbar}{i} \sum'_{\substack{\rho \neq \mu \\ \rho \neq \nu}} \frac{\partial}{\partial x_\rho} (\psi^+ \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \psi). \quad (77)$$

Отсюда, однако, следует, что вследствие антисимметрии $\gamma^\nu \gamma^\rho$ относительно ρ и ν при $\rho \neq \nu$ дивергенция $T_{\mu\nu} - T_{\nu\mu}$ обращается в нуль:

$$\sum_{\nu=1}^4 \frac{\partial}{\partial x_\nu} (T_{\mu\nu} - T_{\nu\mu}) = 0. \quad (77')$$

Образует антисимметрический тензор:

$$\Theta_{\mu\nu} = \Theta_{\nu\mu} = \frac{1}{2} (T_{\mu\nu} + T_{\nu\mu}) = T_{\mu\nu} - \frac{\hbar c}{4i} \sum'_{\substack{\rho \neq \mu \\ \rho \neq \nu \\ (\mu \neq \nu)}} \frac{\partial}{\partial x_\rho} (\psi^{(+)} \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \psi) \quad (78)$$

(для $\mu = \nu$ последний член опускается). Этот тензор удовлетворяет также соотношениям вида (75)

$$\sum_{\nu=1}^4 \frac{\partial \Theta_{\mu\nu}}{\partial x_\nu} = \sum_{\nu}^4 F_{\mu\nu} s_\nu = (-e) \sum F_{\mu\nu} (\psi^+ \gamma^\nu \psi).$$

Как о частном применении соотношений (75) и (75') упомянем о законе сохранения импульса и законе сохранения момента импульса. Производя преобразования с помощью интегрирования по частям и учитывая (18), получаем для $k = 1, 2, 3$:

$$J_k = \frac{1}{ic} \int T_{1k} dV = \frac{1}{ic} \int \Theta_{k4} dV = \\ = \frac{1}{i} \int (\psi^{(+)} \gamma^4 \pi_k \psi) dV = \int (\psi^* \pi_k \psi) dV \quad (79)$$

и

$$j_k = - (e) \int \sum_{\nu} F_{k\nu} s_\nu dV. \quad (80)$$

Согласно (59), это эквивалентно следующему операторному соотношению, которое можно вывести непосредственно из (76):

$$\frac{d}{dt} \pi_k = \frac{e}{c} \frac{\partial \Phi_k}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\mathbf{H} \vec{\pi}_k - \vec{\pi}_k \mathbf{H}) = (-e) \left(E_k + \sum_{l=1}^3 F_{kl} \vec{a}_l \right). \quad (80')$$

Далее из (75') следует закон сохранения момента импульса: Если

$$P_{ik} = -P_{ki} = \frac{1}{ic} \int (x_i \theta_{k4} - x_k \theta_{i4}) dV \quad (i, k = 1, 2, 3) \quad (81)$$

и

$$d_{ik} = (-e) \sum_v (x_i F_{kv} - x_k F_{iv}) s_v \quad (82)$$

или, в операторном виде

$$d_{ik} = (-e) \left[x_i E_k - x_k E_i + \sum_{l=1}^3 (x_i F_{kl} - x_k F_{il}) a_l \right], \quad (82')$$

то имеем

$$\dot{P}_{ik} = \int d_{ik} dV. \quad (83)$$

При выводе последнего соотношения из (75') существенно использовать симметрию тензора θ_{ik} .

Подставляя (76) и (78) в (81), можно преобразовать выражения для компонентов момента импульса. Выполнив эту подстановку, получаем:

$$P_{ik} = \frac{1}{i} \int \psi^{(+)} \gamma^4 (x_i \pi_k - x_k \pi_i) \psi dV + \frac{\hbar}{2} \int (\psi^{(+)} \gamma^4 \gamma^i \gamma^k \psi) dV,$$

или, согласно (18):

$$P_{ik} = \int \psi^* \left[(x_i \pi_k - x_k \pi_i) + \frac{\hbar}{2} \left(-\frac{1}{i} \alpha^i \alpha^k \right) \right] \psi dV. \quad (84)$$

Соотношение (83) также может быть написано в операторной форме:

$$P_{ik} = x_i \vec{\pi}_k - x_k \vec{\pi}_i + \frac{\hbar}{2} i \alpha^i \alpha^k, \quad \frac{d}{dt} P_{ik} = d_{ik}, \quad (85)$$

что легко вывести непосредственно путём перестановки стоящего слева оператора с H .

Наличие добавочного члена $\frac{\hbar}{2} \alpha^i \alpha^k$ в операторе момента импульса тесно связано с поведением ψ относительно бесконечно малого вращения, за которое, согласно (32), как раз ответствен оператор $i \gamma^i \gamma^k = i \alpha^i \alpha^k$. По аналогии с нерелятивистской теорией можно интерпретировать первую часть оператора

момента импульса $\vec{x}_i \pi_k - x_k \pi_i$ как «орбитальный момент», вторую часть $\frac{\hbar}{i} i \alpha^i \alpha^k$ — как «спиновый момент». Однако, следует всегда помнить, что в релятивистской теории это разделение момента импульса на две части не соответствует непосредственно наблюдаемым физическим явлениям. В электрическом поле с центральной симметрией момент d_{ik} , очевидно, исчезает и момент импульса остаётся постоянным во времени.

§ 3. Нерелятивистская волновая механика спина как первое приближение.

Чтобы совершить переход к нерелятивистской теории спина в первом приближении для медленно движущихся частиц, целесообразно выбрать для матриц α_k и β форму (15); здесь β приведено к диагональной форме. Тогда оказывается, что если скорости частиц малы по сравнению со скоростью света, то две из компонент становятся малыми по сравнению с двумя другими. Чтобы это показать, введём вместо одной четырёхкомпонентной величины $(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$ две двухкомпонентные величины (φ_1, φ_2) и (χ_1, χ_2) ; причём, как обычно, в нерелятивистской волновой механике (см. часть I, стр. 40 и § 4) следует отделить множитель $e^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t}$.

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= \varphi_1 e^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t}, & \psi_2 &= \varphi_2 e^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t}, \\ \psi_3 &= \chi_1 e^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t}, & \psi_4 &= \chi_2 e^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t}. \end{aligned} \right\} \quad (86)$$

Тогда имеем из (75) и (76):

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - e \Phi_0 \varphi + \sum_{k=1}^3 \sigma_k \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \chi}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \Phi_k \chi \right) = 0, \quad (87_1)$$

$$-2mc^2 \chi + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \chi}{\partial t} - e \Phi_0 \chi + \sum_{k=1}^3 \sigma_k \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \Phi_k \varphi \right) = 0, \quad (87_2)$$

где σ_k — снова двурядные матрицы, определённые выражениями (14). Здесь существенно, что при величинах φ член, происходящий от дифференцирования по времени показательного множителя, сокращается с «членом массы»,

умноженным на β ; однако, при величинах χ эти члены складываются. Это обуславливает возможность разложения по обратным степеням скорости света $1/c$. Если величины φ рассматривать как величины нулевого порядка, то величины χ будут первого порядка. Введём, как в (77), операторы:

$$\vec{\pi}_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_k} + \frac{e}{c} \Phi_k.$$

Тогда мы получим вплоть до величин первого порядка:

$$\chi = \frac{1}{2mc} \sum_k \sigma_k \pi_k \varphi. \quad (88_1)$$

Следующее приближение даёт:

$$\chi = \frac{1}{2mc} \sum_k \sigma_k \pi_k \varphi + \frac{1}{4m^2 c^3} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi_0 \right) \sum_k \sigma_k \pi_k \varphi. \quad (88_2)$$

Вставив это выражение в (87₁), получим, сохраняя все величины до порядка $1/c^3$ включительно:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - e\Phi_0 \varphi + \frac{1}{2m} \sum_k \sum_l \sigma_k \sigma_l \pi_k \pi_l \varphi + \\ + \frac{1}{4m^2 c^3} \sum_k \sum_l \sigma_k \pi_k \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi_0 \right) \sigma_l \pi_l \varphi = 0. \end{aligned}$$

Разделяя члены с $k=l$ и $k \neq l$ и учитывая соотношение (78) и (14'), имеем далее:

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{1}{4m^2 c^3} \sum_k \pi_k^2 \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - e\Phi_0 \varphi \right) + \frac{1}{2m} \sum_k \pi_k^2 + \\ + \left\{ \frac{e\hbar}{2mc} \sum_i (H_i \sigma_i) + \frac{e\hbar}{2mc} \frac{1}{2} \frac{1}{mc} \left(\sum_i [\vec{E} \times \vec{\pi}]_i \sigma_i \right) - \right. \\ \left. - i \frac{e\hbar}{2mc} \frac{1}{2} \frac{1}{mc} \sum_i E_i \pi_i \right\} \varphi = 0. \quad (89) \end{aligned}$$

Множитель, стоящий перед $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t}$, соответствует поправке на изменение массы, далее имеем нерелятивистский член взаимодействия спина с внешним магнитным полем с

правильным значением $-\frac{e\hbar}{2mc}$ магнитного спинового момента, затем член, соответствующий поправке Томаса во внешнем электрическом поле с правильным множителем $1/2$, и, наконец, своеобразный дополнительный член, впервые найденный Дарвином¹⁾. Можно, впрочем, получить это волновое уравнение непосредственно, подставив (88₁) в строгое волновое уравнение второго порядка (79).

Полученный результат содержит доказательство того, что если:

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi_0\right) \varphi \ll 2mc^2 \varphi, \quad (90)$$

то из волнового уравнения Дирака следует, как первое приближение, волновое уравнение нерелятивистской квантовой механики спина. Этого достаточно, например, когда речь идёт о сравнении собственных значений энергии в обеих теориях. Однако, существенно, что в этом приближении в обеих теориях совпадают также следствия относительно величины вероятности перехода при испускании света. Этот вопрос будет сводиться по принципу соответствия к сравнению выражений для вектора тока в обеих теориях.

Чтобы провести это сравнение, целесообразно преобразовать сначала вектор тока

$$S_\mu = \psi^\dagger \gamma^\mu \psi$$

по способу, предложенному впервые Гордоном²⁾.

Подставим, согласно волновым уравнениям (III), (III₊), в выражение для S_μ один раз

$$-\frac{i}{mc} \sum_\nu \gamma^\nu \left(p_\nu + \frac{e}{c} \Phi_\nu\right) \psi \text{ вместо } \psi$$

и другой раз

$$+\frac{i}{mc} \sum_\nu \left[\left(p_\nu - \frac{e}{c} \Phi_\nu\right) \psi^{(+)}\right] \gamma^\nu \text{ вместо } \psi^{(+)}$$

¹⁾ C. G. Darwin, *Proc. Roy. Soc. London (A)*, 118, 654, 1928.

²⁾ W. Gordon, *Zs. f. Phys.*, 50, 630, 1927.

и сложим. Отделяя члены с $\mu = \nu$ и $\mu \neq \nu$, получаем:

$$s_\mu = s_\mu^{(0)} + s_\mu^{(1)}, \quad (91)$$

$$s_\mu^{(0)} = \frac{i}{2m_0 c} \left\{ \left[\left(p_\mu - \frac{e}{c} \Phi_\mu \right) \psi^{(+)} \right] \psi - \psi^{(+)} \left(p_\mu + \frac{e}{c} \Phi_\mu \right) \psi \right\}, \quad (92_0)$$

$$s_\mu^{(1)} = \frac{\hbar}{2mc} \sum_\nu \frac{\partial M_{\mu\nu}}{\partial x_\nu}, \quad (92_1)$$

где

$$M_{\mu\nu} = -M_{\nu\mu} = -\psi^{(+)} \gamma_\mu \gamma_\nu \psi. \quad (93)$$

Здесь $M_{\mu\nu}$ может рассматриваться как антисимметричный тензор поляризации и намагничивания. Замечательно, что

$$\sum_{\mu=1}^4 \frac{\partial s_\mu^{(1)}}{\partial x_\mu} = 0. \quad (94)$$

Таким образом, $s_\mu^{(0)}$ и $s_\mu^{(1)}$ сами по себе удовлетворяют уравнению непрерывности. Переходя к ψ^* , получим следующие выражения для пространственных компонент плотности тока:

$$i_k^{(0)} = c s_k^{(0)} = \frac{1}{2m_0} \left\{ \psi^* \left(p_k + \frac{e}{c} \Phi_k \right) \beta \psi - \right. \\ \left. - \left[\left(p_k - \frac{e}{c} \Phi_k \right) \psi^* \right] \beta \psi \right\}, \quad (92'_0)$$

$$i_k^{(1)} = c s_k^{(1)} = \frac{\hbar}{2m} \sum_{\nu=1}^4 \frac{\partial M_{k\nu}}{\partial x_\nu} \quad (92'_1)$$

и

$$M_{kl} = -M_{lk} = \frac{1}{i} (\psi^* \beta \alpha_k \alpha_l \psi) \text{ для } k \neq l \text{ и } k, l = 1, 2, 3, \left. \vphantom{\frac{1}{i}} \right\} (93') \\ M_{k4} = \frac{1}{i} (\psi^* \beta \alpha_k \psi).$$

Если мы снова отделим временный множитель, согласно (86), и возьмём матрицы α_k и β в форме (15), то увидим, что M_{k4} будет порядка $1/c^2$, а M_{kl} , пренебрегая членами порядка $1/c^2$, равно:

$$M_{12} = -M_{21} = (\varphi^* \sigma_3 \varphi), \dots \quad (95)$$

Если пренебречь членами порядка $1/c^2$, то $i_k^{(0)}$ совпадает с выражением для тока нерелятивистской теории. Дополнительный член

$$\vec{i}^{(1)} = \text{rot}(\varphi^* \vec{\sigma} \varphi) \quad (96)$$

не может быть, согласно части 1 (364) и (370), причиной дипольного излучения, так как в результате интегрирования по объёму все его матричные элементы исчезают. Однако, он должен быть учтён при расчёте квадрупольного или мультипольного излучения.

Интересно сравнить выражение (81), (84) для момента импульса P_{ik} с выражением для магнитного момента:

$$\begin{aligned} \bar{M}_{ik} &= \frac{(-e)}{2c} \int (x_i i_k - x_k i_i) dV = \\ &= \int \psi^* \left[\frac{(-e)}{2mc} (x_i \pi_k - x_k \pi_i) \beta + \frac{(-e) \hbar}{2mc} \frac{1}{i} (\alpha_i \alpha_k \beta) \right] \psi dV. \end{aligned} \quad (97)$$

Вследствие наличия в последнем выражении матрицы β , обе части M_{ik} и P_{ik} в общем случае не пропорциональны друг другу. Пропорциональность имеет место лишь для малых скоростей частицы, когда можно пренебречь величинами порядка v^2/c^2 . В этом случае частное магнитного и механического моментов для первой части равно $-e/2mc$, для второй $-e/mc$ в соответствии с требованиями опыта¹⁾.

Валлер²⁾ сравнил, пользуясь принципом соответствия, следствия, вытекающие из волнового уравнения Дирака для рассеяния света, со следствиями из волнового уравнения нерелятивистской теории. В первой (дираковской) теории оператор возмущения гамильтоновской функции имеет вид просто $\sum_{k=1}^3 e (a^k \Phi_k)$, где Φ_k вектор-потенциал внешнего поля излучения; в противоположность нерелятивистской теории в релятивистской функции возмущения отсутствуют члены, пропорциональ-

¹⁾ См. также С. G. Darwin, *Proc. Roy. Soc. London*, 120, 621, 1928; о величине магнитного момента водородоподобных атомов G. Breit, *Nature*, 122, 649, 1928.

²⁾ I. Waller, *Zs. f. Phys.*, 58, 57, 1929.

ные Φ_k^+ . Поскольку в нерелятивистской теории (как упоминалось в части I, § 15) в случае, когда рассеивается квант с энергией $h\nu$, большой по сравнению с ионизационным потенциалом системы и малой по сравнению с mc^2 , как раз эти квадратичные члены Φ_k^+ функции возмущения дают главную часть рассеянного излучения, то можно с первого взгляда усомниться, совпадают ли здесь хотя бы приближённо результаты, полученные с помощью волнового уравнения Дирака с результатами нерелятивистской теории. Однако, оказывается, что те матричные элементы выражения $\sum_k \alpha^k \Phi_k$, которые соответствуют переходам от состояний с положительной к состояниям с отрицательной энергией, дают в конечном счёте как раз те члены интенсивности рассеянного излучения, которые в нерелятивистской теории обязаны своим происхождением члену гамильтоновской функции, пропорциональному Φ_k^+ . Это особенно важно потому, что отсюда следует, что матричные элементы функции возмущения, относящиеся к упомянутым переходам, не могут быть просто вычеркнуты. Эти матричные элементы оказываются особенно существенными для согласования результатов, получающихся при вычислении интенсивности рассеяния света низкой частоты ($h\nu \ll mc^2$) на свободных электронах, если вычисление проводится один раз с помощью волнового уравнения Дирака, другой раз с помощью классической теории (формула Томсона).

§ 4. Предельный переход к классической релятивистской механике частицы.

Релятивистская квантовая теория должна в двух предельных случаях смыкаться с известными теориями: с одной стороны, с нерелятивистской, волновой механикой, с другой — с классической релятивистской механикой частицы. Можно грубо охарактеризовать эти предельные случаи тем, что в одном случае $\lim c \rightarrow \infty$, в другом $\lim h \rightarrow 0$. Первый случай обсуждался в предыдущем параграфе, второй мы рассмотрим сейчас. Этот случай важен, например, при рассмотрении опытов по отклонению электронов со скоростями, сравнимыми со скоро-

стью света, во внешних электрических и магнитных полях; как известно, такие опыты использовались для определения зависимости массы частицы от скорости.

Классическая релятивистская механика частицы с зарядом $(-e)$ и массой покоя m покоится на вытекающих из функции Гамильтона

$$H(p_k, x_k) = c \sqrt{m^2 c^2 + \sum_{k=1}^3 \left(p_k + \frac{e}{c} \Phi_k\right)^2} - e \Phi_0 \quad (98)$$

канонических уравнениях движения:

$$\dot{x}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial x_k}. \quad (99)$$

Введём величины

$$\pi_k = p_k + \frac{e}{c} \Phi_k.$$

Тогда уравнения движения можно записать так:

$$\dot{x}_k = \frac{c \pi_k}{\sqrt{m^2 c^2 + \sum_{k=1}^3 \pi_k^2}}, \quad \dot{\pi}_k = (-e) \left(E_k + \frac{1}{c} [\vec{x} \times \vec{H}]_k\right), \quad (100)$$

где \vec{E} и \vec{H} , как и прежде, — напряжённости поля, полученные из потенциалов Φ_0, Φ_k . Чтобы исследовать, вытекают ли эти уравнения в предельном случае из волнового уравнения, необходимо совершить предельный переход от волнового уравнения к геометрической оптике, аналогичный тому, который разбирался в части I, § 12, в случае нерелятивистской волновой механики. По аналогии с соотношением (261) (часть I) положим и здесь:

$$\varphi_p = a_p e^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (101)$$

и разложим a_p по степеням \hbar/i :

$$a_p = a_{0p} + \frac{\hbar}{i} a_{1p} + \dots \quad (102)$$

При этом существенно и необходимо, чтобы волновая функция (эйконал) S не зависела от индекса p , так как иначе входящий в волновое уравнение экспоненциаль-

ный множитель не сократился бы и потому разумное разложение по степеням \hbar было бы невозможно. Далее, подставляя (101) в волновое уравнение (75), (76), получим

$$\pi_0 = -\frac{1}{c} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{e}{c} \Phi_0, \quad \pi_k = \frac{\partial S}{\partial x_k} + \frac{e}{c} \Phi_k, \quad (103)$$

$$\left(-\pi_0 + \sum_{k=1}^3 \alpha^k \pi_k + \beta mc \right) a + \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{c} \frac{\partial a}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \alpha^k \frac{\partial a}{\partial x_k} \right) = 0. \quad (104)$$

Здесь индексы снова опущены, и под a (в противоположность S , π_0 , π_k) следует понимать одностолбцовую матрицу, как раньше ψ . Подставляя разложение (102) для a , получаем далее последовательно, одно за другим, уравнения:

$$\left(-\pi_0 + \sum_k \pi_k \alpha^k + mc\beta \right) a_0 = 0, \quad (105_0)$$

$$\left(-\pi_0 + \sum_k \pi_k \alpha^k + mc\beta \right) a_1 = -\left(\frac{1}{c} \frac{\partial a_0}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \alpha^k \frac{\partial a_0}{\partial x_k} \right), \quad (105_1)$$

.....

Чтобы однородная система уравнений (105₀) имела решения, π_0 , π_k должны удовлетворять условию:

$$-\pi_0^2 + \sum_{k=1}^3 \pi_k^2 + m^2 c^2 = 0, \quad (106)$$

которое, в силу (103), идентично с уравнением в частных производных Гамильтона-Якоби в механике частицы. Уравнение (105₁) даёт тогда ¹⁾, что в областях, которые достижимы для частицы с точки зрения классической механики, т. е. где π_0 , π_k вещественны, для

$$\rho = (a_0^* a_0)$$

¹⁾ Вывод см. W. Pauli, *Helv. Phys. Acta*, 5, 179, 1932.

имеет место уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho \frac{c \pi_k}{\pi_0} \right) = 0.$$

Так как

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = \frac{c \pi_k}{\pi_0},$$

и в силу (106), это означает, что частицы распространяются вдоль классических траекторий, определяемых уравнением (99). Это заключение вполне аналогично тому, что мы имели в нерелятивистской волновой механике, и здесь также условием малости a_1 по сравнению с a_0 будет малость градиента длины волны материи по сравнению с 1.

Однако, для релятивистской волновой механики характерным обстоятельством является то, что получающиеся траектории есть траектории частицы без спина. Влияние спина на пространственно-временное поведение плотности и тока частицы проявляется лишь в амплитудах a_1 , содержащих также эффекты дифракции; в этом следующем приближении понятие траектории вообще уже теряет смысл. Это происходит потому, что магнитный спиновый момент пропорционален кванту действия, и проистекающие от спина эффекты описываются теорией Дирака автоматически, не требуя введения нового дополнительного члена. Это подтверждает тезис Бора¹⁾: *Спиновый момент электрона, однозначно отделённый от орбитального момента, никогда не может быть определён посредством опытов, к которым применимо классическое понятие траектории частицы.* Действительно, опыты, определяющие спиновый момент свободного электрона посредством отклонения в соответствующих внешних силовых полях (например посредством устройства, аналогичного опыту Штерна-Герлаха с пучком молекул), приводят к следующему характерному положению: чтобы отклонение не смазывалось дифракционным эффектом, пучки должны

¹⁾ N. Bohr, *Atomtheorie und Naturbeschreibung*, Berlin, 1931. Вступительный обзор стр. 9; далее Faraday Lecture, *Journ. Chem. Soc.* 1932, стр. 349, особенно стр. 367 и 368.

быть достаточно больших размеров. Однако тогда действие силы Лоренца, происходящей от изменения напряжённости поля внутри пучка, делает невозможным наблюдение отклонения, вызванного только действующей на спин силой¹⁾.

Тем не менее для доказательства наличия спина свободного электрона возможно использовать другие эксперименты, не связанные с классической механикой и с понятием траектории. Наиболее интересна возможность доказательства с помощью поляризации электронных волн. Аналогично известному опыту в классической волновой оптике при двукратном рассеянии электронного пучка на каком-либо атоме (или отражении от какого-либо зеркала) интенсивность третичного излучения будет зависеть не только от значений угла рассеяния (угла отражения), но также от угла Φ между плоскостью, проходящей через первичный и вторичный лучи, и плоскостью, проходящей через вторичный и третичный лучи. Но в противоположность классической оптике, где интенсивность J третичного излучения зависит только от $\cos^2 \Phi$, в случае электронов эта интенсивность при фиксированном угле рассеяния линейна относительно $\cos \Phi$ и может быть записана в следующей форме

$$J = J_0 (1 + \delta \cos \Phi).$$

Для случая рассеяния электрона на незэкранированном ядре этот эффект был рассчитан Моттом²⁾.

Другая разновидность поляризационных эффектов может быть получена с помощью применения уже направленных атомов³⁾. Мы не будем подробнее вдаваться в этот вопрос, так как до сих пор не имеется ещё не возбуждающих сомнения экспериментов, которые можно было бы однозначным образом сравнивать с теорией.

¹⁾ О дальнейшей дискуссии см. N. F. Mott, *Proc. Roy. Soc., London* (A), 124, 425, 1929; C. G. Darwin, *ibid*, 130, 632, 1930; далее материалы Solvey-Kongress, 1930 г., реферат Паули о магнитном электроном.

²⁾ N. F. Mott, *Proc. Roy. Soc. London* (A), 124, 425, 1929.

³⁾ См. A. Landé, *Naturwissensch.*, 17, 634, 1929; E. Fues и H. Hellmann, *Phys. Zs.*, 31, 465, 1930; N. F. Mott, *Proc. Roy. Soc. London* (A), 125, 222, 1929; далее в прим. 2 цитир. работ Сольвей-конгресса.

§ 5. Переходы в состояния с отрицательной энергией. Граница применимости теории Дирака

Мы видели уже в случае свободного электрона, что волновое уравнение кроме собственных решений с положительной энергией имеет также собственные решения, принадлежащие отрицательным энергиям. При наличии силовых полей это обстоятельство может, как показал впервые Клейн¹⁾, привести к своеобразным парадоксам.

Рассматривая классическую теорию при наличии внешних сил, мы видим, что здесь дифференциальное уравнение в частных производных (106) Гамильтона-Якоби допускает оба решения:

$$\pi_0 = + \sqrt{m^2 c^2 + \sum_k \pi_k^2}$$

и

$$\pi_0 = - \sqrt{m^2 c^2 + \sum_k \pi_k^2}.$$

Последний случай соответствует отрицательной кинетической энергии частицы и следующей гамильтоновской функции:

$$H = -c \sqrt{m^2 c^2 + \sum_k \left(p_k + \frac{e}{c} \Phi_k \right)^2} - e \Phi_0. \quad (98')$$

Уравнение движения получаем из (100), просто изменив знак квадратного корня, так что при неизменных π_k имеем:

$$\dot{x}_k = - \frac{c \pi_k}{\sqrt{m^2 c^2 + \sum_k \pi_k^2}}. \quad (100')$$

Таким образом, в этом случае ускорение направлено противоположно силе. Области, которые, согласно (98), (положительная кинетическая энергия) соответствуют определенному значению общей энергии (кинетическая

¹⁾ O. Klein, *Zs. f. Phys.*, 53, 157, 1929.

плюс потенциальная) и области, которые, согласно (98'), (отрицательная кинетическая энергия) соответствуют *тому же* значению общей энергии, всегда разделены в пространстве конечной промежуточной областью.

Перейдём теперь к волновой механике и рассмотрим частный случай одномерного электрического поля ($\Phi_k = 0$, Φ_0 зависит только от x) и зависящую только от x волновую функцию (движение в направлении x); пусть далее Φ_0 непрерывно убывает с возрастанием x . При заданной общей энергии E следует различить три области:

1. $x < a$, $mc^2 < E + e\Phi_0(x)$,
2. $a < x < b$, $-mc^2 < E + e\Phi_0(x) < mc^2$,
3. $b < x$, $E + e\Phi_0 < -mc^2$.

Точка $x = a$ соответствует точке поворота, проходящей в области 1, классической траектории частицы с положительной кинетической энергией; лежащая правее точка $x = b$ соответствует точке поворота, проходящей в области 3 траектории частицы с отрицательной кинетической энергией и тем же значением E общей энергии. Область 2 с классической точки зрения недостижима для частицы, так как в этой области импульс

$$p(x) = \sqrt{\frac{[E + e\Phi_0(x)]^2}{c^2} - m^2c^2} \quad (107)$$

будет мнимым.

В волновой механике эта промежуточная область, однако, не полностью непроницаема. Коэффициент проницаемости D при весьма общих условиях даётся выражением

$$D = e^{-2W}, \quad (108)$$

где

$$W = \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx = \frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{m^2c^2 - \left[\frac{E + e\Phi_0(x)}{c} \right]^2} dx. \quad (109)$$

W есть разделённый на \hbar интеграл действия¹⁾, распро-

¹⁾ См. W. Pauli, *loc. cit.*, стр. 319, для специального поведения потенциала A. Sauter, *Zs. f. Phys.*, **69**, 742, 1931; **73**, 547, 1931. Для однородного поля напряжённости F имеем $W = \frac{\pi}{2} \frac{m^2s^3}{\hbar eF}$.

странённый по промежуточной области. При этом, во-первых, предположено, что W очень малое число, что практически всегда выполняется и, во-вторых, что потенциал Φ_0 непрерывен. Первоначальное вычисление Клейна относилось к сингулярному случаю, когда $\Phi_0(x)$ разрывно в некоторой точке, так что область 2 стягивается в одну точку оси x . В этом случае, при котором легко провести непосредственное интегрирование волнового уравнения, соотношение (108) более не применимо.

Таким образом теория Дирака приводит к заключению, что частицы с положительной массой покоя могут с конечной вероятностью проходить через промежуточную область и превращаться в частицы с отрицательной массой покоя (при сохранении суммы кинетической и потенциальной энергий). Очевидно, этот вывод теории противоречит опыту и возникает вопрос, как выйти из этого положения? Во-первых, во всяком случае верно, что при всех практически осуществимых напряжённостях поля вероятность «катастрофических» переходов ничтожно мала. Так как, однако, речь идёт о принципиальном вопросе, нужно тем не менее потребовать в правильной теории не только малости, но и точного исчезновения этих переходов. При напряжённостях поля, для которых интеграл (109) имеет значение порядка 1, не могли бы стабильно существовать создающие поле атомы. Поэтому интересно исследовать, не вводя понятия внешнего феноменологически заданного электрического поля, при каких взаимодействиях элементарных частиц друг с другом или элементарных частиц с излучением могут произойти, согласно теории, переходы от состояний с положительной энергией к состояниям с отрицательной энергией.

Рассмотрим простейший случай, когда взаимодействуют только две частицы, именно: или соударение двух заряженных частиц, обладающих массой покоя, или рассеяние светового кванта на свободной частице, обладающей массой покоя. В этих случаях уже только из законов сохранения энергии и импульса следует, что переходы к состояниям с отрицательной энергией не могут происходить. Это можно показать следующим образом. Пусть

(E, \vec{P}) , (E', \vec{P}') — энергия и импульс *одной* частицы (E_1, \vec{P}_1) , (E'_1, \vec{P}'_1) — энергия и импульс *другой* частицы до и после столкновения. Тогда имеем:

$$\frac{E^2}{c^2} - \vec{P}^2 = \frac{E'^2}{c^2} - \vec{P}'^2 = m^2 c^2, \quad \frac{E_1^2}{c^2} - \vec{P}_1^2 = \frac{E'_1{}^2}{c^2} - \vec{P}'_1{}^2 = m_1^2 c^2,$$

$$E + E_1 = E' + E'_1, \quad \vec{P} + \vec{P}_1 = \vec{P}' + \vec{P}'_1.$$

Отсюда получаем, возводя в квадрат два последних равенства:

$$\frac{EE_1}{c^2} - (\vec{P}\vec{P}_1) = \frac{E'E'_1}{c^2} - (\vec{P}'\vec{P}'_1),$$

или

$$\frac{EE_1}{c^2} \left(1 - \frac{c^2 (\vec{P}\vec{P}_1)}{EE_1} \right) = \frac{E'E'_1}{c^2} \left(1 - \frac{c^2 (\vec{P}'\vec{P}'_1)}{E'E'_1} \right).$$

Стоящие в скобках выражения всегда положительны, так как мы предположили, что по крайней мере одна из частиц — материальная частица — и для неё всегда соблюдается $\frac{c^2 |\vec{P}|}{|E|} < 1$ и $\frac{c^2 |\vec{P}'|}{|E'|} < 1$, в то время как для второй частицы $\frac{c^2 |\vec{P}_1|}{E_1} < 1$, если $m > 0$ (материальная частица), или $\frac{c^2 |\vec{P}_1|}{E_1} = 0$, если $m_1 = 0$ (световой квант).

Таким образом $E'E'_1$ должно иметь тот же знак, что и EE_1 , т. е., по предположению, — положительный. Далее, по закону сохранения энергии E' и E'_1 не могут быть оба отрицательны, если E, E_1 оба положительны. Отсюда следует положительный знак для E' и E'_1 в отдельности¹⁾.

Этот вывод не имеет, однако, принципиального значения, так как при взаимодействии более чем двух частиц «катастрофический» переход к состоянию с отрицательной энергией уже не запрещается законами сохранения. При этом возможны следующие типы процессов:

¹⁾ В случае спонтанной эмиссии одного светового кванта при переходе электрона в состояние отрицательной энергии в формуле следовало бы положить $E_1 = P_1 = 0$. Отсюда следует обращение в нуль правой части последнего равенства. Это, однако, возможно лишь, если $E'_1 = P'_1 = 0$, т. е. рассматриваемый переход невозможен. Он требует эмиссии по крайней мере двух световых квант.

1. Три заряженные частицы сталкиваются друг с другом, и одна (или больше) из них переходит без излучения в состояние с отрицательной энергией. Можно также предположить, что две частицы, например электрон и протон, первоначально находятся в связанном состоянии (H-атом), и допустить, что с ними сталкивается в дальнейшем быстрый электрон. Для таких процессов ещё не произведены количественные расчёты, однако, нет сомнения, что, согласно теории Дирака, эти переходы действительно должны происходить.

2. Две частицы, обладающие массой покоя при своём взаимодействии (например, H-атом), спонтанно излучают световой квант, и система из двух частиц остаётся в состоянии с отрицательной энергией. Кроме спонтанной, здесь также может произойти индуцированная эмиссия света, которая наступает, если в начальном состоянии уже имеется световой квант с той же частотой, что и излучаемый ¹⁾. Согласно оценке Оппенгеймера ²⁾, длительность жизни H-атома в основном состоянии равна по теории лишь 10^{-10} сек.

3. Рассеяние светового кванта на двух взаимодействующих частицах с конечной массой (например, H-атом) с переходом системы в состояние с отрицательной энергией.

4. Спонтанная эмиссия свободным электроном двух световых квантов, причём электрон переходит в состояние с отрицательной массой покоя ³⁾. Для расчёта последнего процесса используются высшие приближения тео-

¹⁾ Многие авторы предпочитают обсуждение последнего процесса, так как в этом случае при рассмотрении с помощью принципа соответствия (часть I, § 16) не требуется предписание II, подтверждаемое лишь квантовой теорией света связь между спонтанной и индуцированной эмиссиями, а также между принципом соответствия и квантовой теорией света, кажется нам, однако, очень тесной, так что нецелесообразно вводить в этом месте принципиальное различие.

²⁾ J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.*, **35**, 939, 1930.

³⁾ Частота этого процесса вычислена Оппенгеймером, I. с., и Дираком (*Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **26**, 361, 1930). Дирак предпочитает, на основании изложенного в примечании 1, обсуждение такой индуцированной эмиссии, когда вначале существуют два световых кванта, частота которых совпадает с частотой испущенного кванта.

рии излучения подобно тому, как при выводе формулы Клейна-Нишины, в то время как для упомянутых ранее процессов это не требуется.

Попытка снасти теорию в её теперешней форме кажется в свете этих следствий уже с самого начала безнадёжной; с другой стороны, трудно предсказать, с какой количественной точностью результаты теперешней теории будут приближённо справедливы в будущей, правильной теории. Предлагаемые до сих пор попытки модифицировать теорию едва ли могут рассматриваться, как удовлетворительные. Сам Дирак¹⁾ предпринял такую попытку. Он предположил, что в пустом пространстве все состояния с отрицательной энергией заполнены, каждое — одним электроном. Вследствие принципа Паули такое состояние стабильно. Далее вводится дополнительное предположение, что бесконечный заряд этих электронов не создаёт поля, но поле создаётся только отклонением заполнения состояний от нормального заполнения. В этом случае незаполненные состояния с отрицательной энергией ведут себя как по отношению к создаваемому ими полю, так и по отношению к своему поведению во внешнем поле подобно частицам с зарядом $+e$ и положительной массой. Однако, эти «дырки» нельзя отождествить с протонами, так как, во-первых, масса частиц должна точно равняться массе электронов и, во-вторых, по этой теории должна была бы очень часто происходить аннигиляция электрона и протона (например, атома водорода), сопровождаемая излучением. Поэтому недавно Дирак предложил уже обсуждавшийся ранее Оппенгеймером выход — отождествить «дырки» с антиэлектронами, частицами заряда $+e$ с массой электрона. Аналогично этому кроме протонов должны существовать антипротоны. Фактическое отсутствие таких частиц пытаются объяснить особым начальным состоянием, при котором имеются как раз частицы лишь одного сорта. Этот выход является уже потому неудовлетворительным, что законы природы в этой теории совершенно симметричны относительно электронов и антиэлектронов. Но тогда фо-

¹⁾ P. A. M. Dirac. *Proc. Roy. Soc. London*, 126, 360, 1931; ср. *ibid*, 133, 60, 1931.

тоны γ -излучения (чтобы удовлетворить законам сохранения энергии и импульса, их должно быть по крайней мере два) могут спонтанно превращаться в электрон и антиэлектрон. Мы не думаем, таким образом, чтобы намеченный путь мог быть серьёзно принят во внимание.

Другая модификация теории была предложена Шредингером¹⁾. Он предложил так изменить разность $-e\Phi_0 + e \sum \alpha^k \Phi_k$ в операторе Гамильтона, чтобы сохранить лишь «чётную» часть оператора (см. § 2, с). Тогда, если начальное состояние волнового пакета при разложении на собственные функции свободной частицы содержит состояния только с положительной энергией, то это свойство будет всё время сохраняться. Таким образом, переходы в состояния с отрицательной энергией не смогут происходить. Так как, однако, при этом видоизменении теории теряется релятивистская инвариантность и «Eich-инвариантность», то Шредингер сам отказался от этого пути. Далее при такой модификации теории получилось бы противоречие с классической формулой Томсона для рассеяния света низкой частоты на свободных электронах.

Таким образом, оказывается, что существующая в теории трудность является действительно глубокой, и её нельзя ни отбросить, ни преодолеть каким-либо простым способом. В этой связи мы возвращаемся к критике понятия вероятности положения электрона или импульса электрона в точно определённый момент времени. В части I, § 2 указано, что, как показали Ландау и Пайерлс²⁾, непосредственное измерение координат электрона возможно лишь с точностью:

$$\Delta x \sim \frac{h}{mc} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \frac{hc}{E}^*), \quad (110)$$

¹⁾ E. Schrödinger, *Berl. Ber.*, 1931, S. 63.

²⁾ L. Landau u. R. Peleris, *Zs. f. Phys.*, **69**, 56, 1931.

^{*)} Отсюда впрочем видно, что универсальная наименьшая длина *наверное* не может существовать, как это также следует на основании релятивистской инвариантности.

и для временного интервала

$$\Delta t \sim \frac{1}{c} \Delta x, \quad (111)$$

а измерения импульса для временного интервала Δt возможны лишь с точностью:

$$\Delta p \sim \frac{h}{c \Delta t}. \quad (112)$$

А priori мыслима, конечно, непротиворечивая теория, которая использовала бы в качестве вспомогательных средств не непосредственно измеримые величины. Однако, как раз то обстоятельство, что в теории Дирака появляется трудность с состояниями отрицательной энергии, указывает, по нашему мнению, на то, что упомянутые ограничения в возможностях измерения найдут более непосредственное выражение в аппарате будущей теории и что с этой новой теорией будет связано существенное и глубокое изменение основных понятий и формального аппарата современной квантовой теории¹⁾. Ограничения в измерении координат и времени, сформулированные в уравнениях (110) и (111), как раз таковы, что колебания «средней точки» и общего тока в случае свободной частицы (для волнового пакета, составленного из состояний положительной и отрицательной энергии), дающиеся уравнениями (54) и (57), являются ненаблюдаемыми. Будущая теория должна будет так же, как особенно настойчиво подчеркивает Бор²⁾, установить связь между атомистической структурой электрического заряда и существованием кванта действия и, кроме того, разрешить проблему устойчивости электрона и соотношения масс электрона и протона.

¹⁾ Аналогичной точки зрения придерживается E. Schrödinger, *Berl. Ber.*, 1931, S. 238.

²⁾ N. Bohr, *Faraday Lecture, Journ. Chem. Soc.*, 1932, стр. 349.

§ 6. Квантование свободного излучения.

а) *Классическая теория.* Как известно, собственные колебания кубической полости (Hohlraum) со сторонами, равными l , объёмом $V=l^3$ и идеально отражающими стенками, обладают следующими свойствами: компоненты k_i вектора распространения волны, абсолютная величина которого равна $2\pi/\lambda$, имеют собственные значения:

$$k_i = 2\pi \frac{s_i}{2l}, \quad s_1, s_2, s_3 = 1, 2, 3, \dots,$$

где целые числа s_i могут принимать лишь положительные значения, так как мы имеем стоячие волны. Число собственных колебаний dN со значениями k_i , лежащими в интервале $(k_i, k_i + dk_i)$, равно:

$$dN = V \cdot 2 \cdot 8 \frac{1}{(2\pi)^3} dk_1 dk_2 dk_3,$$

причём первый множитель, 2, учитывает два направления поляризации волны, в то время как второй множитель, 8, получается потому, что в случае стоячих волн следует принимать во внимание лишь положительный октант в k -пространстве.

Для дальнейшего, однако, удобнее иметь дело с бегущими волнами. Мы получаем то же общее число собственных колебаний в определённом интервале частот, если наложим на поле следующее требование: *поле периодически относительно каждой из трёх пространственных координат с периодом l* . Собственные значения k_i тогда равны:

$$k_i = 2\pi \frac{s_i}{l}, \quad s_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (113)$$

Эти собственные значения могут быть теперь положительны и отрицательны. Число собственных колебаний между $k_i, k_i + dk_i$ будет.

$$dN = V \cdot 2 \frac{1}{(2\pi)^3} dk_1 dk_2 dk_3, \quad (114)$$

причём, однако, теперь уже используется всё k -пространство, а не только положительный октант. Электрическая и магнитная напряжённости $\vec{E}(k, x)$ и $\vec{H}(k, x)$

волны, распространяющейся в направлении \vec{k} , могут быть удобно записаны, если ввести только один комплексный вектор напряжённости поля $\vec{F}(k)$

$$\vec{E}(k, x) = \vec{F}(k) e^{i(\vec{k}x)} + \vec{F}^*(k) e^{-i(\vec{k}x)}, \quad (115)$$

$$\vec{H}(k, x) = \left[\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}, \vec{F}(k, x) \right]. \quad (116)$$

При этом выполняется условие трансверсальности

$$(\vec{k} \vec{E}(k, x)) = (\vec{k} \vec{H}(k, x)) = 0. \quad (117)$$

Таким образом также:

$$(\vec{k} \vec{F}) = 0, \quad (\vec{k} \vec{F}^*) = 0. \quad (118)$$

Между $\vec{F}(k)$, $\vec{F}(-k)$ и их комплексно сопряжёнными значениями не существует больше никаких соотношений.

Разложение $\vec{E}(k, x)$ производится так, что зависимость F от времени даётся для всех значений k множителем $e^{-i\gamma t}$, зависимость же от времени F^* даётся множителем $e^{+i\gamma t}$:

$$\vec{F}(k, t) = \vec{F}(k, 0) e^{-i\gamma t}, \quad \vec{F}^*(k, t) = \vec{F}^*(k, 0) e^{+i\gamma t}, \quad (119)$$

где γ — всегда положительное число:

$$\gamma = c |\vec{k}|. \quad (120)$$

Следовательно, \vec{F} и \vec{F}^* удовлетворяют дифференциальным уравнениям:

$$\frac{d\vec{F}}{dt} = -ic |\vec{k}| \vec{F}, \quad \frac{d\vec{F}^*}{dt} = +ic |\vec{k}| \vec{F}^*. \quad (119')$$

Заменяя \vec{k} на $-\vec{k}$ в (115), (116), получим напряжённости поля волны, распространяющейся в противоположном направлении.

Кроме разложения напряжённости $\vec{E}(k, x)$ на две части с временными множителями $e^{-i\gamma t}$ или $e^{+i\gamma t}$ для каждого k бывает часто целесообразно разлагать общую напряжённость поля в пространственный ряд Фурье:

$$\left. \begin{aligned} \vec{E}(k, x) + \vec{E}(-k, x) &= \vec{E}(k) e^{i(\vec{k}x)} + \vec{E}(-k) e^{-i(\vec{k}x)}, \\ \vec{E}(-k) &= \vec{E}^*(k), \end{aligned} \right\} \quad (120a)$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{H}(k, x) + \vec{H}(-k, x) &= \vec{H}(k) e^{i(\vec{k}x)} + \vec{H}(-k) e^{-i(\vec{k}x)}, \\ \vec{H}(-k) &= \vec{H}^*(k). \end{aligned} \right\} \quad (120b)$$

Тогда, как видно из сравнения с (115) и (116):

$$\left. \begin{aligned} \vec{E}(k) &= \vec{F}(k) + \vec{F}^*(-k), \\ \vec{H}(k) &= \left[\frac{\vec{k}}{|k|}, \vec{F}(k) - \vec{F}^*(-k) \right], \end{aligned} \right\} \quad (121)$$

откуда обратно следует:

$$\left. \begin{aligned} \vec{F}(k) &= \frac{1}{2} \left\{ \vec{E}(k) - \left[\frac{\vec{k}}{|k|} \cdot \vec{H}(k) \right] \right\}, \\ \vec{F}^*(-k) &= \frac{1}{2} \left\{ \vec{E}(k) + \left[\frac{\vec{k}}{|k|} \cdot \vec{H}(k) \right] \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (122)$$

Соотношения (118), (119), (121) представляют собой полное выражение уравнений Максвелла. Если известны в определённый момент времени значения $\vec{E}(k, x)$ и $\vec{E}(-k, x)$ отдельно, то этим уже определено $\vec{H}(k, x)$; напротив, задание $\vec{E}(k)$ и $\vec{E}(-k)$ в момент времени не определяет ещё значения $\vec{H}(k)$.

Энергия $E(k)$ волны, распространяющейся в направлении k , равна [учитывая, что $\vec{H}^2(k, x) = \vec{E}^2(k, x)$]:

$$\begin{aligned} E(k) &= \frac{1}{2} \int [\vec{E}^2(k, x) + \vec{H}^2(k, x)] dV = \\ &= 2(\vec{F}(k) \vec{F}^*(k)) V. \end{aligned} \quad (123)$$

Импульс

$$\begin{aligned} \vec{P}(k) &= \frac{1}{2} \int [\vec{E}(k, x), \vec{H}(k, x)] dV = \\ &= \frac{\vec{k}}{c|k|} \int \vec{E}^2(k, x) dV = \frac{\vec{k}}{c|k|} 2\vec{F}(k) \vec{F}^*(k) V. \end{aligned} \quad (124)$$

Можно далее разложить $\vec{F}(k) \vec{F}^*(k)$ и тем самым также \vec{E} и \vec{H} на два поляризованных собственных колебания.

Положим:

$$\left. \begin{aligned} \vec{F}(k) &= \sum_{\lambda=1,2} \vec{e}(\lambda, \vec{k}) A(\lambda, \vec{k}) = \\ &= \sum_{\lambda=1,2} \vec{e}(\lambda, \vec{k}) B(\lambda, \vec{k}) e^{-i\omega t}, \\ \vec{F}^*(k) &= \sum_{\lambda=1,2} \vec{e}^*(\lambda, \vec{k}) A^*(\lambda, \vec{k}) = \\ &= \sum_{\lambda=1,2} \vec{e}^*(\lambda, \vec{k}) B^*(\lambda, \vec{k}) e^{i\omega t}. \end{aligned} \right\} \quad (125)$$

Здесь, во-первых, согласно (119), для обоих значений λ $(\vec{e}(\lambda, k) \vec{k}) = 0$, таким образом также $(\vec{e}^* \cdot \vec{k}) = 0$, и во-вторых:

$$\left. \begin{aligned} (\vec{e}(1, k) \vec{e}^*(2, k)) &= (\vec{e}^*(1, k) \vec{e}(2, k)) = 0, \\ (\vec{e}(1, k) \vec{e}^*(1, k)) &= (\vec{e}(2, k) \vec{e}^*(2, k)) = 1. \end{aligned} \right\} \quad (126)$$

Это означает, что $\vec{e}(1, k)$, $\vec{e}(2, k)$ в общем случае комплексные единичные векторы, ортогональные друг по отношению к другу и относительно \vec{k} .

Отсюда следует согласно (123), что энергия $E(k)$ аддитивно разлагается на:

$$E(k) = 2[A(1, k)A^*(1, k) + A(2, k)A^*(2, k)]V. \quad (126')$$

Если, в частности, три компоненты \vec{e} — действительные числа [отвлекаясь от (возможного) общего фазового множителя], то мы имеем дело с линейно поляризованными собственными колебаниями.

Вместо того, чтобы рассматривать сумму напряжённостей поля, соответствующих различным собственным значениям \vec{k} , переменной \vec{k} , часто бывает также целесообразно перейти к пределу $V \rightarrow \infty$, причём тогда условие периодичности отпадает, и мы имеем дело с непрерывно меняющимися \vec{k} , стало быть, с *интегралом Фурье*. В таком случае мы получим¹⁾:

$$\begin{aligned} \vec{E}(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \vec{E}(k) e^{i(\vec{k}x)} dk^{(3)}, \\ \vec{E}(k) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \vec{E}(x) e^{-i(\vec{k}x)} dx^{(3)}. \end{aligned} \quad (127)$$

То же самое имеет место для $\vec{H}(x)$ и $\vec{F}(x)$, причём связь $\vec{E}(k)$, $\vec{H}(k)$, $\vec{F}(k)$ попрежнему задаётся (115), (116). Общая энергия и общий импульс волнового пакета даются выражениями:

$$E = \frac{1}{2} \int (\vec{E}^2 + \vec{H}^2) dx^{(3)} = 2 \int \vec{F}^*(k) \vec{F}(k) dk^{(3)}, \quad (128)$$

$$\vec{P} = \int \frac{1}{c} [\vec{E}, \vec{H}] dx^{(3)} = \frac{2}{3} \int \frac{\vec{k}}{|k|} \vec{F}^*(k) \vec{F}(k) dk^{(3)}. \quad (129)$$

¹⁾ Мы пишем $dk^{(3)}$ для краткости вместо $dk_1 dk_2 dk_3$ и также $dx^{(3)}$ вместо $dx_1 dx_2 dx_3$.

Для момента импульса D с компонентами $D_{ij} = -D_{ji}$ получаем посредством интегрирования по частям, принимая во внимание условие трансверсальности (119)¹⁾,

$$\left. \begin{aligned} D_{ij} &= \frac{1}{c} \int [\vec{x} [\vec{E} \vec{H}]]_{ij} dx^{(3)} = \\ &= \frac{2i}{c} \int \frac{1}{|k|} \sum_{\alpha=1}^3 \left(F_{\alpha}^* \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial k_i} k_j - F_{\alpha}^* \frac{\partial F_{\alpha}}{\partial k_j} k_i \right) dk^{(3)} + \\ &\quad + \frac{2i}{c} \int \frac{1}{|k|} (F_j^* F_i - F_i^* F_j) dk^{(3)}. \end{aligned} \right\} \quad (130)$$

Мы увидим ниже, что это разделение момента импульса на две части в известном отношении аналогично разделению момента импульса электрона на орбитальный и спиновый моменты [см. (84)].

б) *Квантование*. Мы подходим теперь к вопросу, как производить квантование поля излучения. При этом исходят из аналогии между (поляризованным) собственным колебанием и гармоническим осциллятором. Из исследования теплового равновесия известно, что энергия такого собственного колебания с вектором распространения \vec{k}_r и индексом поляризации λ обладает дискретными собственными значениями:

$$E = N(\vec{k}, \lambda) \hbar \nu_r = N(\vec{k}, \lambda) \hbar c |k_r|. \quad (131)$$

При этом здесь нашло уже своё выражение то обстоятельство, что различным собственным колебаниям должны быть приведены в соответствие независимые квантовые числа. Следует также отметить, что в противоположность материальному осциллятору здесь более последовательно не вводить на каждую степень свободы нулевую энергию $\hbar \nu_r/2$. Дело в том, что, с одной стороны, она привела бы, вследствие бесконечного числа степеней свободы, к бесконечно большой энергии на единицу объёма; с другой стороны, эта энергия была бы принципиально ненаблюдаема, так как она не может быть ни излучена, ни поглощена или рассеяна, ни заклю-

¹⁾ См. C. G. Darwin, *Proc. Roy. Soc. London* (A), 136. 36, 1932.

чена внутри определённого объёма, и не создаёт, как это видно из опыта, гравитационного поля.

Подобно тому как прежде к собственным колебаниям вакуумного излучения (Hohlraumstrahlung) применялся метод квантования фазовых интегралов, теперь должен быть применён волномеханический метод. Этот метод имеет то преимущество, что он применим также и к бегущим волнам. Очевидно, в согласии с (123)—(136), следует выразить, что энергия

$$E_{\lambda} = 2VA_{\lambda}^* A_{\lambda} \quad (126')$$

поляризованной ($\lambda = 1, 2$) бегущей волны обладает собственными значениями $N\hbar\nu$. Положим

$$\begin{aligned} A_{\lambda} &= \sqrt{\frac{\hbar\nu}{2V}} \cdot a_{\lambda} = \sqrt{\frac{\hbar c |k|}{2V}} \cdot a_{\lambda}, \\ A_{\lambda}^* &= \sqrt{\frac{\hbar\nu}{2V}} \cdot a_{\lambda}^* = \sqrt{\frac{\hbar c |k|}{2V}} a_{\lambda}^*. \end{aligned} \quad (132)$$

Таким образом,

$$a_{\lambda}^*(\lambda, \vec{k}) a(\lambda, \vec{k}) = N_{\lambda}(\lambda, \vec{k})$$

должны обладать собственными значениями 0, 1, 2, ... Это имеет место, если эрмитовски сопряжённые величины a^* и a удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned} a(\lambda, \vec{k}_r) a^*(\lambda', \vec{k}_s) - a^*(\lambda', \vec{k}_s) a(\lambda, \vec{k}_r) = \\ = \begin{cases} 0, & \text{если } \lambda \neq \lambda' \text{ или } r \neq s, \\ 1, & \text{если } \lambda = \lambda', r = s, \end{cases} \end{aligned} \quad (133)$$

тогда как

$$\left. \begin{aligned} a(\lambda, \vec{k}_r) a(\lambda', \vec{k}_s) - a(\lambda', \vec{k}_s) a(\lambda, \vec{k}_r) &= 0 \\ a^*(\lambda, \vec{k}_r) a^*(\lambda', \vec{k}_s) - a^*(\lambda', \vec{k}_s) a^*(\lambda, \vec{k}_r) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (134)$$

[см. часть I, (340a) и (340a')]. Мы избегаем нулевой энергии осциллятора, устанавливая в (126') такую последовательность множителей, чтобы A^* предшествовало A .

Симметричное выражение

$$2V \cdot \frac{1}{2} (A_{\lambda}^* A_{\lambda} + A_{\lambda} A_{\lambda}^*) = \frac{\hbar\nu}{2} \cdot (a_{\lambda}^* a_{\lambda} - a_{\lambda} a_{\lambda}^*)$$

имеет собственные значения материальных гармонических осцилляторов, $(N + \frac{1}{2}) \hbar \nu$. Действительно, эрмитовы величины

$$p = \sqrt{\frac{\hbar \nu}{2}} (a + a^*), \quad q = i \sqrt{\frac{\hbar}{2\nu}} (a - a^*),$$

или

$$p = \sqrt{V} (A + A^*), \quad q = \frac{i}{\nu} \sqrt{V} (A - A^*),$$

удовлетворяющие перестановочным соотношениям:

$$pq - qp = -i\hbar,$$

аналогичны импульсу и энергии осциллятора. Также выражение для энергии, увеличенное на нулевую энергию,

$$E + \frac{\hbar \nu}{2} = V (A^* A + A A^*) = \frac{1}{2} (p^2 + \nu^2 q^2),$$

имеет такую же форму, как и энергия гармонического осциллятора с массой, равной 1 и частотой ν . В дальнейшем, однако, удобнее оперировать прямо с величинами a и a^* или A и A^* вместо p и q . Уравнения

$$\dot{a}(\lambda, \vec{k}_r) = -ic |k| a(\lambda, \vec{k}_r); \quad \dot{a}^*(\lambda, \vec{k}_r) = +ic |k| a^*(\lambda, \vec{k}_r)$$

могут быть с помощью оператора Гамильтона

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k_r} \sum_{\lambda} 2V A^*(\lambda, \vec{k}_r) A(\lambda, \vec{k}_r) = \\ &= \sum_{k_r} \sum_{\lambda} \hbar c |k_r| a^*(\lambda, \vec{k}_r) a(\lambda, \vec{k}_r) \end{aligned} \quad (135)$$

написаны в обычной форме:

$$\begin{aligned} \dot{a}(\lambda, \vec{k}_r) &= \frac{i}{\hbar} [H, a(\lambda, \vec{k}_r)], \\ \dot{a}^*(\lambda, \vec{k}_r) &= \frac{i}{\hbar} [H, a^*(\lambda, \vec{k}_r)]. \end{aligned} \quad (136)$$

Величины a и a^* , рассматриваемые как операторы, действуют следующим образом на волновую функцию $\varphi(N(\lambda, k_r))$ — или просто $\varphi(N)$, если мы имеем дело с одним только собственным колебанием:

$$a^* \varphi(N) = \sqrt{N} \varphi(N-1); \quad a \varphi(N) = \sqrt{N+1} \varphi(N+1) \quad (137)$$

или в матричной форме

$$a(N, N-1) = \sqrt{N}, \quad a^*(N-1, N) = \sqrt{N}. \quad (138)$$

Остальные матричные элементы обращаются в нуль.

Введя вспомогательные операторы $\vec{\Lambda}^*$ и $\vec{\Lambda}$:

$$a^* = \sqrt{N} \vec{\Lambda}^*, \quad a = \vec{\Lambda} \sqrt{N}, \quad (139)$$

удовлетворяющие условию $\vec{\Lambda}^* \vec{\Lambda} = 1$, получим

$$\vec{\Lambda} \varphi(N) = \varphi(N+1), \quad \vec{\Lambda}^* \varphi(N) = \varphi(N-1) \quad (140)$$

[см. часть I, (342)–(345)].

Произведённое квантование поля излучения уже передаёт все корпускулярные свойства света. Например, собственное значение импульса бегущей волны, согласно (124) и (131), равно

$$\vec{P}(k) = N \hbar \vec{k}, \quad (131')$$

а его модуль, таким образом, равен $\hbar \nu/c$. Таким образом, если приписать световому кванту или фотону импульс $\hbar \vec{k}$ и энергию $\hbar \nu$, то квантовые числа $N(\lambda, k)$ могут быть истолкованы как числа фотонов с заданным импульсом и данной поляризацией. Флуктуации энергии и импульса излучения в некоторой части объёма также могут быть правильно описаны с помощью формального аппарата квантованных волн, как уже упоминалось в части I, § 15. К этим фотонам, правда, неприменимо классическое понятие механической траектории, но квантованные волны по содержанию полностью эквивалентны частицам, описываемым методами волновой механики в конфигурационном пространстве и пространстве импульсов (часть I, § 15 и следующие).

Рассмотрим предварительно некоторые формальные свойства квантованных волн. Сначала вкратце выведем, как изменятся функции от числа световых квантов, если перейти от одного вида поляризации к другому. Это соответствует следующему пересчёту амплитуд A в (125):

$$A'(\lambda) = \sum_{\lambda'=1,2} c(\lambda, \lambda') A(\lambda'),$$

где c унитарно:

$$\sum c(\lambda, \lambda') c^*(\lambda'', \lambda') = \delta_{\lambda\lambda''};$$

таким образом,

$$c(2, 1) = -c^*(1, 2), \quad c(2, 2) = c^*(1, 1).$$

Этому соответствует переход от единичных векторов $\vec{e}(1), \vec{e}(2)$ к новым единичным векторам $\vec{e}'(1), \vec{e}'(2)$

$$\vec{e}'(\lambda) = \sum_{\lambda'} c^*(\lambda', \lambda) \vec{e}(\lambda'),$$

которые снова ортогональны друг к другу [уравнение (126)].

Пусть N'_1, N'_2 — числа световых квантов, соответствующие векторам, $\vec{e}'(1), \vec{e}'(2)$ и $\varphi'(N'_1, N'_2)$ — соответствующая собственная функция, тогда, согласно общей теории преобразований [см. часть I, ур. (151)], переход от старых чисел световых квантов N_1, N_2 и соответствующих собственных функций к новым определяется соотношением:

$$\varphi'(N'_1, N'_2) = \sum_{N_1, N_2} \varphi(N_1, N_2) S(N_1, N_2; N'_1, N'_2),$$

причём, согласно части I, уравнения (157) и (164), для всех N_1, N_2, N'_1, N'_2 и $\lambda = 1, 2$ должно иметь место:

$$\begin{aligned} \sum_{\bar{N}'_1 \bar{N}'_2} S(N_1, N_2; \bar{N}'_1, \bar{N}'_2) A'(\lambda) (\bar{N}'_1, \bar{N}'_2; N'_1, N'_2) = \\ = \sum_{\lambda'=1,2} c(\lambda, \lambda') \sum_{\bar{N}_1 \bar{N}_2} A(\lambda') (N_1, N_2; \bar{N}_1, \bar{N}_2) \times \\ \times S(\bar{N}_1, \bar{N}_2; N'_1, N'_2). \end{aligned}$$

Если подставить значения (137) для матричных элементов [постоянный множитель, на который отличаются $A(\lambda)$ и $a(\lambda)$, выпадает], то мы получим рекуррентные

формулы:

$$\left. \begin{aligned} S(N_1, N_2; N'_1, N'_2) \sqrt{N'_1} = \\ = c(1, 1) \sqrt{N_1} S(N_1 - 1, N_2; N'_1 - 1, N'_2) + \\ + c(1, 2) \sqrt{N_2} S(N_1, N_2 - 1; N'_1 - 1, N'_2), \\ S(N_1, N_2; N'_1, N'_2) \sqrt{N'_2} = \\ = c(2, 1) \sqrt{N_1} S(N_1 - 1, N_2; N'_1, N'_2 - 1) + \\ + c(2, 2) \sqrt{N_2} S(N_1, N_2 - 1; N'_1, N'_2 - 1). \end{aligned} \right\} \quad (141)$$

Легко видеть, что $S(N_1, N_2; N'_1, N'_2)$ лишь тогда отлично от нуля, когда $N_1 + N_2 = N'_1 + N'_2 = N$. Так как S должно быть унитарно, то, очевидно, имеем $S(0, 0, 0, 0) = 1$. Для одного светового кванта сразу получаем из (141):

$$\begin{aligned} S(1, 0; 1, 0) &= c(1, 1), & S(0, 1; 1, 0) &= c(1, 2), \\ S(1, 0; 0, 1) &= c(2, 1), & S(0, 1; 0, 1) &= c(2, 2). \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\left. \begin{aligned} \varphi'(1, 0) &= \varphi(1, 0) c(1, 1) + \varphi(0, 1) c(1, 2), \\ \varphi'(0, 1) &= \varphi(1, 0) c(2, 1) + \varphi(0, 1) c(2, 2). \end{aligned} \right\} \quad (142)$$

Это означает, что φ преобразуются, как $A(\lambda)$. В общем случае N световых квантов переход от $(N+1)$ величин $\varphi(N_1, N-N_1)$ ($N_1 = 0, \dots, N$) к $(N+1)$ величинам $\varphi'(N'_1, N-N'_1)$ ($N'_1 = 0, 1, \dots, N$) аналогичен переходу от $(N+1)$ выражений $\sqrt{\binom{N}{N_1}} A_{(1)}^{N_1} A_{(2)}^{N-N_1}$ к штрихованным выражениям $\sqrt{\binom{N}{N'_1}} A'_{(1)}^{N'_1} A'^{(N-N'_1)}_{(2)}$. Эти оба преобразования определяют неприводимое унитарное представление степени $N+1$ группы линейных унитарных преобразований двух комплексных переменных (см. часть I, § 13).

Мы перейдём далее к тому, чтобы установить перестановочные соотношения для компонент векторов $\vec{E}(k)$, $\vec{H}(k)$ и $\vec{F}(k)$, сначала для определённого собственного значения \vec{k} . Прежде всего из (132), (133), (134) для $\vec{F}(k)$ следует, согласно (125), (126) и вытекающим

из (124) и условий трансверсальности соотношениям:

$$\sum_{\lambda=1,2} e_i(\lambda) e_j^*(\lambda) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{|k|^2}, \quad (126a)$$

что

$$\begin{aligned} [F_i(k), F_j(k')] &= 0, \quad [F_i^*(k), F_j^*(k')] = 0, \\ [F_i(k), F_j^*(k)] &= [F_j(k), F_i^*(k)] = \frac{\hbar c |k|}{2V} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{|k|^2} \right). \end{aligned} \quad (143)$$

Перейдём теперь к непрерывному спектру. В этом случае для оператора Гамильтона

$$H = \int \hbar c |k| \sum_{\lambda=1,2} a^*(\lambda, k) a(\lambda, k) dk^{(3)}. \quad (135')$$

Для того чтобы сохранились соотношения (136), следует вместо (133) положить:

$$a(\lambda, k) a^*(\lambda', k') - a^*(\lambda', k') a(\lambda, k) = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(k - k'),$$

где второй δ -множитель представляет собой введённую уже в ч. I (145) несобственную функцию, которая определяется следующим образом:

$$\int_V \delta(k) dk^{(3)} = \begin{cases} 0, & \text{если } V \text{ не содержит точку } k=0, \\ 1, & \text{если } V \text{ содержит точку } k=0. \end{cases}$$

Соотношения (133) остаются справедливыми так же, как и первая строка соотношений (143), а вместо второй строки (143) имеем:

$$\begin{aligned} [F_i(k), F_j^*(k')] &= [F_j(k'), F_i^*(k)] = \\ &= \frac{\hbar c |k|}{2} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{|k|^2} \right) \delta(k - k'). \end{aligned} \quad (143')$$

Обозначаемые прежде через $N(\lambda, k)$ квантовые числа переходят, правда, при предельном переходе к непрерывному спектру, в несобственные числа $N(\lambda, k) \delta(k - k')$; однако можно говорить о собственных значениях выражений

$$\int_{K_0} a^*(\lambda, k) a(\lambda, k) dk^{(3)} = N(\lambda, K_0) \quad (\lambda = 1, 2) \quad (144a)$$

и

$$\int_{K_0} 2\vec{F}^*(k) \vec{F}(k) dk^{(3)} = N(1, K_0) + N(2, K_0). \quad (144b)$$

Эти собственные значения будут целыми числами. Они дают число световых квантов в обозначенном через K_0 интервале « k »-пространства, по которому проводится интегрирование в левой части формулы; (144a) даёт число квантов с определённой поляризацией, (144b) даёт число квантов с произвольной поляризацией. Для суммы двух интервалов K_1 и K_2 , очевидно, имеем тождественно: $N(\lambda, K_1) + N(\lambda, K_2) = N(\lambda, K_1 + K_2)$. Перестановочные соотношения для компонент Фурье электрической и магнитной напряжённостей поля E_i и $H_{ik} = -H_{ki}$ (написание последних в виде антисимметричного тензора наиболее целесообразно) получаются, согласно (121), из соответствующих соотношений (143), (143') для F_i :

$$[E_i(k), E_j(k')] = 0, \quad [H_{ij}(k), H_{kl}(k')] = 0, \quad (145_1)$$

$$[E_i(k), H_{jl}(k')] = \hbar c \delta(\vec{k} + \vec{k}') (\delta_{ij} k_l - \delta_{il} k_j). \quad (145_2)$$

Заметим, что здесь аргументом δ -функции является $\vec{k} + \vec{k}'$, а не $\vec{k} - \vec{k}'$, и что, таким образом, критической точкой будет $\vec{k} = -\vec{k}'$; далее мы видим, что множитель, содержащий абсолютное значение (k) , здесь отсутствует, в противоположность перестановочным соотношениям для \vec{F} и \vec{F}^* . Левые части условий трансверсальности (117), (118) переместительны со всеми величинами, как и должно быть.

Это облегчает переход к перестановочным соотношениям для напряжённостей поля, записанных как функции координат:

$$\vec{E}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \vec{E}(k) e^{i\vec{k}x} dk^{(3)},$$

$$\vec{H}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \vec{H}(k) e^{i\vec{k}x} dk^{(3)},$$

$$\vec{F}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \vec{F}(k) e^{i\vec{k}x} dk^{(3)},$$

$$\vec{F}^*(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \vec{F}^*(k) e^{-i\vec{k}x} dk^{(3)}.$$

Мы можем формально положить:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}^{(3)} = \delta(\vec{x})$$

(что имеет место в обычном смысле, лишь, если проинтегрировать выражение, стоящее слева по конечному объёму x -пространства), следовательно:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int k_i e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}^{(3)} = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \delta(\vec{x}).$$

С помощью этих соотношений получаем перестановочные соотношения для напряжённостей поля¹⁾:

$$[E_i(x), E_j(x')] = 0, \quad [H_{ij}(x), H_{kl}(x')] = 0, \quad (146_1)$$

$$[E_i(x), H_{jl}(x')] = \frac{\hbar c}{i} \left(\delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} - \delta_{il} \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \delta(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (146_2)$$

Чтобы формулировать соответствующие перестановочные соотношения для компонент \vec{F} и \vec{F}^* , следует сначала определить оператор $\sqrt{-\Delta}$ и обратный ему $\frac{1}{\sqrt{-\Delta}}$. Это — линейные операторы, которые действуют на функцию следующим образом:

$$\sqrt{-\Delta} e^{i\vec{k}\vec{x}} = |k| e^{i\vec{k}\vec{x}}, \quad (147_1)$$

$$\frac{1}{\sqrt{-\Delta}} e^{i\vec{k}\vec{x}} = \frac{1}{|k|} e^{i\vec{k}\vec{x}}. \quad (147_2)$$

Легко видеть, что оба оператора эрмитовы. Двукратное применение оператора $\sqrt{-\Delta}$ даёт оператор Лапласа с отрицательным знаком, откуда становится понятным принятое обозначение. Тем самым уже неявно определено, как действуют $\sqrt{-\Delta}$ и $\frac{1}{\sqrt{-\Delta}}$ на произвольную функцию $f(\vec{x})$. Введём функции:

$$D_{1/2}(\vec{x}) = \sqrt{-\Delta} \delta(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int |k| e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}^{(3)}, \quad (148_1)$$

$$D_{-1/2}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{-\Delta}} \delta(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{|k|} e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}^{(3)} = \frac{1}{(2\pi)^2 r^2}, \quad (148_2)$$

¹⁾ Эти соотношения впервые опубликованы в несколько другой четырёхмерной форме в работе Р. Jordan и W. Pauli, *Zs. f. Phys.*, **47**, 151, 1927 и в изложенной здесь форме в работе W. Heisenberg и W. Pauli, *ibid.*, **56**, 1, 1927, II гл., § 4, 5.

из которых первая является несобственной функцией; существует лишь интеграл этой функции по конечному объёму в x -пространстве. Тогда¹⁾

$$\sqrt{-\Delta} f(x) = \int f(\vec{x}') D_{1/2}(\vec{x} - \vec{x}') dx'^{(3)}, \quad (149_1)$$

$$\frac{1}{\sqrt{-\Delta}} f(x) = \int f(\vec{x}') D_{-1/2}(\vec{x} - \vec{x}') dx'^{(3)} \quad (149_2)$$

и, согласно (143), (143')²⁾, имеем:

$$[F_i(x), F_j(x')] = 0, [F_i^*(x), F_j^*(x')] = 0, \quad (150_1)$$

$$\left. \begin{aligned} [F_i(x), F_j^*(x')] &= [F_j(x), F_i^*(x')] = \\ &= \frac{1}{2} \hbar c \left(\sqrt{-\Delta} \delta_{ij} + \frac{1}{\sqrt{-\Delta}} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right) \delta(x - x') = \\ &= \frac{1}{2} \hbar c \left\{ \delta_{ij} D_{1/2} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{-1/2}(x - x') \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (150_2)$$

Оператор Гамильтона, согласно (128), будет:

$$H = 2 \int \vec{F}^*(x) \vec{F}(x) dx^{(3)}, \quad (151)$$

импульс, согласно (129):

$$P_i = \frac{2}{c} \int \vec{F}^*(x) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{\sqrt{-\Delta}} \vec{F}(x) dx. \quad (152)$$

Условия трансверсальности суть просто:

$$\operatorname{div} \vec{F} = \operatorname{div} \vec{F}^* = 0; \quad (153)$$

они коммутируют с оператором Гамильтона. Далее имеем:

$$\begin{aligned} \vec{F}^* &= \frac{i}{\hbar} [H, \vec{F}] = -ic \sqrt{-\Delta} \vec{F}, \\ \vec{F} &= \frac{i}{\hbar} [H, \vec{F}^*] = ic \sqrt{-\Delta} \vec{F}^*. \end{aligned} \quad (154)$$

¹⁾ См. L. Landau и R. Peierls, *Zs. f. Phys.*, **62**, 188, 1930.

²⁾ Введение величин F и F^* с целью избежать нулевой энергии встречается у L. Rosenfeld и J. Solomon, *Journ. de phys.* (7), **2**, 139, 1931, а также J. Solomon, *Thèse de doctorat*, Paris, 1931. Данные там соотношения коммутативности между F и F^* однако неверны, так как они несовместны с условиями: $\operatorname{div} \vec{F} = 0$ и $\operatorname{div} \vec{F}^* = 0$.

Наличие операторов $\sqrt{-\Delta}$ и $\frac{1}{\sqrt{-\Delta}}$ в перестановочных соотношениях мало удовлетворительно, так как эти операторы не носят характера бесконечно малых операций, т. е. их значение в данной точке зависит от всего пространственного поведения функции, а не только от поведения функции вблизи рассматриваемой точки. Это приводит далее к тому, что преобразование по формулам Лоренца величин $\vec{F}(x)$ и $\vec{F}^*(x)$, связанных с \vec{E} и \vec{H} , согласно (121), (122), соотношениями:

$$\begin{aligned}\vec{E}(x) &= \vec{F}(x) + \vec{F}^*(x), \\ \vec{H}(x) &= \frac{1}{\sqrt{-\Delta}} \frac{1}{i} \operatorname{rot} (\vec{F}(x) - \vec{F}^*(x)),\end{aligned}\quad (121')$$

$$\begin{aligned}\vec{F}(x) &= \frac{1}{2} \left(\vec{E}(x) + \frac{i}{\sqrt{-\Delta}} \operatorname{rot} \vec{H} \right); \\ \vec{F}^*(x) &= \frac{1}{2} \left(\vec{E}(x) - \frac{i}{\sqrt{-\Delta}} \operatorname{rot} \vec{H} \right),\end{aligned}\quad (122')$$

носит совершенно не наглядный характер.

Введение образованных несколько искусственно величин F и F^* служит только для того, чтобы избежать нулевой энергии. Вследствие того что

$$\frac{1}{2} \int (\vec{E}^2 + \vec{H}^2) dx^{(3)} = \int (\vec{F}^* \vec{F} + \vec{F} \vec{F}^*) dx^{(3)},$$

оператор Гамильтона по (151) будет:

$$H = \frac{1}{2} \int \left\{ (\vec{E}^2 + \vec{H}^2) + i \left[\vec{E}, \frac{1}{\sqrt{-\Delta}} \operatorname{rot} \vec{H} \right] \right\} dx^{(3)}. \quad (155)$$

Второй член выражения в скобках нужен для того, чтобы компенсировать содержащуюся в первом члене бесконечно большую нулевую энергию; второй член содержит также оператор $1/\sqrt{-\Delta}$.

Причина появления здесь формальных усложнений заключается в том, что средние значения (математическое ожидание) функций напряжённостей поля в определённой точке пространства, например квадратичных функций, даже в предельном случае больших квантовых чисел в общем случае не переходят в значения классических величин, а во многих случаях становятся даже

бесконечно большими. Это происходит потому, что мы здесь имеем дело с *системой, обладающей бесконечно большим числом степеней свободы* (причём не существенно, берём ли мы счётное бесконечно большое число степеней свободы или континуальное множество степеней свободы). Например, бесконечное произведение собственных функций для компонент Фурье электрической напряжённости не сходится, даже если возбуждено лишь конечное число собственных колебаний. Применение аппарата волновой механики кажется поэтому оправданным с точки зрения принципа соответствия, только поскольку можно ограничиться конечным числом степеней свободы. Например в k -пространстве можно вовсе не рассматривать достаточно большие собственные значения k ; или в обычном пространстве, прежде чем перейти к предельному случаю больших квантовых чисел, можно произвести сначала усреднение напряжённостей по малым, но конечным объёмам (мы скоро увидим, что это всегда происходит само собой при реальных измерениях напряжённостей) или можно, используя как переменные числа фотонов $N(k)$, что является наиболее естественным, ограничиться тем случаем, когда существует лишь конечное число световых квантов. Применения теории к случаям, когда ограничение конечным числом степеней свободы недостаточно, приводят действительно к противоречию с опытом (§ 8).

с) *Границы точности для измерения напряжённостей поля*¹⁾. Остаётся ещё исследовать, как точно могут быть вообще измерены напряжённости поля. Электрическая напряжённость определяется измерением импульса пробного тела заряда e за время δt

$$e \vec{E} \delta t = \vec{P} - \vec{P}'.$$

Если P перед измерением напряжённости известно точно и по истечении времени δt снова измерено с точностью ΔP за время Δt , то

$$e \Delta \vec{E} \delta t > \Delta \vec{P}. \quad (156)$$

¹⁾ См. L. Landau u R. Peierls, *Zs. f. Phys.*, **69**, 56, 1931, особенно § 3 и 4; В. Гейзенберг, *Физические основы квантовой теории*, гл. 3, § 2.

Для измерения импульса произвольного тела мы имеем [часть I, (22), (23)] следующее соотношение:

$$\Delta P \Delta t > \frac{h}{v-v'} > \frac{h}{c}. \quad (157)$$

Сначала кажется, что, применяя тела с большим e , можно измерить напряжённость сколько угодно точно. Однако, Ландау и Пайерлс опровергли это утверждение по следующим соображениям. Испытывая ускорение за время измерения импульса, заряженное тело излучит энергию ¹⁾:

$$\Delta E > \frac{e^2 (v' - v)^2}{c^3 \Delta t}.$$

Это даёт добавочную неопределённость импульса:

$$\Delta P > \frac{\Delta E}{v' - v}$$

и, следовательно,

$$\Delta P \Delta t > \frac{e^2}{c^3} (v' - v). \quad (158)$$

В этом месте в аргументации Ландау и Пайерлса имеется, однако, существенный пробел, так как излученный импульс и излученная энергия могут быть точно измерены. Изменение энергии и импульса заряженного тела, возникающее вследствие излучения, не может поэтому без дополнительных рассуждений рассматриваться как *неопределённое*. Вследствие этого дальнейшие следствия являются ненадёжными, и вопрос о точности измерения поля следует *пока считать невыясненным*.

Из (157) и (158) следует посредством перемножения:

$$\Delta P \Delta t > \frac{h}{c} \sqrt{\frac{e^2}{hc}};$$

таким образом,

$$|\vec{\Delta E}| > \frac{\sqrt{hc}}{(c \Delta t)^{3/2}}. \quad (159)$$

¹⁾ $\int_t^{t+\Delta t} v^2 \Delta t \geq \frac{(v' - v)^2}{\Delta t}$, если заданы Δt и начальная и конечная скорости.

Такое же неравенство соблюдается и для магнитной напряжённости:

$$|\Delta \vec{H}| > \frac{\sqrt{\hbar c}}{(c \Delta t)^3}. \quad (159')$$

Наиболее благоприятный случай будет достигнут, если

$$\frac{e^2}{c^3} (v' - v) \sim h.$$

Так как средняя частота излучённого света равна $1/\Delta t$, то это означает, что среднее число излучённых световых квант будет по крайней мере порядка 1. Измерение напряжённости связано с конечным и неопределённым изменением числа световых квантов. «Нулевая» энергия тех волн, частота которых ν меньше, чем $1/\Delta t$, как раз соответствует квадрату напряжённости поля:

$$\vec{E}^2 \sim \frac{\nu^2}{c^3} \frac{\hbar \nu}{2} \sim \frac{\hbar c}{(c \Delta t)^4}.$$

Эта величина совпадает с правой частью (159). Таким образом, она не может быть измерена, если выполняется (159).

Дальнейшие выкладки показывают, что при одновременном измерении \vec{E} и \vec{H} в пространственной области Δl имеем:

$$|\Delta \vec{E}| |\Delta \vec{H}| > \frac{\hbar c}{(c \Delta t)^3} \frac{1}{(\Delta l)^3}. \quad (160)$$

Это соотношение лишь при $\Delta l < c \Delta t$ является более жёсткой оценкой, чем граница точности $\hbar c / (c \Delta t)^4$, которая получается перемножением величин (159) и (159'). Для волновых полей, т. е. на расстояниях от тел, создающих поля, больших, по сравнению с длиной волны, оценка (160) не даёт ничего нового. Из неё следует:

$$\Delta \vec{E} |\Delta \vec{H}| (\Delta l)^3 > \frac{\hbar c}{\Delta l} \quad \text{для} \quad \Delta t < \frac{\Delta l}{c}, \quad (160')$$

что можно считать непосредственным выражением перестановочных соотношений (146). Статические поля, очевидно, можно измерять с произвольной точностью¹⁾.

¹⁾ Соотношения неточности (159), (160) рассматривались независимо от вопроса, какую часть пространства может занимать определённый заряд e . Для электрона следует уже из (156) (157),

То обстоятельство, что в классическом предельном случае напряжённости E и H (относительно своего поведения в пространстве и времени), а также и их фазы являются измеримыми величинами, приводит к следствию, что световые кванты должны иметь симметричные состояния (принадлежат статистике Бозе-Эйнштейна).

Иначе обстоит дело в случае материальных частиц. Здесь ψ -функции являются величинами, не поддающимися измерению, и случаи симметричного и антисимметричного состояний нескольких одинаковых частиц будут равноценны с точки зрения принципа соответствия. Совокупность материальных частиц, имеющих симметричные состояния, как, например, ядра гелия, не аналогична совокупности световых квантов, пока не происходят процессы, при которых изменяется число частиц. Дело в том, что если последнее не имеет места, то для функции ψ , [имеется в виду функция ψ , $q = \text{число (оператор)}$], в обычном трёхмерном пространстве (см. часть I, § 14), а не функция ψ в координатном пространстве] нет аналогии с силой Лоренца, её фаза не входит ни в оператор Гамильтона, ни в другие физические измеримые величины, функция ψ неизмерима.

d) *Переход к конфигурационному пространству для световых квантов*¹⁾. Так же, как и в случае нескольких одинаковых материальных частиц (часть I, § 14) и в случае световых квантов возможен переход от конфигурационного пространства к пространству числа частиц в элементе объёма координатного простран-

без рассмотрения излучения:

$$\Delta E > \frac{h}{ec(\Delta t)^2} = \frac{\sqrt{\hbar c}}{e^2} \frac{\sqrt{\hbar c}}{(c \Delta t)^2},$$

что (так как $\frac{\hbar c}{e^2} \sim 137$) является высшей границей, чем (159).

Вопрос о точности измерения поля посредством электрона рассматривается ещё в работе П. Иордана и В. А. Фока (Zs. f. Phys., 66, 206, 1930). Они нашли несколько отличное соотношение:

$$|\Delta E| > \frac{\sqrt{\hbar c}}{e} \frac{\sqrt{\hbar c}}{c \Delta t \Delta l}.$$

¹⁾ L. Landau u R. Peierls, Zs. f. Phys., 62, 188, 1930; см. также J. R. Oppenheimer, Phys. Rev., 38, 725, 1931.

ства импульсов обратно. Для случая, когда имеется одна частица, этот переход тривиален. Пусть k_1, k_2, \dots — сначала дискретные значения k ; тогда в пространстве $N(\lambda, k_r)$ ($\lambda = 1, 2$), $\varphi \{N(\lambda, k)\}$ отлично от нуля, лишь если $N(\lambda, k_r)$ для определённой точки k_s, λ_s равно 1 или 0. Это значит, что собственные значения $N(\lambda, k_r)$ равны

$$\delta_{\lambda s} \delta(k_r - k_s).$$

Подставим это собственное значение для определённых λ_s и k_s как аргумент в $\varphi \{N(\lambda, k)\}$ и образуем, согласно (125):

$$\vec{f}(k_s) = \vec{e}(\lambda_s, k_s) \varphi \{ \delta_{\lambda s} \delta(k_r - k_s) \}.$$

Тогда вектор \vec{f} , перпендикулярный k_j , может рассматриваться как волновая функция светового кванта в пространстве импульсов. Аналогично этому обстоит дело и при наличии нескольких световых квантов. При N световых квантов собственные значения $N(\lambda, k_r)$ будут равны:

$$\sum_s \delta_{\lambda s} \delta(k_r - k_s),$$

причём суммировать следует по N -точкам s . Из них некоторые могут встречаться многократно. Пусть p_1 — число однократных, p_2 — число двукратных, p_N — число N -кратных точек, так что:

$$p_1 + 2p_2 + \dots + Np_N = N.$$

Тогда следует образовать ещё комбинаторный множитель

$$C = \frac{N!}{(1!)^{p_1} (2!)^{p_2} \dots (N!)^{p_N}}$$

и положить:

$$\begin{aligned} \vec{f}_N(\vec{k}^{(1)}, \dots, \vec{k}^{(N)}) &= \vec{e}^{(1)}(\lambda^{(1)}, \vec{k}^{(1)}) \dots \\ &\dots \vec{e}^{(N)}(\lambda^{(N)}, \vec{k}^{(N)}) C^{-1/2} \varphi \left\{ \sum_s \delta_{\lambda s} \delta(k_r - k_s) \right\} \end{aligned} \quad (161)$$

\vec{f}_N — вектор в $3N$ -мерном пространстве и имеет, следовательно, $3N$ компонент. Он перпендикулярен ко всем k_s . Комбинаторный множитель необходим для того, чтобы функции \vec{f} были нормированы, если $\varphi \{N(\lambda, k)\}$ нормированы. Остается ещё проделать небольшие преобразования, необходимые, если k трактуется как непрерывная переменная. Функции \vec{f} , согласно определению, симметричны относительно координат частиц. Это соответствует тому обстоятельству, что световые кванты подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна.

Применение оператора $F_i(k)$ к волновой функции \vec{f} очень просто получить на основании (137) и (161). Мы имеем последо-

вательность функции:

$$f_0, \vec{f}_1(\vec{k}), \vec{f}_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2), \dots, \vec{f}_N(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_N), \dots, \quad (162)$$

относящихся к случаям, когда существует $0, 1, \dots, N$ световых квантов. Тогда $F_i(k)$ переводит функцию $\vec{f}_N(k_1, \dots, k_N)$ в следующую:

$$F_i(k) f_{N; i_1, \dots, i_N}(k_1 - k_N) = f_{N+1; i_1, \dots, i_N}(k_1^{(1)}, \dots, k_1^{(N)}, k). \quad (163)$$

Результат применения F^* получается из того, что F^* есть оператор, сопряжённый оператору F ; далее результат применения операторов напряжённостей поля получаем на основании (121'). Мы увидим, что проведённый в (b) пересечёт волновой функции $\Phi\{N(\lambda, k)\}$ из одного вида поляризации в другой в конфигурационном пространстве, т. е. для \vec{f}_N становится тривиальным.

Как пример, рассмотрим оператор вращательного импульса (130). Он удовлетворяет тем же перестановочным соотношениям, что и оператор момента импульса материальных частиц (см. часть I, ур. 13). Это необходимо должно иметь место, потому что перестановочные соотношения следуют единственно из группы вращений. Поэтому оператор (130) имеет те же собственные значения; каждая компонента D_{ij} имеет собственное значение mh , а квадрат $D^2 = \sum_{i < j} D_{ij}^2$ — собственные значения $j(j+1)$. Для случая, когда имеется один световой квант, оператор, определяемый выражением (130), следующим образом действует на $f_1(k)$:

$$D_{ij} f_1(k) = \frac{2i}{c|k|} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial k_i} k_j - k_i \frac{\partial}{\partial x_j} \right) f_l + (\delta_{jl} f_i - \delta_{il} f_j) \right\}.$$

Для одного светового кванта из условия трансверсальности

$$\sum_i f_i k_i = 0$$

следует, что собственное значение $f=0$ неосуществимо. Действительно, для этого должно выполняться соотношение

$$\left(\frac{\partial}{\partial k_i} k_j - \frac{\partial}{\partial k_j} k_i \right) f_l + (\delta_{jl} f_i - \delta_{il} f_j) = 0$$

для всех i, j, l . Положим $l=j$ и просуммируем по j . Тогда имеем:

$$\sum_i \left[\frac{\partial}{\partial k_i} (k_i f_i) - k_i \frac{\partial f_i}{\partial k_i} \right] + 2f_i = 0.$$

Это, однако, невыполнимо вследствие условия трансверсальности. Действительно, сначала имеем:

$$2f_i = k_i \sum_l \frac{\partial f_l}{\partial k_l};$$

умножая скалярно на \vec{k} , затем получаем:

$$\sum_i \frac{\partial f_i}{\partial k_i} = 0,$$

следовательно, $f_i = 0$, т. е. все компоненты \vec{f} должны обращаться в нуль, что и требовалось доказать. Обоснованное в части I, § 15, стр. 218 правило отбора, запрещающее переходы $j = 0 \rightarrow j = 0$ при эмиссии светового кванта, следует непосредственно отсюда и из закона сохранения момента количества движения.

Функции $\vec{f}_N(x^{(1)}, \dots, x^{(N)})$ в пространстве импульсов определяют соответствующие функции в пространстве координат:

$$\vec{f}_N(x^{(1)}, \dots, x^{(N)}) = \int \vec{f}_N(k^{(1)}, \dots, k^{(N)}) e^{i\vec{k}^{(1)}\vec{x}^{(1)} + \dots + i\vec{k}^{(N)}\vec{x}^{(N)}} dk^{(1)} \dots dk^{(N)}.$$

Эти функции не имеют, однако, непосредственно отношения к плотности частиц. Например, при наличии *одного* светового кванта $f^*(x)f(x)$ определяет плотность энергии, а не пространственную плотность фотонов. Последнюю можно попытаться определить выражениями:

$$\left(f^* \frac{1}{\sqrt{1-\Delta}} f \right),$$

или

$$(\vec{g}^* \vec{g}),$$

где

$$\vec{g} = \frac{1}{\sqrt{1-\Delta}} \vec{f},$$

причём последнее выражение положительно definite. Подобное определение было бы, однако, с физической точки зрения произвольно и не гарантировало бы (как следует из излагаемой ниже теории взаимодействия между материей и излучением), что квант не производит никакого действия в точке пространства, где так определённая плотность обращается в нуль. *Обращение в нуль функции \vec{f} или \vec{g} в определённой точке пространства не имеет непосредственного физического смысла.*

Далее, благодаря сложному поведению \vec{F} при преобразовании Лоренца оказывается, что для светового кванта не существует *четырёхмерного вектора плотности тока, который удовлетворял бы уравнению непрерывности и имел положительно definite плотность*. Можно удовлетворить формально лишь *одному* из обоих требований: *либо* векторному характеру плотности тока при лоренцовских преобразованиях, *либо* положительному характеру плотности. Это находится в резкой противоположности с описанием материальных частиц в теории Дирака, где можно удовлетворить обоим требованиям. Отсутствию плотности для световых квантов соответствует также то обстоятельство, что нельзя подобрать оператора в обычном смысле для координаты светового кванта (координата светового кванта не есть «наблюдаемая» в смысле определений теории преобразований; часть I, §§ 7 и 9).

Действительно, обсуждение измерительных возможностей для координаты светового кванта ¹⁾ показывает, что эта координата не может быть определена точнее, чем

$$|\Delta x| > \frac{hc}{E}, \quad (165)$$

где E — энергия кванта, причём для определения координаты требуется промежуток времени, не меньший чем

$$\Delta t > \frac{\hbar}{E}. \quad (166)$$

Это совпадает, однако, как раз с областью применимости геометрической оптики, так как для светового кванта hc/E равно h/P или равно длине волны. [Для материальной частицы справедливы те же соотношения; часть I, уравнения (16), (17), но там, однако, hc/E может быть значительно меньше, чем длина материальной волны.] Только пока применимо классическое понятие «луча», координата светового кванта имеет физический смысл.

С этим не следует смешивать измерение средних значений по времени (за время, большое по сравнению с периодом света) величин \vec{E}^2 или \vec{H}^2 . Эти величины могут быть измерены, например, в случае стоячих волн, в области пространства, меньшей, чем длина волны.

§ 7. Взаимодействие излучения и материи.

Теория квантования поля излучения лишь тогда полна, когда она описывает также взаимодействия с материей. Пусть имеются n материальных частиц; мы будем обозначать пространственные координаты и импульсы этих частиц (последние разделены на \hbar) большими буквами $\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_n$ и $\vec{K}_1, \dots, \vec{K}_n$, в противоположность соответствующим величинам $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, \vec{k}_1, \dots, \vec{k}_N$ для световых квантов. Прежде чем выбрать оператор Гамильтона, мы хотим рассмотреть перестановочные соотношения для операторов и уравнения, которые описывают изменение этих операторов со временем. Чтобы иметь дело лишь с калибровочно-инвариантными операторами, целесообразно для каждой из n материальных частиц ввести операторы $\vec{\pi}_k$ ($k=1, 2, 3$), аналогичные введённым в (77):

$$\vec{\pi}_k^{(s)} = \vec{p}_k^{(s)} + \frac{e}{c} \Phi_k(X_s) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X_k^{(s)}} + \frac{e}{c} \Phi_k(X^{(s)}). \quad (167)$$

¹⁾ L. Landau и R. Peierls, *l. ц.*

Здесь s — индекс, нумерующий частицы, который пробегает значения от 1 до n ; в потенциалы вставлены координаты s -й частицы. Сначала мы, однако, совершенно не будем использовать это определение операторов $\vec{\pi}_k^{(s)}$ и будем рассматривать лишь их перестановочные соотношения и их изменения со временем. Первые будут аналогичны (78):

$$\vec{\pi}_i^{(s)} \vec{\pi}_k^{(s')} - \vec{\pi}_k^{(s')} \vec{\pi}_i^{(s)} = \delta_{ss'} \frac{\hbar}{i} \frac{e}{e} H_{ik}(\vec{X}^{(s)}), \quad (168_1)$$

$$\vec{\pi}_i^{(s)} X_k^{(s')} - X_k^{(s')} \vec{\pi}_i^{(s)} = \delta_{ss'} \delta_{ik} \frac{\hbar}{i}, \quad (168_2)$$

последние же аналогичны (80'):

$$\frac{d\vec{\pi}_k^{(s)}}{dt} = (-e) \left\{ E_k(\vec{X}_s) + \sum_{l=1}^3 H_{kl}(\vec{X}_s) \alpha_l^{(s)} \right\}. \quad (169)$$

При этом мы сверх того теперь же введём для каждой частицы операторы $\alpha_k^{(s)}$, $\beta_k^{(s)}$, которые коммутируют со всеми остальными операторами и согласно дираковской теории электрона подчиняются следующим соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} \vec{\alpha}_i^{(s)} \vec{\alpha}_k^{(s')} + \vec{\alpha}_k^{(s')} \vec{\alpha}_i^{(s)} &= 2\delta_{ss'} \delta_{ik}, & \vec{\alpha}_i^{(s)} \vec{\beta}^{(s')} + \vec{\beta}^{(s')} \vec{\alpha}_i^{(s)} &= 0, \\ [\vec{\alpha}_i^{(s)}]^2 &= [\vec{\beta}^{(s)}]^2 = 1, \end{aligned} \right\} \quad (170)$$

$$\vec{X}^{(s)} = c\vec{\alpha}^{(s)}. \quad (171)$$

Для напряжённости поля сохраняются перестановочные соотношения (145) и (146) электродинамики вакуума:

$$\left. \begin{aligned} [E_i(x), E_j(x')] &= 0, & [H_{ij}(x), H_{kl}(x')] &= 0, \\ [E_i(x), H_{jl}(x)] &= \frac{\hbar c}{i} \left(\delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_l} - \delta_{il} \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \delta(x - x'). \end{aligned} \right\} \quad (146)$$

Далее устанавливаем, что напряжённости поля должны коммутировать с $X_k^{(s)}$ и $\vec{\alpha}_k^{(s)}$.

Важнейшее требование заключается в том, что операторы напряжённостей поля должны удовлетворять

уравнениям Максвелла при наличии зарядов:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} + \text{rot } \vec{E} = 0, \quad \text{div } \vec{H} = 0, \quad (172)$$

$$-\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}(x)}{\partial t} + \text{rot } \vec{H}(x) = (-e) \sum_{s=1}^n \vec{\alpha}^{(s)} \delta(\vec{x} - \vec{X}^{(s)}), \quad (173_1)$$

$$\text{div } \vec{E} = (-e) \sum_{s=1}^n \delta(\vec{x} - \vec{X}^{(s)}). \quad (173_2)$$

Появление δ -функции соответствует предположению о точечности заряда в классической теории. Позже мы обсудим предположение о замене δ -функции произвольной функцией $D(\vec{x} - \vec{X}^{(s)})$, что должно соответствовать конечному распределению заряда.

Соотношение (173₂) весьма замечательно, так как оно не содержит производных по времени и должно выполняться таким образом уже в заданный момент времени; оно представляет собой *дополнительное условие*. Его производная по времени обращается тождественно в нуль в силу уравнений (173₁) и (171), что необходимо должно иметь место, чтобы теория была непротиворечивой.

Нам пока ещё не хватает перестановочных соотношений для $\vec{\pi}_k^{(s)}$ и напряжённостей поля. Эти перестановочные соотношения так же, как и все другие, должны удовлетворять следующим условиям: во-первых, они должны быть совместны друг с другом, во-вторых, они должны сохраняться во времени в силу дифференциальных уравнений для операторов и, в-третьих, все операторы должны коммутировать с дополнительным условием (173₂). Это выполняется, если положить¹⁾:

$$[\vec{\pi}_i^{(s)}, H_l(x)] = 0, \quad [\vec{\pi}_i^{(s)}, E_l(x)] = (-e) \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \delta(\vec{x} - \vec{X}^{(s)}). \quad (174)$$

Например, тогда будем иметь:

$$[\vec{\pi}_i^{(s)}, \text{div } \vec{E}(x)] = (-e) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \delta(\vec{x} - \vec{X}^{(s)}).$$

¹⁾ В литературе эти соотношения выводятся из (167) и предположения: $[\Phi_k(x), E_j(x')] = \frac{\hbar}{i} \delta(x - x')$, которое мы не используем.

в согласии с (173₂) и (168₂); далее, производные по времени перестановочных соотношений (174), вследствие остальных соотношений, сами собой удовлетворяют требуемым условиям.

Затем находим оператор энергии

$$H = c \sum_{s=1}^n \sum_{k=1}^3 \{ \vec{x}_k^{(s)} \vec{\pi}_k^{(s)} + mc \vec{\beta}^{(s)} \} + \frac{1}{2} \int (\vec{E}^2 + \vec{H}^2 + \Delta_0) dV \quad (175)$$

и оператор импульса:

$$P_i = \sum_{s=1}^N \vec{\pi}_i^{(s)} + \frac{1}{c} \int \{ [\vec{E} \times \vec{H}]_i + \Delta_i \} dV, \quad (176)$$

коммутирующие с (173₂).

Добавочные величины Δ_0, Δ_i в подинтегральных выражениях, которые не выписаны в явном виде, коммутируют со всеми операторами (c -числа) и служат для исключения нулевой энергии [см. (155)]. Для каждого из изменяемых операторов

$$\vec{\pi}_i^{(s)}, X_i^{(s)}, \vec{\alpha}_i^{(s)}, \vec{\beta}^{(s)}; E_i(x), H_{jk}(x)$$

и даже вообще для каждой функции (которая не содержит явно координат x_k и t) этих операторов, f имеем:

$$\dot{f} = \frac{i}{\hbar} [H, f], \quad (177)$$

$$\sum_s \frac{\partial f}{\partial X_k^{(s)}} + \frac{\partial f}{\partial x_k} = \frac{i}{\hbar} [P_k, f]. \quad (178)$$

Можно исходить также из требования существования оператора Гамильтона и оператора импульса и вывести отсюда дифференциальные уравнения в соответствии с (177). Замечательно отсутствие скалярного потенциала в (175). В развиваемой здесь теории член $(-e) E_x$ в правой части (169) получается, однако, непосредственно из коммутирования π_k с $(\vec{E})^2$.

Мы приступим теперь к обсуждению вопроса о релятивистской инвариантности теории. Рассмотрим ортогональное преобра-

зование координат

$$x_{\mu}^j = \sum_{\nu=1}^4 a_{\mu\nu} x_{\nu}$$

($x_4 = ict$); тогда мы можем рассматривать операторы в новой системе отсчёта, т. е. от

$$\vec{\pi}_i^{(s)}(t), X_i^{(s)}(t), \vec{\alpha}_i^{(s)}(t), \vec{\beta}^{(s)}(t); E_i(x, t), H_{jk}(x, t)$$

перейти к

$$\vec{\pi}_i'^{(s)}(t'), X_i'^{(s)}(t'), \vec{\alpha}_i'^{(s)}(t'), \vec{\beta}'^{(s)}(t'); E_i'(x', t'), H_{jk}'(x', t').$$

В величины, относящиеся к материальным частицам, подставим

$$ict' = a_{44} ict + \sum_{r=1}^3 a_{4r} X_r^{(s)}(t).$$

При этом напряжённости поля должны преобразовываться как антисимметричный тензор в четырёхмерном пространстве, а определяемые выражения (17) величины γ_{μ} , именно $(-i\vec{\beta}\vec{\alpha}_h, \vec{\beta})$, как четырёхмерный вектор, $X_i^{(s)}$ вместе с ict , и наконец, $\{\pi_h, i(\sum_{l=1}^3 \alpha_l \pi_l + m\vec{\beta})\}$

образуют вместе один четырёхмерный вектор. Далее, $(P_{\alpha}, \frac{i}{c}H)$ должны образовывать четырёхмерный вектор. Перестановочные соотношения также должны иметь в штрихованной системе ту же форму, что и в нештрихованной. Для проверки удобнее не фиксировать «мировую точку», а изменить её так, чтобы штрихованные координаты новой «мировой точки» имели те же значения, что нештрихованные координаты старой мировой точки. Это означает, что мы переходим от нештрихованных координат к

$$\vec{\pi}_i'^{(s)}(t), X_i'^{(s)}(t), \vec{\alpha}_i'^{(s)}(t), \vec{\beta}'^{(s)}(t); E_i'(x, t), H_{jk}'(x, t),$$

причём t и x , t есть значения штрихованных координат. Мы будем называть это преобразованием второго рода, в то время как ранее данное преобразование назовём преобразованием первого рода. *Релятивистская инвариантность теории будет доказана, если существует унитарный оператор S , который производит преобразование второго рода для любой из написанных величин, а также и для любой функции f от этих величин:*

$$f'(t) = S f(t) S^{-1}. \quad (179)$$

Для доказательства достаточно показать, что это соотношение выполняется для бесконечного малого преобразования координат:

$$x_{\mu}' = x_{\mu} + \sum_{\nu=1}^4 \varepsilon_{\mu\nu} x_{\nu}, \quad \varepsilon_{\mu\nu} = -\varepsilon_{\nu\mu}.$$

При этом учитываются лишь величины первого порядка относительно $\varepsilon_{\mu\nu}$. Вместо (179) имеем тогда:

$$S = I + \frac{i}{\hbar} \vec{\Lambda}, \quad (180)$$

$$f'(x, t) = f(x, t) + \frac{i}{\hbar} [\vec{\Lambda}, f(x, t)]. \quad (181)$$

Оператор $\vec{\Lambda}$ зависит линейно от $\varepsilon_{\mu\nu}$:

$$\vec{\Lambda} = \sum_{\mu < \nu} \vec{\Lambda}_{\mu\nu} \varepsilon_{\mu\nu} \quad (182)$$

причём $\vec{\Lambda}_{\mu\nu} = -\vec{\Lambda}_{\nu\mu}$ образуют, как мы увидим, компоненты антисимметричного тензора и остаются постоянными во времени, являясь таким образом интегралами уравнений поля. Бесконечно малое преобразование первого рода величин f получают следующим образом из бесконечно малого преобразования второго рода. Функции напряжённостей поля f , взятой в *определённой точке пространства*, относим выражение:

$$\sum_{k=1}^3 \left\{ \sum_{\nu=1}^4 \frac{\partial f}{\partial x_k} \varepsilon_{k\nu} x_\nu + \frac{1}{ic} \dot{f} \varepsilon_{4k} x_k \right\}.$$

Величинам $\vec{\pi}_j^{(s)}$ и $X_k^{(s)}$ относим следующие выражения:

$$\sum_{k=1}^3 X_j^{(s)} \varepsilon_{jk} X_k^{(s)}, \quad \sum_{k=1}^3 \dot{\pi}_j^{(s)} \varepsilon_{jk} X_k^{(s)}.$$

Теперь запишем $\vec{\Lambda}_{\mu\nu}$ отдельно для пространственного вращения и преобразования Лоренца. Положим:

$$\vec{\Lambda}_{jk} = \sum_s \left\{ X_j^{(s)} \pi_k^{(s)} - X_k^{(s)} \pi_j^{(s)} + \frac{\hbar}{2} \frac{1}{i} \dot{\alpha}_j^{(s)} \alpha_k^{(s)} \right\} + \frac{1}{c} \int \vec{x} (\vec{E} \times \vec{H})_{jk} dV, \quad (183_1)$$

$$\frac{1}{i} \vec{\Lambda}_{4j} = ct P_j - \sum_s \left\{ X_j^{(s)} \left(\sum_{k=1}^3 \dot{x}_k^{(s)} \pi_k^{(s)} + mc \dot{\beta}_j^{(s)} \right) + \frac{\hbar}{2} \dot{\alpha}_j^{(s)} \right\} - \frac{1}{2c} \int x_j (\vec{E}^2 + \vec{H}^2 + \Delta_0) dV. \quad (182_2)$$

Здесь P_j снова компонента импульса, данная выражением (176). В Λ_{jk} узнаём интеграл момента импульса и именно сумму

момента (84), относящегося к материи, и момента (130), относящегося к излучению; далее, $\vec{\Lambda}_{4j}$ — дополняющие пространственно-временные компоненты, образующие совместно с $\vec{\Lambda}_{jk}$ антисимметричный тензор. Как показывает вычисление, производные по времени $\vec{\Lambda}_{\mu\nu}$ равны нулю, так что они являются интегралами уравнений поля (уравнений движения). В членах $\frac{\hbar}{2} \frac{1}{i} \vec{\alpha}_j^{(s)} \vec{\alpha}_k^{(s)}$,

$\frac{\hbar}{2} \vec{\alpha}_j^{(s)}$, которые можно объединить в $\frac{\hbar}{2} \vec{\gamma}_\mu^{(s)} \vec{\gamma}_\nu^{(s)}$, узнаём величины, существенные [согласно (134)] для преобразования волновых функций Дирака (здесь сами $\vec{\alpha}_k^{(s)}$, $\vec{\beta}^{(s)}$). Этим завершается доказательство релятивистской инвариантности теории.

Существуют общие систематические исследования относительно квантования каких-либо классических уравнений поля и возможности вывода и перестановочные соотношения из канонической схемы. Мы не будем их подробно касаться, так же как и вопроса о связи с рассмотренным в части I, § 15 квантованием материальных волн, но укажем на относящуюся сюда литературу¹⁾. Некоторые особенности появляются, когда функция Гамильтона обладает инвариантностью относительно группы, преобразования которой содержат произвольные функции. В случае квантовой электродинамики это — группа «Eich-преобразований» (преобразований калибровки). В данном здесь представлении мы, отказываясь от применения систематического метода для нахождения перестановочных соотношений, применяли лишь «Eich-инвариантные» величины. Если хотят сохранить потенциалы, то всего нагляднее метод Ферми. Согласно этому методу, связанная с излучением часть оператора Гамильтона выбирается в виде

$$\frac{1}{2} \int \left\{ \sum_k \left[\sum_i \left(\frac{\partial \Phi_k}{\partial x_i} \right)^2 + \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \Phi_k}{\partial t} \right)^2 \right] - \left[\sum_i \left(\frac{\partial \Phi_0}{\partial x_i} \right)^2 + \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \Phi_0}{\partial t} \right)^2 \right] \right\} dV.$$

$\frac{\partial \Phi_k}{\partial t}$ и $\frac{\partial \Phi_0}{\partial t}$ играют роль импульсов, канонически сопряжённых с Φ_k и Φ_0 ; часть оператора Гамильтона, относящаяся к частицам,

¹⁾ Обзорные работы: L. Rosenfeld, *Mém. de l'Inst. Henri Poincaré*, 2, 24, 1932; E. Fermi, *Rev. of. Mod. Physics*, 4, 87, 1932. Оригинальные работы: G. Mie, *Ann. d. Phys.* (4), 85, 711, 1928; W. Heisenberg u. W. Pauli, I, *Zs. f. Phys.*, 56, 1, 1929; II, *ibid.*, 59, 168, 1929 и 63, 574, 1930 (Замечания к этому L. Rosenfeld, *ibid.* 58, 540, 1929); E. Fermi, *Lincei Rend.* (6), 9, 881, 1929; 12, 431, 1930; L. Rosenfeld, *Ann. d. Phys.*, 5, 113, 1930.

дополняется членом $-e \sum_s \Phi_0(X^{(s)})$. Тогда следует требовать выполнения дополнительного условия:

$$\sum_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial x_k} + \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi_0}{\partial t} = 0$$

и его производной по времени, которую можно написать в форме:

$$\operatorname{div} \vec{E} = \vec{\rho} = \sum_s \delta(x - X^{(s)}).$$

Оба условия, поскольку они выполняются, переместительны с оператором Гамильтона, т. е. они сохраняются во времени, если осуществляются в момент $t=0$. Дополнительные условия существенно ограничивают «Eich-преобразования», однако, метод Ферми очень удобен для доказательства инвариантности теории относительно преобразований Лоренца. Окончательные результаты тождественны с результатами, получающимися из данного здесь или какого-либо другого непротиворечивого представления квантовой электродинамики.

Чтобы вывести в данной системе отсчёта следствия из основных уравнений теории, целесообразно разложить электрическую напряжённость поля \vec{E} на продольную и поперечную части:

$$\vec{E} = \vec{E}^{(l)} + \vec{E}^{(tr)}. \quad (184)$$

Под этим понимается, что при пространственном разложении \vec{E} в ряд Фурье, т. е. переходе к k -пространству, $\vec{E}^{(l)}(k)$ будет параллельно \vec{k} , а $\vec{E}^{(tr)}$, напротив, перпендикулярно \vec{k} . В координатном пространстве это равнозначно тому, что поле \vec{E}^l лишено вихрей, а поле $\vec{E}^{(tr)}$ — источников:

$$\operatorname{rot} \vec{E}^l = 0, \quad \operatorname{div} \vec{E}^{(tr)} = 0 \quad (185)$$

для \vec{E}^l сразу же следует из (173₂):

$$\vec{E}^{(l)} = -\operatorname{grad}(-e) \sum_s \frac{1}{r_s} = -e \sum_s \frac{\vec{x} - \vec{X}_s}{r_s^3}, \quad (186)$$

где

$$r_s = |\mathbf{x} - \vec{X}^{(s)}|$$

означает расстояние точки наблюдения от положения s -й частицы¹⁾. Затем обычным образом получаем:

$$\int \vec{E}^{(l)} \vec{E}^{(tr)} dV = 0,$$

$$\frac{1}{2} \int (\vec{E}^{(l)})^2 dV = \frac{1}{2} \sum_s \sum_{s'} \frac{e^2}{r_{ss'}},$$

где

$$r_{ss'} = |\vec{X}^{(s)} - \vec{X}^{(s')}|$$

— расстояние частицы s от частицы s' . В этом выражении при $s = s'$ мы получаем бесконечно большие члены, что соответствует бесконечно большой электростатической собственной энергии частиц (которая, очевидно, появляется уже в случае одной единственной частицы). Чтобы можно было использовать теорию для расчётов, нужно заменить выражение:

$$\frac{1}{2} \int (\vec{E}^{(l)})^2 dV = \frac{1}{2} \sum_s \sum_{s'} \frac{e^2}{r_{ss'}} = n \cdot \infty + \sum_{s < s'} \frac{e^2}{r_{ss'}}$$

выражением:

$$\sum_{s < s'} \frac{e^2}{r_{ss'}}.$$

Тем самым мы нарушаем, однако, релятивистскую инвариантность теории.

С этим изменением оператор Гамильтона (175) примет следующий вид:

$$H' = c \sum_{s=1}^n \left\{ \sum_k \vec{a}_k^{(s)} \vec{\pi}_k^{(s)} + mc \beta^{(s)} \right\} +$$

$$+ \sum_{s < s'} \frac{e^2}{r_{ss'}} + \frac{1}{2} \int (\vec{E}^{(tr)})^2 + \vec{H}^2 + \Delta_0 dV. \quad (187)$$

Здесь можно, как в электродинамике вакуума, выразить $\vec{E}^{(tr)}$ через числа световых квантов, но теперь эти

¹⁾ Мы всегда предполагаем, что \vec{E} в бесконечности исчезает достаточно быстро. Этим исключаются поля, одновременно лишённые вихрей и источников.

числа будут меняться с течением времени, в то время как в электродинамике вакуума они были постоянны.

Мы введём теперь функцию Шредингера:

$$\Psi_{r_1, r_2, \dots, r_n}(\vec{X}^{(1)}, \dots, \vec{X}^{(n)}; N(\lambda, \vec{k})),$$

которая зависит, с одной стороны, от индексов спина (пробегающих значения от 1 до 4) и координат материальных частиц, и с другой стороны, от чисел световых квантов в пространстве импульсов. Квадрат абсолютного значения этой функции означает соответствующую вероятность. В то время как действие на Ψ операторов $\vec{\alpha}_k^{(s)}$, $\vec{\beta}^{(s)}$, $X_k^{(s)}$, $N(\lambda, k)$ ясно, ещё не определено однозначно, как действуют на Ψ напряжённости \vec{E} , \vec{H} и $\vec{\pi}_k^{(s)}$, действительно, в нашем определении Ψ до сих пор ещё остаётся произвольной фаза $e^{if(X^{(1)}, \dots, X^{(N)}; N(\lambda, k))}$, и в зависимости от того, как она будет выбрана, действие операторов \vec{E} , \vec{H} и $\vec{\pi}_k^{(s)}$ на Ψ будет давать различные результаты. Само по себе каждое определение разрешается или запрещается в зависимости от того, согласуется ли оно с перестановочными соотношениями.

Мы можем установить, что $\vec{E}^{(tr)}$ и \vec{H} действуют точно так же, как в электродинамике вакуума; тогда согласно (121), (125), (132):

$$\begin{aligned} \vec{E}^{(tr)} &= \int \vec{E}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}^{(s)} = \int (F(k) + F^*(-k)) e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}^{(s)} = \\ &= \int V \sqrt{\frac{\hbar c |k|}{2}} \sum_{\lambda=1,2} [\vec{e}(\lambda, k) a(\lambda, k) + \\ &\quad + \vec{e}^*(\lambda, -k) a^*(\lambda, -k)] e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}^{(s)}, \\ \vec{H} &= \int \vec{H}(k) e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}^{(s)} = \\ &= \int \left[\frac{k}{k}, \vec{F}(k) - \vec{F}^*(-k) \right] e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}^{(s)} = \\ &= V \sqrt{\frac{\hbar c |k|}{2}} \sum_{\lambda=1,2} \left\{ \left[\frac{k}{k} \vec{e}(\lambda, k) \right] a(\lambda, k) + \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{\vec{k}}{k} \vec{e}^*(\lambda, -k) \right] a^*(\lambda, -k) \right\} e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}^{(s)}. \end{aligned}$$

Действие операторов a , a^* дано выражениями (137)—(140).

Мы получаем следующее, совместное с перестановочными соотношениями определение действия операторов $\vec{\pi}_j^{(s)}$:

$$\begin{aligned}\vec{\pi}_j^{(s)} \Psi(\vec{X}, N(k)) &= \left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X_j^{(s)}} + \frac{e}{c} \int \frac{1}{r} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial H_{jk}(x)}{\partial x_k} dV \right\} \Psi = \\ &= \left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X_j^{(s)}} + \frac{e}{c} \frac{-i}{\sqrt{-\Delta}} [\vec{F}_i(X^{(s)}) - \vec{F}_i^*(X^{(s)})] \right\} \Psi,\end{aligned}$$

или в k -пространстве:

$$\begin{aligned}\vec{\pi}_j^{(s)} \Psi(\vec{X}, N(k)) &= \\ &= \left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X_j^{(s)}} + \frac{e}{c} (-i) \int \frac{1}{|k|} [F_j(k) - \right. \\ &\quad \left. - F_j^*(-k)] e^{ikX^{(s)}} dk^{(3)} \right\} \Psi; \quad (188_1)\end{aligned}$$

таким образом

$$\begin{aligned}\vec{\pi}_j^{(s)} \Psi(\vec{X}, N(k)) &= \\ &= \left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X_j^{(s)}} + \frac{e}{c} (-i) \int \sqrt{\frac{\hbar c}{2|k|}} e^{ikX^{(s)}} \left[\varepsilon_j(\lambda, k) a(\lambda, k) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \varepsilon_j^*(\lambda, -k) a^*(\lambda, -k) \right] dk^{(3)} \right\} \Psi. \quad (188_2)\end{aligned}$$

Подставив это в оператор Гамильтона, получим:

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar}{c} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \left\{ \int N(k) \hbar c |k| dk^{(3)} + c \sum_{s=1} \sum_{k=1}^3 \left(\vec{\alpha}_k^{(s)} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X^{(s)}} + mc \vec{\beta}^{(s)} \right) + \right. \\ \left. + \sum_{s < s'} \frac{e^2}{r_{ss'}} + H_1 \right\} \Psi = 0, \quad (189)\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}H_1 \Psi &= e(-i) \left\{ \sum_{k=1}^3 \sum_{s=1}^3 \sqrt{\frac{\hbar c}{2|k|}} \sum_{s=1}^n e^{ikX^{(s)}} \vec{\alpha}^{(s)} \sum_{\lambda=1,2} [\varepsilon_j(\lambda, k) a(\lambda, k) + \right. \\ &\quad \left. + \varepsilon_j^*(\lambda, -k) a^*(\lambda, -k)] dk^3 \right\} \Psi. \quad (190)\end{aligned}$$

Иногда бывает удобнее ввести вместо непрерывных значений \vec{k} — дискретное.

Если бы в (189) не было члена $H_1\psi$, то мы имели бы дело с материальными частицами, между которыми действуют электростатические силы, и с не зависящим от этих частиц полем излучения. Член $H_1\psi$ определяет, таким образом, связь частиц с полем излучения и имеет решающее значение при описании эмиссии, абсорбции и дисперсии света. Успех изложенной в части I волновой механики существенно основан на предположении, что связь с полем излучения может рассматриваться как бесконечно малое возмущение. В дальнейшем мы обсудим, насколько существующая теория соответствует этому требованию. Подчеркнём ещё, что уравнения (189) образуют по существу основу первоначальной теории Дирака взаимодействия между излучением и материей¹⁾.

Вместо того чтобы использовать переменные $N(k)$ в качестве аргументов функции ψ , можно по Ландау и Пайерлсу²⁾ ввести k -пространство световых квантов. Тогда для каждого общего числа N наличных световых квантов мы будем иметь следующие функции:

$$f_{r_1, \dots, r_n; j_1, \dots, j_N}(\vec{X}^{(1)}, \dots, \vec{X}^{(n)}; \vec{k}^{(1)}, \dots, \vec{k}^{(N)}).$$

Здесь спиновый индекс r , материальной частицы пробегает значения от 1 до 4, каждый из индексов j световых квантов — от 1 до 3. Результат применения оператора Гамильтона к этим функциям даётся непосредственно формулой (163), если используется форма (188₁) операторов $\vec{\pi}_j^{(s)}$.

Применения. Все применения теории взаимодействия излучения и материи, базирующейся на квантовании

¹⁾ Дирак, во-первых, оперировал при квантовании со стоячими волнами, а не бегущими, во-вторых, тогда ещё не существовала его теория электрона, и он поэтому вставил в оператор Гамильтона для каждой частицы член, соответствующий нерелятивистской волновой механике $\frac{1}{2m} \sum_j \vec{\pi}_j^2$ вместо $c \sum_j (\alpha_j \pi_j + m c \beta)$. Это, ко-

нечно, приближённо справедливо для небольших скоростей частиц. Оппенгеймером (*Phys. Rev.*, 35, 461, 1930) и Ферми (*Lincei Rend.*, 12, 431, 1930) было показано, что уравнения (189), (190) следуют из квантовой электродинамики.

²⁾ L. Landau u. R. Peierls, *Zs. f. Phys.*, 62, 188, 1930.

поля излучения, т. е. на понятии фотона, покоятся на том, что связь излучения и материи, т. е. член с H_1 в (189), рассматривается как относительно малое возмущение. Формально эта теория возмущения соответствует разложению по степеням заряда e .

Что касается результатов теории для явлений эмиссии, абсорбции и дисперсии, то мы отсылаем читателя к гл. V *Handb. d. Phys.*, т. XXIV, 1933. Важный успех этой теории заключается в возможности рассмотреть корректным образом затухание излучения (и, следовательно, также вопрос о ширине спектральной линии).

Мы хотим ещё вкратце показать, как предписания I и II, появляющиеся при рассмотрении явлений излучения по принципу соответствия (часть I, § 15) и кажущиеся там произвольными, оказываются справедливыми сами собой, если пользоваться теорией фотонов. Что касается испущенного или рассеянного излучения, то нет необходимости непосредственно употреблять оператор Гамильтона, но можно, по Гейзенбергу¹⁾, прямо интегрировать с помощью запаздывающих потенциалов уравнения Максвелла, рассматриваемые как операторные. При этом целесообразно в качестве переменных ввести невозмущённые стационарные состояния системы вместо координат электронов и разлагать функцию $\Psi(\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_n, N(k, \lambda), t)$ по собственным функциям $u_i(\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_n)$ этих состояний:

$$\Psi(\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_n, N(k, \lambda), t) = \sum_i c_i(N(k, \lambda), t) u_i(\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_n).$$

Вычисление испущенного или рассеянного излучения производится далее точно так же, как в случае вычисления по принципу соответствия, только операторы или матрицы, вообще говоря, действуют также и на световые кванты.

Что касается предписания I, то оно следует непосредственно из того, что среднее значение интенсивности

¹⁾ W. Heisenberg, *Ann. d. Phys.* (5), 9, 338, 1931. В противоположность Гейзенбергу мы здесь не применяем метод квантования материальных волн; взаимодействие между электронами атома может быть тогда произвольным.

излучения даётся выражением $2F^*F$, а не $F^*F + FF^*$. Разложение напряжённости на части, пропорциональные $e^{+i\omega t}$ и $e^{-i\omega t}$, проведённое в части I, § 15 [часть I, уравнение (361)], соответствует в точности, согласно (121), разложению напряжённости на части, содержащие или только F^* , или только F . (Это верно, по крайней мере, в тех точках пространства, где плотности зарядов и токов обращаются в нуль, что соблюдается на больших расстояниях от атома.) *Весь приём введения предписания I сводится в теории фотонов к образованию среднего значения F^*F .*

Совершенно подобно этому получаем обоснование предписания II, которое необходимо, чтобы учесть обратное действие излучения на атом. Мы нашли в части I [уравнения (378) и (379)] следующее выражение для возмущённых амплитуд состояния $c_m^{(1)}$:

$$c_m^{(1)} = \sum_n \vec{f}_{mn}(t) \vec{E}^{(+)} + \vec{f}_{nm}^*(t) \vec{E}^{(-)}.$$

Вместо $E^{(+)}$ и $E^{(-)}$ можно также писать $F^*(k)$ и $F(k)$; далее заметим, что $c_m^{(1)}$ являются операторами (или матрицами), которые действуют и на числа световых квантов.

Следует вычислить $\sum_{N'} c_m^{(1)}(N', t)^2$ или, вследствие того, что $c_m^{(1)}(N', t) = \sum_N c_m^{(1)}(N', N) c_m^{(0)}(N, t)$, выражение $\sum_N |c_m^{(1)}(N', N)|^2$, где N — число световых квантов в начальном состоянии. Положим:

$$c_m^{+(1)} = -i \left(\sum_n \vec{f}_{mn}^*(t) \vec{E}^{(-)} + \vec{f}_{nm}(t) \vec{E}^{(+)} \right),$$

так что

$$c_m^{+(1)}(N, N') = (c_m^{(1)}(N', N))^*.$$

Таким образом:

$$\sum_{N'} |c_m^{(1)}(N', N)|^2 = \sum_{N'} c_m^{+}(N, N') c_m(N', N) = (c_m^{+} c_m)_{N, N'}.$$

Таким образом мы действительно построили математическое ожидание $c_m^{+} c_m$, где c_m^{+} стоит слева от c_m .

Далее, математическое ожидание $2\mathbf{F}^*\mathbf{F}$ пропорционально $|k| N(k)$, математическое ожидание $2\mathbf{F}\mathbf{F}^*$ пропорционально $|k| (N(k) + 1)$. Множитель $2\hbar\nu^2/c^2$, данный в первой части, получается обычным образом из плотности собственных колебаний.

При введении в волновые функции чисел световых квантов, как независимых переменных, оба особых правила, вводимых при рассмотрении процессов излучения методом соответствия, сводятся, таким образом, к общим принципам волновой механики.

Из других проблем, которые легко можно рассмотреть с помощью теории, упомянем опыт Гейгера-Боте, обнаруживший в явлении Комптона связь между моментом времени появления рассеяния электрона и моментом времени появления рассеянного при этом процессе кванта. Из теории сразу следует, что эти моменты времени должны в пределах точности геометрической оптики и ширины определяющего начальное состояние волнового пакета находиться в определённых границах¹⁾.

§ 8. Собственная энергия электрона. Границы современной теории.

Уже при вычислении из квантовой электродинамики электростатической энергии частиц мы видели, что электростатическая собственная энергия одной частицы получается бесконечно большой. Далее, однако, оказывается, что даже после удаления этой бесконечно большой части энергии результирующие уравнения (189), (190) всё ещё приводят к бесконечно большой магнитной собственной энергии.

Действительно, если произвести при наличии одной частицы разложение по заряду e частицы, мы получим для стационарного состояния, согласно общим формулам теории возмущения [часть I, уравнение (230)], дополнительную энергию, пропорциональную e^2 :

$$\Delta E = \sum_{n, k, \lambda} \frac{|H_{m_0; n_1, k}^{(1)}|^2}{E_m - E_n + \hbar c |k|}.$$

¹⁾ См. В. Гейзенберг, *Физические основы квантовой механики*, § 2.

Здесь $H^{(1)}$ — оператор, определённый выражением (190), индексы m, n относятся к начальному и промежуточному состояниям частицы, 0 и $1_{\lambda \vec{k}}$ — числа световых квантов в начальном и промежуточном состояниях. Если исходить из начального состояния, при котором световые кванты отсутствуют, то от нуля будут отличаться лишь матричные элементы, соответствующие таким переходам, когда в промежуточном состоянии имеется один световой квант. Раскрывая оператор $H^{(1)}$, получим:

$$\begin{aligned} \Delta E = e^2 \sum_n \int dk^{(3)} \frac{\hbar c}{2|k|} \frac{1}{E_m - E_n + \hbar c|k|} \times \\ \times \sum_{\lambda=1,2} \int \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 u_m^*(\vec{k}) \vec{\alpha}_i u_n(x) u_n^*(x') \times \\ \times \vec{\alpha}_j u_m(x') \vec{e}_{i\lambda} \vec{e}_{j\lambda} e^{ik(\vec{x}-\vec{x}')} d\vec{x}^{(3)} d\vec{x}'^{(3)}. \end{aligned}$$

В случае отсутствия сил можно положить

$$u_n(x) = a_p e^{i\vec{K} \cdot \vec{x}},$$

где p — индекс спина, и роль индекса n замещается K и спинowymi состояниями (два с положительной и два с отрицательной энергиями).

Если мы имеем дело со связанными частицами, то оказывается, что связанные состояния несущественны, поскольку мы интересуемся лишь вопросом, бесконечно ли ΔE или нет. За это ответственны в случае отсутствия сил большие значения K , в общем случае — сильно возбуждённые квантовые состояния. В последнем случае, однако, в области, где $u_m(x)$ заметно отлично от нуля, $u_n(x)$ можно заменить собственной функцией свободной частицы, если для K подставить среднее волновое число n -го состояния в области начального состояния m . Таким образом, достаточно рассмотреть случай свободной частицы¹⁾.

¹⁾ Я обязан этим замечанием Р. Пайерлсу. О собственной энергии гармонического осциллятора см. L. Rosenfeld, *Zs. f. Phys.*, 70, 454, 1931.

Далее следует сначала просуммировать по λ , затем по 4 возможным, при заданном \vec{K} , состояниям материальной частицы и проинтегрировать по \vec{x}' , \vec{x} и \vec{K} . Вычисление даёт, как показали Валлер¹⁾ и Оппенгеймер²⁾, зависящее от \vec{k} выражение, которое обращается в бесконечность для больших \vec{k} . Именно, ΔE содержат два члена, которые после интегрирования по всем направлениям \vec{k} принимают следующий вид:

$$\Delta E = f_1(K_m) \int_0^\infty |k| dk + f_2(K_m) \int_0^\infty dk.$$

Для частицы, покоящейся в начальный момент, f_1 отлично от нуля, в то время как f_2 для малых K_m пропорционально $|\vec{K}_m|^2$, т. е. квадрату скорости. Первый (положительный) член соответствует энергии спина, второй (отрицательный) член — возникающему вследствие трансляционного движения магнитному полю.

Прямой связи между трудностью с бесконечно большой собственной энергией и ранее обсуждавшейся трудностью с состояниями отрицательной энергии нет. Даже теории, допускающие лишь состояния положительной энергии (исключение промежуточных состояний с отрицательной энергией по Шредингеру или замена оператора Гамильтона $\sum_k \vec{\alpha}_k \vec{\pi}_k + mc\beta$ оператором $mc^2 + \frac{1}{2m} \sum_k \vec{\pi}_k^2$), приводят к бесконечно большой собственной энергии.

Далее подчеркнём, что трудность с бесконечно большой собственной энергией появляется уже в том приближении (члены, пропорциональные e^2), которое требуется для теории дисперсии. Эту трудность избегают в теории дисперсии лишь тем, что при обсуждении решения для функции Ψ ограничиваются членами, содержащими резонансный знаменатель для энергии и сильно нарастающими со временем.

Мы видели, что трудность собственной энергии происходит, главным образом, из-за коротких волн

¹⁾ I. Waller, *Zs. f. Phys.*, **62**, 673, 1930.

²⁾ J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.*, **35**, 461, 1930.

поля излучения, следовательно, из-за малых длин. Спрашивается, помогло ли бы такое изменение теории, которое соответствовало бы конечному протяжению электрона в классической электродинамике. *Формально такое изменение теории возможно, но лишь ценой отказа от релятивистской инвариантности теории.*

Не меняя оператора Гамильтона (175) и выражения для импульса (176), можно ввести «форм-фактор» электрона $D(\vec{x})$ в перестановочные соотношения между $\vec{\pi}_i^{(s)}$ друг с другом и $\vec{\pi}_i$ с электрической напряжённостью \vec{E} . Этот «форм-фактор» $D(\vec{x})$ должен быть заметно отличен от нуля лишь для x порядка классического радиуса-электрона $d = e^2/mc^2$ (а в остальном может быть произволен)¹⁾. Тогда перестановочные соотношения (168) и (174) должны быть заменены следующими:

$$[\pi_j^{(s)}, \pi_i^{(s')}] = \delta_{ss'} \frac{\hbar e}{ic} \int D(\vec{x} - \vec{X}^{(s)}) H_{ij}(\vec{x}) d\vec{x}^{(3)}, \quad (168')$$

$$[\pi_i^{(s)}, E_j(x)] = (-e) \frac{\hbar}{i} (-\delta_{ij}) D(\vec{x} - \vec{X}^{(s)}). \quad (174')$$

Дополнительное условие (173₂) будет заменено следующим:

$$\operatorname{div} \vec{E} = (-e) \sum_{s=1}^n D(\vec{x} - \vec{X}^{(s)});$$

уравнения движения будут:

$$\frac{d\vec{\pi}_h}{dt} = (-e) \int D(\vec{x} - \vec{X}^{(s)}) \left\{ \vec{E}_k(\vec{x}) + \sum_l H_{kl}(\vec{x}) \vec{x}_l^{(s)} \right\} d\vec{x}^{(3)}$$

и, наконец, уравнения Максвелла для тока:

$$-\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}(\vec{x})}{\partial t} + \operatorname{rot} \vec{H}(\vec{x}) = (-e) \sum_{s=1}^n \vec{x}^{(s)} D(\vec{x} - \vec{X}^{(s)}).$$

Собственная энергия будет конечна, потому что из-за D -функции она приобретает множитель, который

¹⁾ См. М. Born и G. Rumer, Zs. f. Phys., **69**, 141, 1931.

практически сводит на-нет подинтегральное выражение в k -пространстве для $k \gg 1/d$ (фактор структуры электрона).

Так как, однако, при этом теряется, как и в случае соответствующего приёма в классической теории, релятивистская инвариантность теории — в штрихованной координатной системе D содержит явно время — такой приём вряд ли годится для решения трудности с собственной энергией. То обстоятельство, что собственная энергия становится по теории бесконечно большой, препятствует также последовательному релятивистскому рассмотрению проблемы многих тел¹⁾.

Замечательно, что формально совершенно аналогично случаю электрона получается также бесконечно большая собственная энергия создаваемого световым квантом гравитационного поля, когда последнее квантуется, хотя здесь в классической теории и не имеется точечной особенности²⁾. Это связано с тем, что, как уже подчёркивалось в § 7, применение волновомеханического аппарата к системе с бесконечно большим числом степеней свободы является выходом за пределы допустимого по принципу соответствия. Мы можем усмотреть здесь указание на то, что не только понятие поля, но также и понятие «пространства — времени» для малых областей подлежит коренному изменению.

О необходимых изменениях понятия поля можно заметить ещё следующее: современная теория покоится на двух логически независимых основах. Это — волновая механика материальной частицы и волновая меха-

¹⁾ Приближённые рассмотрения этой проблемы имеются у Брейта (G. Breit, *Phys. Rev.*, **34**, 553, 1929; **36**, 383, 1930) (магнитное взаимодействие, но без запаздывания), *Handb. d. Phys.*, т. XXIV, ч. I, 1933, гл. III; C. Moiler, *Zs. f. Phys.*, **70**, 786, 1931 (соударения со слабым запаздывающим взаимодействием), далее, *Ann. d. Phys.*, **14**, 531, 1932; см. также *Handb. d. Phys.*, т. XXIV, ч. I, 1933, гл. 3, § 50, гл. 5, § 6; см. также A. D. Fokker, *Physica*, **12**, 145, 1932 и *Zs. f. Phys.*, **58**, 386, 1929, где рассматривается проблема двух тел с частично запаздывающим, частично опережающим потенциалами, при которых классически излучения нет.

²⁾ L. Rosenfeld, *Zs. f. Phys.*, **65**, 589, 1930; J. Solomon, *ibid.*, **71**, 162, 1931.

ника поля излучения (теория фотонов). (В классической теории им соответствуют механика точки и уравнения Максвелла.) С этим связано то, что эта теория не позволяет рассчитать атомную структуру электрического заряда, так как она согласуется с произвольно большими, а также с произвольно малыми электрическими элементарными зарядами. С этим связана также (неудачная) попытка всё собственное поле движущегося электрона превратить в фотоны, вместо того, чтобы представлять это поле как существующее с электроном, неделимое целое, что неразрывно связано с определённым значением безразмерного числа $e^2/\hbar c$. Здесь будущая полная релятивистская теория должна внести глубокое разъяснение основных положений.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Адиабатические изменения параметров 139 и далее
- Внезапное изменение параметров 143
- Волновая функция системы частиц 57
- — — частиц со спинами 186
- Волновое уравнение в произвольных криволинейных координатах 68
- — в сферических координатах 69
- — свободной частицы 28
- — частицы в магнитном поле 50
- — частицы в потенциальном поле 45
- Волновой вектор 10
- пакет 9
- — в теории Дирака 255
- Вторичное квантование 204
- Градиентная инвариантность (eich-инвариантность) 53
- Диагональные элементы матрицы 90
- Дирака уравнение для электрона:
- — —, переход к неквантовой релятивистской механике 276
- — — — к нерелятивистской теории 271
- — — — при наличии поля 263
- — — —, релятивистская инвариантность 243
- Дирака уравнение для свободного электрона 235
- Дифференциальное уравнение проблемы собственных значений и вариационный принцип 86
- Дополнительные понятия 17
- Измерения 1-го рода 123
- 2-го рода 124
- Квантование свободного излучения 293
- Координатные матрицы вектора 174—175
- Кратность состояния (вес) 79
- Линейный оператор 29, 63
- Матрица плотности 118
- Метод возмущений:
- для непрерывного спектра 128
- для нестационарных возмущений 134
- для стационарных возмущений 133
- Некомбинирующиеся серии термов 190
- Одномерное движение 154
- Оператор Гамильтона 58
- для взаимодействующих частиц 60
- для не взаимодействующих частиц 59
- Оператор преобразования 91
- Перестановочные соотношения 62

- Переход к классической механике (криволинейные координаты) 152
 Плотность и поток вероятности свободной частицы в пространстве импульсов 32
 — — — свободной частицы в пространстве координат 32
 — — — в силовом поле 45
 — — — в теории Дирака 248, 251
 Представления неприводимые 168
 — приводимые 167
 Принцип Паули 193
 — суперпозиции 8—9, 43
 Проблема собственных значений 70
 Проецирующий оператор 84
 Производная среднего значения оператора по времени 64
 Редукция 117, 167
 Рессель-саундерсовская связь 195
 Смесь 117
 Собственные функции 79
 Соотношение неопределённости 12, 39
 Спектр энергии осциллятора 75
 — — электрона в поле ядра 75
 Спин частицы 180
 — — возможность его измерения 279
 Спонтанное излучение света 225
 Среднее значение функций 33
 Средняя протяжённость пакета 33
 Статистика Бозе-Эйнштейна 202
 — Ферми-Дирака 202
 Статистически независимые частицы 56
 Стационарные состояния 70
 Тензор напряжений 46, 51, 61
 — энергии-импульса 268
 Унитарная матрица 93
 Унитарный оператор 93
 Уравнение Гамильтона-Якоби 149
 — непрерывности для взаимодействующих частиц 61
 Условие нормировки 80
 — полноты 81
 Формула де-Бройля 16
 Характер зеркального отображения 180
 Центально-симметричное поле 76
 Чистое состояние 116
 Эрмитовость оператора 44, 57, 63.

Редактор *В. А. Угаров*. Техн. редактор *Н. А. Тумаркина*. Подписано
к печати 31/VII 1947 г. 20,75 печ. л. 18,28 уч.-изд. л. 35 600 тип. зн.
в печ. л. Тираж 10 000 экз. А-06374. Цена книги 12 р. 50 к. Переплёт 2 р.
Заказ № 1323.

16-я тип. треста «Полиграфкнига» ОГИЗа при Совете Министров СССР,
Москва, Трёхпрудный, 9.